Le paramagnétisme de Pauli

Cours de M1, physique statistique quantique

Julien Baglio
julien.baglio@ens.fr

7 octobre 2006

Résumé

Cet exposé est extrait du cours de physique statistique de Jacques Treiner, dans le cadre du M1 de physique de l'ENS Cachan. Il a pour objectif de donner le développement à basse température de la magnétisation d'un système de spin fermionique dans une boîte quantique 3D, notamment en ce qui concerne la dépendance vis-à-vis de l'énergie de Fermi du système.

1 Rappels sur la distribution de Fermi-Dirac

1.1 Distribution de Fermi-Dirac

Soit un système de N fermions indépendants à une température T donnée. La distribution de Fermi-Dirac est la probabilité d'occupation par un fermion individuel du niveau quantique individuel d'énergie E à une température T donnée, ou encore le nombre moyen d'occupation de ce niveau :

$$f(E_k, T) = < n_k > = \frac{1}{\exp(\beta(E_k - \mu)) + 1} \tag{1}$$

avec $\beta = \dfrac{1}{kT}$, μ potentiel chimique du système, appelé encore niveau de Fermi. Ainsi si l'on se place dans la limite continue, $f(E,T)\rho(E)dE$ est le nombre de fermions dans l'état d'énergie E à dE près, $\rho(E)$ étant la densité de niveau $\rho(E) = \dfrac{dn}{dE}$.

Pour trouver cette distribution, on se place dans le grand canonique pour le système total des N fermions, et on utilise le principe de Pauli.

1.2 Calcul de la densité et développement du potentiel chimique pour un gaz 3D

On se place dans une boîte quantique de volume V. On sait que l'énergie à une particule est quantifiée selon $E_k = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ où k est la norme du vecteur d'onde dans l'espace des phases (on rappelle que $k_x = \frac{2\pi l}{a}$, $l \in \mathbb{N}^*$ et de même suivant y et z, $V = abc$). On a donc $\rho(E_k)dE_k = \frac{V}{(2\pi)^3} g 4\pi k^2 dk$ (volume dans l'espace des phases divisé par le volume élémentaire), g est le facteur de spin ou d'isospin (2 pour les électrons, 4 pour les nucléons). Ainsi on a pour la densité volumique

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{g}{2\pi^2} \int \frac{k^2 dk}{1 + \exp(\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu))}$$

En faisant un petit changement de variable, on a donc à calculer

$$\rho = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta \hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{1 + e^{x-a}}$$

avec $a = \beta\mu$.

On utilise alors le lemme de Sommerfeld (voir section 2) pour le développement à basse température :

$$\frac{1}{1 + e^{x-a}} = \Theta(a - x) - \frac{\pi^2}{6} \delta'(x - a) + ... \tag{2}$$

au sens des distributions.

On rappelle la définition de l'énergie de Fermi : c'est l'énergie maximale atteignable par un fermion dans l'état fondamental du système de N fermions. Dans l'espace des vecteurs d'onde, cela correspond à l'énergie associée au vecteur d'onde maximal, c'est-à-dire au rayon d'une sphère appellée sphère de Fermi. On note ce vecteur d'onde k_F. Le calcul de la densité à $T = 0$ donne alors $\rho = \frac{g}{6\pi^2} k_F^3$.

On étudie un système à densité fixée, donc $\rho(T = 0) = \rho(T \gtrsim 0)$. Cela permet d'écrire le développement à basse température du niveau de Fermi. Après application du lemme de Sommerfeld pour la densité on obtient

$$\rho(T) = \frac{g}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right) + O(T^2) \tag{3}$$

Et si l'on fait l'égalité avec $\rho(T = 0)$, on obtient au final

$$E_F = \mu^{3/2} \left(1 + \frac{3\pi}{24} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right)$$

Ayant donc à $T = 0$ $\mu = E_F$ l'énergie de Fermi, on obtient au final après un développement limité au premier ordre en T^2 :

$$\mu(T) = E_F \left(1 - \frac{\pi}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right) + O(T^2) \tag{4}$$

2 Lemme de Sommerfeld

Lemme 1 (Lemme de Sommerfeld) *Pour $a << 1$ on a au sens des distributions*

$$\frac{1}{e^{x-a}+1} = \Theta(a-x) - \frac{\pi^2}{6}\delta'(x-a) + ...$$

On va démontrer ce théorème pour la classe de fonctions test qui nous intéresse, à savoir les fonctions C^∞ à support compact et telles que en dehors de $[0; a+\delta a]$ elles sont nulles (ce qui est le cas de la distribution de Fermi à basse température, avec δa de l'ordre de $kT << \mu$).

On prend ϕ' pour notre fonction test (on peut la prendre comme dérivée d'une primitive puisque les fonctions de test sont C^∞ et cela sera très utile).

On a $\int_{\mathbb{R}} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx = \int_{-\infty}^{a} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx + \int_{a}^{+\infty} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx$. Dans le premier membre on ajoute et on enlève $\phi'(x)$ ce qui donne

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx = -\int_{-\infty}^{a} \frac{\phi'(x)e^{x-a}}{1+e^{x-a}}dx + \int_{-\infty}^{a} \phi'(x)dx + \int_{a}^{+\infty} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx$$

On effectue deux changements de variable : $u = a - x$ dans la première intégrale, $u = x - a$ dans la dernière, et l'on obtient

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx = \int_{\infty}^{0} \frac{\phi'(a-u)}{1+e^{u}}du + \phi(a) + \int_{0}^{+\infty} \frac{\phi'(a+u)}{1+e^{u}}du$$

On utilise maintenant l'hypothèse faite sur ϕ', à savoir sa nullité en dehors de l'intervalle $[0; a+\delta a]$. On effectue alors un développement limité au voisinage de a : $\phi'(a-u) = \phi'(a) - u\phi''(a) + o((a-u))$. On peut l'intégrer sur tout $[0; +\infty]$ grâce à notre hypothèse, ce qui ne changera guère le résultat final (cela le change d'un certain $O(a^2)$). On a donc

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx = \phi(a) + 2\phi''(a)\int_{0}^{+\infty} \frac{u}{1+e^{u}}du + O(a^2)$$

Or on sait que $\int_{0}^{+\infty} \frac{u}{1+e^{u}}du = \frac{\pi^2}{12}$ (il suffit de faire un développement en série entière de $u \mapsto \frac{1}{1+e^{-u}}$ et d'utiliser les théorèmes de Lebesgue). Sachant que $< \delta'(x-a), f >= - < \delta(x-a), f' >$ on a bien

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\phi'(x)}{1+e^{x-a}}dx =< \Theta(a-x), \phi' > -\frac{\pi^2}{6} < \delta'(x-a), \phi' > +O(a^2)$$

3 Magnétisation du système de spin

On étudie un système de fermions indépendants et avec spin, que l'on a plongé dans un champ magnétique constant B. On utilise donc la statistique de Fermi-Dirac (1), et ici $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm MB$

selon l'orientation du spin. Il y a donc levée de dégénérescence dans le cas de spin $\frac{1}{2}$ par exemple. La densité ρ reste fixée, mais dans ce problème N_+ et N_- vont apparaître (respectivement nombre de spin up et de spin down). On va obtenir le développement de la magnétisation à basse température et à champ faible.

Formellement, le calcul va être identique à celui déjà effectué dans la section 1, en remplaçant μ par $\mu_\pm = \mu \mp MB$, et à l'équilibre on sait qu'il y a égalité des potentiels chimiques $\mu_+ = \mu_-$.

3.1 Calcul de la densité volumique

On utilise (3) pour ρ_+ et ρ_-, avec $g = 1$ puisque il y a levée de dégénerescence, et $\rho = \rho_+ + \rho_-$ donc on a au premier ordre en T^2

$$\rho(T) = \frac{1}{6\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left((\mu - MB)^{3/2}\left(1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu - MB}\right)^2\right) + (\mu + MB)^{3/2}\left(1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu + MB}\right)^2\right)\right)$$

On exploite maintenant le fait que $B << 1$. On effectue un développement au deuxième ordre pour $(\mu \pm MB)^{3/2}$ (car les termes à l'ordre 1 s'annulent, ce qui est logique puisque pour la densité totale le système est invariant par permutation des spins), et seulement à l'ordre 0 pour les termes en $(\mu - MB)^{-2}$ car ils ne rajoutent que des termes en μ^3 qui ne nous intéressent pas pour l'ordre 2 en T. On a donc au final

$$\rho(T, B) = \frac{\mu^{3/2}}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left(1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right)\left(1 + \frac{3}{8}\frac{M^2B^2}{\mu^2}\right) \tag{5}$$

La densité étant fixée, elle est égale à la densité en l'absence de champ et à $T = 0$. On réutilise le même type de raisonnement que pour (4), ce qui nous donne au final

$$\mu(T, B) = E_F\left(1 - \frac{1}{4}\frac{M^2B^2}{E_F^2} - \frac{\pi^2}{12}\frac{k^2T^2}{E_F^2}\right) + O(\|(B, T)\|^2) \tag{6}$$

3.2 Calcul de la magnétisation

Pour calculer la magnétisation, il suffit de reprendre le calcul ci-dessus en changeant certains signes, puisque $\mathcal{M} = MV(\rho_+ - \rho_-)$. Ainsi le développement au premier ordre de $(\mu - MB)^{3/2} - (\mu + MB)^{3/2}$ fait maintenant apparaître des termes non-nuls. On a donc en l'utilisant

$$\mathcal{M} = \frac{-3M^2BV\mu^{1/2}}{6\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left(1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right)$$

On effectue un développement limité sur $\mu^{1/2}$ en exploitant l'expression (6) on obtient au final

$$\mathcal{M}(B, T) = -B\frac{VM^2}{2\pi^2}E_F^{1/2}\left(1 + \frac{\pi^2}{12}\frac{k^2T^2}{E_F^2}\right) + O(B, T^2) \tag{7}$$