

Théorie de la résonance paramagnétique d'impuretés dans les métaux

Autor(en): **Giovannini, B.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **41 (1968)**

Heft 2

PDF erstellt am: **13.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-113878>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Théorie de la résonance paramagnétique d'impuretés dans les métaux

par **B. Giovannini**

Institut de Physique Expérimentale, Université Genève

(7 X 67)

Résumé. La résonance paramagnétique d'impuretés dans les métaux est analysée à l'aide d'une méthode de perturbation ad hoc. Les résultats sont interprétés par comparaison avec des modèles simples.

Introduction

Le système considéré [1] est formé d'impuretés de spin (d'une seule espèce) dans un réseau métallique, et le modèle d'interaction entre les spins et le réseau est défini par l'Hamiltonien d'échange [2]

$$\mathcal{H}_{ei} = - N^{-1} \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n} \{ S_z^n (\varrho_{\uparrow}(\mathbf{q}) - \varrho_{\downarrow}(\mathbf{q})) + S_+^n \varrho_{-}(\mathbf{q}) + S_-^n \varrho_{+}(\mathbf{q}) \} \quad (1)$$

où la somme est à faire sur toutes les positions \mathbf{R}_n d'impuretés, N est le nombre d'atomes par unité de volume, $J(\mathbf{q})$ est le paramètre d'échange [3], $S_{\pm,z}^n$ sont les opérateurs de spin pour la position \mathbf{R}_n et $\varrho_{\uparrow,\downarrow,\pm}(\mathbf{q})$ sont les opérateurs de densité électronique

$$\varrho_{\uparrow}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\pm}^{+}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_{\pm}(\mathbf{k}) \quad (2)$$

$$\varrho_{\pm}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\pm}^{+}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_{\mp}(\mathbf{k}) \quad (3)$$

où $a_{+}(\mathbf{k})$ ($a_{+}^{+}(\mathbf{k})$) sont les opérateurs d'annihilation (création) d'un électron de spin up et d'impulsion \mathbf{k} [4]. L'Hamiltonien complet peut s'écrire schématiquement

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_i + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ei} \quad (4)$$

\mathcal{H}_i est l'Hamiltonien pour les variables de spin seulement, et \mathcal{H}_e est l'Hamiltonien pour les variables électroniques et de réseau seulement. De plus \mathcal{H}_i est choisi de telle manière qu'il ne contienne aucune interaction entre les spins. La seule interaction entre les spins sera donc une interaction effective via \mathcal{H}_{ei} .

Le modèle présenté ci-dessus permet d'expliquer de façon satisfaisante de nombreuses propriétés des alliages dilués d'impuretés magnétiques [2], en particulier les propriétés de résonance paramagnétique [5]. Ce modèle est devenu relativement célèbre au cours des deux dernières années, car il a permis à J. KONDO [6] d'expliquer un phénomène resté longtemps mystérieux: le minimum de résistance en fonction de la température. Cette explication a soulevé à son tour de nombreux problèmes

théoriques [7] qui ont trait en particulier à la justification du modèle lui-même. Nous nous proposons de discuter dans ce travail les propriétés de résonance paramagnétique du modèle. L'influence de la condensation de KONDO sur les propriétés de résonance est triviale si on prend pour Hamiltonien celui qui est discuté habituellement dans ce contexte (impureté magnétique + électrons libres + interaction d'échange). Ceci sera discuté dans la partie I. Dans le cas général (avec interactions électron-électron et électrons-réseau) le problème est plus ardu et nous ne le discuterons pas [9]. Ceci est parfaitement légitime si on considère un système pour lequel

$$|J| N(0) \ll 1$$

où $J = J(0)$ et $N(0)$ est la densité d'états à la surface de Fermi. En effet la température critique T_c de la condensation de KONDO est de l'ordre de

$$T_c \sim D e^{-1/N(0)|J|}$$

où D est la largeur de la bande.

On discute habituellement les expériences de résonance électronique d'impuretés à l'aide de résultats théoriques obtenus pour la résonance nucléaire (déplacement de KNIGHT, relaxation de KORRINGA), en tenant compte si c'est nécessaire d'effets de goulots d'étranglement [10] (bottleneck effects). Il y a cependant une différence fondamentale entre la résonance nucléaire et la résonance ionique: la fréquence de résonance nucléaire est beaucoup plus petite que la fréquence de résonance des électrons de conduction, de sorte que ceux-ci sont pratiquement inertes, alors que la résonance ionique est en fait la résonance de deux systèmes de spins à fréquences de résonance très rapprochées: les impuretés et les électrons de conduction.

On ne peut négliger cet aspect que lorsque le temps de relaxation du spin des électrons de conduction est infiniment rapide. Même dans cette limite il se pose la question [10] difficile de la direction dans laquelle les électrons de conduction relaxent. Nous reviendrons sur ce point.

Délimitons maintenant exactement le problème étudié.

Si \mathcal{H}_e ne contient aucun terme dépendant du spin excepté l'énergie ZEEMAN et si les facteurs gyromagnétiques des impuretés et des électrons de conduction sont identiques, on n'observera aucun effet de l'interaction d'échange (1) sur les propriétés de résonance uniforme. (Ceci sera démontré dans la partie I.) Si l'une ou l'autre de ces deux conditions n'est pas réalisée, le problème devient extrêmement complexe. Dans le travail présenté ici, nous considérons le cas où les spins des électrons de conduction relaxent rapidement [11] (dans un sens qu'il reste à préciser) et nous présentons une description microscopique du problème à l'aide de diagrammes (analogues aux diagrammes de FEYNMAN).

Il a été démontré après coup [12] qu'une partie de ces résultats peuvent s'obtenir à l'aide d'une théorie de champ moléculaire discutée pour la première fois par HASEGAWA [10].

Dans la partie I le cadre formel du problème est exposé. La partie II est consacrée à la discussion de deux modèles simples.

Les résultats obtenus par la méthode de perturbation sont exposés et discutés la partie III.

PARTIE I

A) De manière générale, on décrit une expérience de résonance par la réponse d'un système de spins à un champ extérieur dépendant du temps en présence d'un champ statique. Dans notre modèle, le champ statique est choisi dans la direction z ($:H_z$) et le champ $\mathbf{H}^{\sim}(t)$ dans le plan $x - y$ et homogène.

L'Hamiltonien peut s'écrire

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}' \quad (5)$$

où \mathcal{H}_s est l'Hamiltonien du système isolé dans le champ H_z et \mathcal{H}' l'interaction avec $\mathbf{H}^{\sim}(t)$.

$$\mathcal{H}'(t) = -\mathbf{M}(t) \mathbf{H}^{\sim}(t). \quad (6)$$

La grandeur mesurée est l'aimantation $\ll M(t) \gg$ (où $\ll A \gg$ signifie $\text{Tr } W A$ et W est l'opérateur de densité) qui sera une fonctionnelle du champ magnétique $\mathbf{H}^{\sim}(t)$; cette fonctionnelle peut être écrite sous la forme d'une série ordonnée selon les puissances de $\mathbf{H}^{\sim}(t)$

$$\ll M_{\alpha}(t) \gg = \sum_{n \alpha_i} \int dt_1 \dots dt_n \chi^{\alpha_i \alpha_1 \dots \alpha_n}(t; t_1 \dots t_n) \mathbf{H}_{\alpha_1}^{\sim}(t_1) \dots \mathbf{H}_{\alpha_n}^{\sim}(t_n) \quad (7)$$

où les α_i sont les indices des composantes des vecteurs \mathbf{M} et \mathbf{H} .

L'approximation de réponse linéaire consiste à ne considérer de cette série que les termes d'ordre zéro et un; la susceptibilité linéaire est donnée par la formule de KUBO [13]

$$\ll M_{\alpha}(t) \gg = \sum_{\alpha_i} \int dt_1 \chi^{\alpha \alpha_i}(t - t_1) \mathbf{H}_{\alpha_i}^{\sim}(t_1) \quad (8)$$

$$\chi^{\alpha \alpha_i}(t) = i \ll [M_{\alpha}(t), M_{\alpha_i}(0)] \gg \vartheta(t) \quad (9)$$

où $\vartheta(t) = 1$ pour $t \geq 0$ et $\vartheta(t) = 0$ pour $t < 0$. Le travail présenté dans cette thèse est tout entier basé sur l'approximation linéaire, et sur la formule de KUBO.

L'expression

$$\phi^{\alpha \alpha_i}(t) = i \int_t^{\infty} \ll [M_{\alpha}(t'), M_{\alpha_i}(0)] \gg dt' \quad (10)$$

est reliée par une transformation simple à la fonction

$$\psi^{\alpha \alpha_i}(t) = \ll \{M_{\alpha}(t), M_{\alpha_i}(0)\} \gg \quad (11)$$

où

$$\{A, B\} = \frac{1}{2} (A B + B A).$$

En effet [13]

$$\psi^{\alpha \alpha_i}(w) = \frac{w}{2} \coth\left(\frac{w}{2T}\right) \phi^{\alpha \alpha_i}(w) \quad (12)$$

où T est la température et

$$\psi^{\alpha\alpha_i(\omega)} = \int e^{i\omega t} \psi^{\alpha\alpha_i(\omega)} dt .$$

Cette formule signifie que la réponse linéaire d'un système à un champ extérieur est reliée très étroitement aux fluctuations spontanées du système mesurées par (11). Cette phrase exprime l'essentiel du théorème de fluctuation-dissipation [13]. On peut retourner le théorème et dire que la réponse d'un système peut être décrite par une théorie linéaire si la perturbation due au champ extérieur est comparable quantitativement et qualitativement aux fluctuations spontanées du système. Ceci est une condition restrictive qui n'est satisfaite dans le voisinage de la résonance que si les temps de relaxation sont suffisamment courts.

B) A cause de la conservation du moment angulaire, on peut écrire les formules (8) et (9) de la manière suivante

$$\langle\langle M_{\pm}(t) \rangle\rangle = \frac{i}{2} \int dt_1 \langle\langle [M_{\pm}(t), M_{\mp}(t_1)] \rangle\rangle \vartheta(t - t_1) H_{\pm}^{\sim}(t_1) \quad (13)$$

et le problème se réduit au calcul de la fonction

$$\chi_{-}(t) = \frac{i}{2} \langle\langle [M_{-}(t), M_{+}(0)] \rangle\rangle \vartheta(t) \quad (14)$$

car la fonction

$$\chi_{+}(t) = \frac{i}{2} \langle\langle [M_{+}(t), M_{-}(0)] \rangle\rangle \vartheta(t) \quad (15)$$

est reliée à $\chi_{-}(t)$ par des relations évidentes. Nous verrons par la suite que pour un système de spins libres, la transformée de Fourier de $\chi_{-}(t)$ a la forme

$$\chi_{-}(\omega) = \frac{c}{\omega - \omega_i + i\delta} \quad (16)$$

où ω_i est la fréquence de LARMOR, c est une constante et $\delta = 0^+$. La partie réelle de $\chi_{-}(\omega)$ donne la dispersion et la partie imaginaire l'absorption. La ligne d'absorption que nous appellerons la ligne de résonance, est alors une fonction δ centrée sur ω_i . Les interactions vont à la fois déplacer le centre de la ligne et la déformer. Les calculs de perturbation faits par la suite conduisent à une forme du type

$$\chi_{-}(\omega) = \frac{c}{\omega - \omega_i + \Sigma(\omega)} . \quad (17)$$

Si

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial \omega} = 0$$

$$\chi_{-}(\omega) = \frac{c}{\omega - \omega_i + \Sigma} \quad (18)$$

la ligne de résonance est Lorentzienne:

$$\mathcal{A}(\omega) = \frac{-c \operatorname{Im} \Sigma}{(\omega - \omega_i + \operatorname{Re} \Sigma)^2 + (\operatorname{Im} \Sigma)^2} . \quad (19)$$

Dans ce cas $Im \Sigma$ est à interpréter comme l'inverse d'un temps de vie (ou de relaxation) et $Re \Sigma$ comme un déplacement du centre de la ligne. On définit habituellement deux temps de relaxation :

a) T_1 est le temps de relaxation qui décrit le retour de $M_z(t)$ à sa position d'équilibre lorsqu'on coupe le champ $H \sim(t)$; cette relaxation est nécessairement due à une interaction du système de spins avec un bain thermique (réseau).

b) T_2 est le temps de relaxation qui décrit la disparition des composantes $M_{\pm}(t)$ lorsqu'on coupe le champ $H \sim(t)$; cette disparition peut être due soit à une perte de cohérence entre les différents spins, soit à une relaxation dans la direction z . Il s'en suit que

$$T_2 \leq 2 T_1$$

Il est clair d'après nos définitions que $Im \Sigma = 1/T_2$. La meilleure manière de mettre en relief le sens physique de l'équation (18) est peut-être de calculer l'aimantation pour un champ

$$H_{\pm}(t) = H (\cos \omega_0 t \pm i \sin \omega_0 t) \vartheta(-t) = H e^{\pm i \omega_0 t} \vartheta(-t) \quad (20)$$

c'est-à-dire

$$H_x(t) = H \cos \omega_0 t \vartheta(-t) \quad H_y(t) = H \sin \omega_0 t \vartheta(-t). \quad (21)$$

Dans ce cas

$$\begin{aligned} \langle\langle M_-(t) \rangle\rangle &\equiv M_-(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} M_-(\omega) e^{-i\omega t} \\ &= \frac{cH}{\omega_0 - \omega_i + \Sigma} \{e^{-i\omega_0 t} \vartheta(-t) + e^{-i(\omega_i - \Sigma)t} \vartheta(t)\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Pour $t < 0$

$$\begin{aligned} M_x(t) &= H (Re \chi_-(\omega_0) \cos \omega_0 t + Im \chi_-(\omega_0) \sin \omega_0 t) \\ M_y(t) &= H (Re \chi_-(\omega_0) \sin \omega_0 t - Im \chi_-(\omega_0) \cos \omega_0 t). \end{aligned} \quad (23)$$

La comparaison de cette équation avec (21) montre que $Re \chi_-(\omega)$ décrit la composante de l'aimantation qui est en phase avec le champ et $Im \chi_-(\omega)$ décrit la composante qui est déphasée de $\pi/2$.

C) Il s'agit donc de calculer la fonction $\chi_-(t)$ définie par

$$\chi_-(t) = \frac{i}{2} \langle\langle [M_-(t), M_+(0)] \rangle\rangle \vartheta(t) \quad (14)$$

où

$$M_{\pm}(t) = e^{i\mathcal{H}_s t} M_{\pm} e^{-i\mathcal{H}_s t} \quad M_{\pm} = M_{\pm}^e + M_{\pm}^i \quad M_{\pm}^e = g_e \mu \varrho_{\pm} (\mathbf{q} = 0) \quad (24)$$

(ϱ_{\pm} est défini par (3))

$$M_{\pm}^i = g_i \mu \Sigma S_{\pm}^n$$

g_i et g_e sont les facteurs g reliés aux facteurs magnétomécaniques γ_i par

$$\gamma_i = g_i \mu$$

μ est le magnéton de BOHR ($\mu < 0$)

$$\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_i + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ei} \quad (25)$$

$$\mathcal{H}_i = w_i \Sigma S_z^n \quad (26)$$

$$\mathcal{H}_e = \mathcal{H}_e^0 + \mathcal{H}_e^{int} = \Sigma E(\mathbf{k}) a_\sigma^t(\mathbf{k}) a_\sigma(\mathbf{k}) + \frac{w_e}{2} \{ \varrho_\uparrow(q=0) - \varrho_\downarrow(q=0) \} + \mathcal{H}_e^{int} \quad (27)$$

\mathcal{H}_{ei} est défini par (1), $w_i = g_i |\mu| H$, $w_e = g_e |\mu| H$, \mathcal{H}_e^{int} contient toutes les interactions électrons-électrons et électrons-réseau, $E(\mathbf{k})$ est l'énergie cinétique d'un électron d'impulsion \mathbf{k} .

Le calcul de la fonction de corrélation (14) est en général très compliqué; il est très simple cependant dans la limite où $g_i = g_e$ et où \mathcal{H}_e^{int} ne contient aucun terme dépendant du spin.

Considérons en effet l'équation de mouvement de $\chi_-(t)$

$$\frac{d}{dt} \chi_-(t) = \frac{i}{2} \delta(t) \ll [M_-(0), M_+(0)] \gg + \frac{i}{2} \vartheta(t) \ll [[\mathcal{H}_s(t), M_-(t)], M_+(0)] \gg .$$

Sa transformée de Fourier s'écrit alors

$$\chi_-(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\ll [M_+(0), M_-(0)] \gg}{\omega - w_i + i \delta} = \frac{g^2 \mu^2 \ll \Sigma S_z \gg + g^2 \mu^2 / 2 \ll \varrho_\uparrow(q=0) - \varrho_\downarrow(q=0) \gg}{\omega - w_e + i \delta} \quad (28)$$

car dans ce cas $[\mathcal{H}^{int} + \mathcal{H}_{ei}, M_-] = 0$ et \mathcal{H}_{ei} n'a donc d'influence que sur l'amplitude de la résonance, mais non sur la position de la raie ni sur sa largeur. En corollaire, on voit que la condensation de KONDO n'a aucune influence dramatique [9] sur les propriétés de résonance. Le terme $i \delta$ ($\delta = 0^+$) est ajouté de manière à satisfaire les relations de dispersion. De (28) on peut tirer immédiatement la valeur de $\chi_-(\omega)$ pour des ions et électrons libres.

PARTIE II

Pour fixer les idées on peut considérer deux modèles simples:

A) Considérons d'abord deux spins \mathbf{S}^i et \mathbf{S}^e couplés par une interaction d'échange. A chaque spin on assigne un taux de relaxation introduit phénoménologiquement. Ce problème est facile à résoudre à température zéro: il s'agit de calculer la valeur d'attente

$$M_-(t) = \mu \langle \psi(t) | g_i S_-^i + g_e S_-^e | \psi(t) \rangle$$

où $\psi(t)$ est la solution de l'équation d'onde

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + V(t)$$

$$\mathcal{H}_0 = w_i S_z^i + w_e S_z^e - 2 J \mathbf{S}^i \cdot \mathbf{S}^e + \text{dissipation}$$

$$V(t) = -\mu H \{ (g_i S_+^i + g_e S_+^e) e^{-i\omega t} + (g_i S_-^i + g_e S_-^e) e^{i\omega t} \}.$$

La dissipation est choisie de telle manière que si on interrompt $V(t)$, S^i et S^e relaxent dans la direction z . H est l'amplitude du champ oscillant $H \sim(t)$.

On trouve sans difficultés le terme linéaire en H

$$M_-(\omega) = \chi_-(\omega) H e^{-i\omega t}$$

$$\chi_-(\omega) = \frac{\mu F}{\omega - (w_i + w_e)/2 - J + i(\delta_i + \delta_e)/2 + (J^2 + (i(\delta_i - \delta_e)/2 - (w_i - w_e)/2)^2)^{1/2}} + \frac{\mu G}{\omega - (w_i + w_e)/2 - J + i(\delta_i + \delta_e)/2 - (J^2 + (i(\delta_i - \delta_e)/2 - (w_i - w_e)/2)^2)^{1/2}} \quad (29)$$

F et G sont des constantes indépendantes de ω .

Dans la limite $g_i = g_e$, $\delta_i = \delta_e = 0^+$ on trouve

$$\chi_-(\omega) = \frac{\mu F}{\omega - w_e + i\delta} + \frac{\mu G}{\omega - w_e - 2J + i\delta} \quad (30)$$

Ceci semble en contradiction avec la formule (28). En fait on peut montrer que $\lim_{\delta_i, \delta_e \rightarrow 0} G = 0$ suffisamment rapidement pour que la deuxième partie de l'équation (30) tende vers Zéro pour toute valeur de ω . Ceci montre que si l'on ne s'intéresse qu'aux pôles de la fonction $\chi_-(\omega)$ on peut obtenir des résultats illusoire [11]. Le cas que nous nous proposons de discuter est défini par les relations $g_i \simeq g_e$ et $\delta_e > \delta_i > |w_i - w_e|, J$. On obtient alors

$$\chi_-(\omega) \simeq \frac{\mu F}{\omega - w_i - J + i\delta_i + J^2/(w_i - w_e - i\delta_e)} + \frac{\mu G}{\omega - w_e - J + i\delta_e - J^2/(w_i - w_e - i\delta_e)} \quad (31)$$

La ligne de résonance est la superposition de deux lignes de résonance, l'une centrée sur une fréquence proche de w_i et relativement étroite et l'autre, beaucoup plus large, centrée sur une fréquence proche de w_e . En considérant la première partie de l'équation (31), on peut prévoir les effets suivants:

a) un déplacement de premier ordre ($-J$) analogue au déplacement de KNIGHT.

b) un déplacement et un élargissement de deuxième ordre représentés par le terme $J^2/(w_i - w_e - i\delta_e)$. L'élargissement de KORRINGA [24] est représenté par le terme $i\delta_i$.

B) On peut obtenir les mêmes résultats en considérant un modèle de champ moléculaire: deux moments magnétiques classiques M^i et M^e évoluant dans leurs champs moléculaires respectifs:

$$\frac{dM^i}{dt} = \gamma_i M^i \wedge (H + \lambda M^e); \quad \frac{dM^e}{dt} = \gamma_e M^e \wedge (H + \lambda M^i) \quad (32)$$

En introduisant de nouveau une dissipation dans la direction z , on obtient:

$$\chi_-(\omega) = \frac{\mu F'}{\omega - \frac{w_i + w_e}{2} + i\frac{\delta_i + \delta_e}{2} + J(\langle S_z^i \rangle + \langle S_z^e \rangle) + \left\{ \left(\frac{w_i - w_e}{2} - i\frac{\delta_i - \delta_e}{2} - J(\langle S_z^i \rangle - \langle S_z^e \rangle) \right)^2 + 4J^2 \langle S_z^i \rangle \langle S_z^e \rangle \right\}^{1/2}} + \frac{\mu G'}{\omega - \frac{w_i + w_e}{2} + i\frac{\delta_i + \delta_e}{2} + J(\langle S_z^i \rangle + \langle S_z^e \rangle) - \left\{ \left(\frac{w_i - w_e}{2} - i\frac{\delta_i - \delta_e}{2} - J(\langle S_z^i \rangle - \langle S_z^e \rangle) \right)^2 + 4J^2 \langle S_z^i \rangle \langle S_z^e \rangle \right\}^{1/2}} \quad (33)$$

où $\langle S_z^i \rangle = M_z^{i0} / \mu g_i$, M_z^{i0} est la valeur d'équilibre de M_z (pour $V(t) = 0$), $J = (\mu^2 g_i g_e / 2) \lambda$ et F' et G' sont des fonctions lentement variables de w . Les pôles de l'expression (33) sont identiques à ceux de l'expression (29) pour

$$\langle S_z^i \rangle = \langle S_z^e \rangle = -\frac{1}{2}.$$

Nous avons choisi pour nos deux modèles le terme dissipatif le plus simple: dissipation vers la position d'équilibre thermique. Le choix du terme de relaxation est en fait un problème délicat. PETER [12] a discuté les équations (32) en détail en choisissant un terme de relaxation dans la direction du champ moléculaire instantané [14]. Ce choix a le désavantage de ne pas tenir compte de la relaxation électrons-ions, et par conséquent d'ignorer les effets de goulot d'étranglement [10]. Le choix d'HASEGAWA [10] a le désavantage de permettre dans certains cas des temps de relaxation négatifs (voir son équation 5.2 pour $\lambda \chi_d < -1$). On peut combiner les deux approches en écrivant

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{M}^i &= \gamma_i \mathbf{M}^i \Lambda (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{M}^e) - \frac{1}{T_{ie}} (\mathbf{M}^i - \chi_i^0 \lambda \mathbf{M}^e) + \frac{1}{T_{ei}} (\mathbf{M}^e - \chi_e^0 \lambda \mathbf{M}^i) \\ &\quad - \frac{1}{T_{ie}} (\mathbf{M}^i - \chi_i^0 (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{M}^e)) \\ \frac{d}{dt} \mathbf{M}^e &= \gamma_e \mathbf{M}^e \Lambda (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{M}^i) + \frac{1}{T_{ie}} (\mathbf{M}^i - \chi_i^0 \lambda \mathbf{M}^e) - \frac{1}{T_{ei}} (\mathbf{M}^e - \chi_e^0 \lambda \mathbf{M}^i) \\ &\quad - \frac{1}{T_{ei}} (\mathbf{M}^e - \chi_e^0 (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{M}^i)). \end{aligned} \quad (34)$$

Dans ces équations, T_{ie}^{-1} , T_{ei}^{-1} , T_{iL}^{-1} et T_{eL}^{-1} sont les taux de relaxation des ions aux électrons, des électrons aux ions, des ions au réseau et des électrons au réseau. Les termes proportionnels à T_{ie}^{-1} et T_{ei}^{-1} représentent une relaxation dans la direction du champ moléculaire instantané, mais les termes en $\chi^0 \mathbf{H}$ disparaissent à cause de la relation $T_{ei}/T_{ie} = \chi_e^0/\chi_i^0$.

Les équations (34) sont en accord avec celles d'HASEGAWA lorsque l'aimantation est négligeable, et aussi avec une analyse thermodynamique plus générale due à G. V. SKROTSKII [14].

PARTIE III

La fonction $\chi_{-}(t)$ (équation (14)) est une somme de quatre fonctions de corrélation, car $M_{\pm}(t)$ est la somme de deux termes. Nous nous restreignons cependant au choix de paramètres

$$g_i \simeq g_e, \quad \delta_e \gg \delta_i. \quad (35)$$

Dans cette situation, seule la résonance ionique est observable (voir équation (31)) et il suffit [15] de calculer la fonction

$$\chi_{-}^i(t) = \frac{g_i^2 \mu^2}{2} i \ll \sum_{nn'} [S_{-}^n(t), S_{+}^{n'}(0)] \gg \vartheta(t). \quad (36)$$

Pour calculer la fonction $\chi_-^i(t)$ on dispose essentiellement de deux méthodes microscopiques: l'équation de mouvement et la théorie de perturbation. C'est la seconde méthode que nous avons employée pour calculer $\chi_-^i(t)$, d'abord à $T = 0^\circ\text{K}$ [16], puis à température finie [17]. On commence habituellement par calculer à température zéro les grandeurs que l'on veut connaître, ceci afin de pouvoir distinguer les effets dynamiques des effets statistiques.

La théorie de perturbation pour une fonction telle que $\chi_-^i(t)$ bute sur une difficulté majeure: le théorème de Wick [18] n'est pas valable pour les opérateurs de spins, car le commutateur de deux opérateurs de spins est un opérateur, non un nombre c ; de nombreuses méthodes ont été proposées pour pallier à cette difficulté, certaines avant [19] celle proposée par l'auteur [20], d'autres après [21]. Ces méthodes sont toutes assez compliquées, et semblent adaptées surtout au problème particulier pour lesquelles elles ont été inventées.

La méthode proposée par l'auteur est la suivante:

En théorie de perturbation dépendant du temps on est amené à calculer des grandeurs du type

$$\langle 0 | T \{ A(t_1) \dots P(t_m) \} | 0 \rangle$$

où T est l'opérateur chronologique, $A(t_1) \dots P(t_m)$ sont des opérateurs écrits dans une représentation d'interaction convenablement choisie

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} A e^{-i\mathcal{H}_0 t}$$

et $|0\rangle$ est l'état fondamental de \mathcal{H}_0 .

Le théorème de Wick transforme le produit chronologique en une somme de produits normaux, dont la valeur d'attente dans l'état fondamental est extrêmement simple à calculer.

Considérons un système de spins en interaction $S^1, S^2 \dots S^N$; la manière la plus simple de définir un Hamiltonien \mathcal{H}_0 est de placer le système dans un champ magnétique homogène dans la direction z . Alors

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' \\ \mathcal{H}_0 &= w_i \sum S_z^n \quad w_i > 0 \\ \mathcal{H}' &= F(S^1 \dots S^N) \end{aligned}$$

\mathcal{H}' est l'interaction spin-spin et est supposée être un polynôme en S_x^i, S_y^j, S_z^k . Le produit normal est défini de la manière suivante: les opérateurs S_+ à gauche, les opérateurs S_- au milieu et les opérateurs S_z à droite. La place attribuée aux opérateurs S_z est arbitraire mais doit être fixée si l'on veut avoir des règles définies. La contraction de deux opérateurs S , c'est-à-dire la différence entre leur produit chronologique et leur produit normal est alors

$$\begin{aligned} \underbrace{S_+^n(t) S_-^{n'}(t')} &= -2 S_z^n e^{-i\omega_i(t'-t)} \vartheta(t'-t) \delta_{nn'} \\ \underbrace{S_+^n(t) S_z^{n'}(t')} &= S_+^n(t) \vartheta(t'-t) \delta_{nn'} \\ \underbrace{S_-^n(t) S_z^{n'}(t')} &= -S_-^n(t) \vartheta(t'-t) \delta_{nn'} \end{aligned} \tag{37}$$

S_z est indépendant du temps comme opérateur, mais la variable t est nécessaire pour indiquer la place de S_z dans un produit chronologique. Si on essaie de transformer explicitement un produit quelconque d'opérateurs S en un produit normal à l'aide des règles de commutation, on s'aperçoit qu'un opérateur donné peut subir de multiples contractions. Pour formuler le théorème de WICK généralisé, on doit définir des opérateurs S dépendant de plusieurs «variables» de temps: $S_-(t; t_1 \dots t_m)$ et $S_z(t'; t'')$. Dans ces expressions, seul t est une réelle variable de temps, les autres variables sont simplement des indices.

La généralisation des équations (37)

$$\underbrace{S_+^n(t)} \underbrace{S_-^{n'}(t'; t, \dots t_m)} = -2 S_z^n(t; t') \vartheta(t' - t) \vartheta(t_1 - t) \dots \vartheta(t_m - t) e^{-i\omega_i(t' - t)} \delta_{nn'}$$

$$\underbrace{S_-^n(t; t_1 \dots t_m)} \underbrace{S_z^{n'}(t'; t'')} = -S_-^n(t; t_1 \dots t_m t') \vartheta(t'' - t) \delta_{nn'}$$

$$\underbrace{S_+^n(t)} \underbrace{S_z^{n'}(t'; t'')} = S_+^n(t) \vartheta(t' - t) \delta_{nn'}$$

ainsi que les définitions

$$S_z(t; t) \equiv S_z(t)$$

$$S_-(t) \equiv S_-(t;)$$

expliquent par elles-mêmes comment les indices sont définis. De plus nous définissons $S_-(t; t_1 \dots t_m)$ comme symétrique dans les indices $t_1 \dots t_m$; par contre $S_z(t'; t'')$ n'est pas symétrique. Pour formuler le théorème, il faut supposer que toutes les variables $t_1 \dots t_m$ sont différentes.

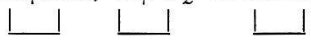
Théorème. Le produit chronologique d'une certaine suite d'opérateurs S est égal à la somme des produits normaux de toutes les suites partielles d'opérateurs S (y compris la suite initiale) que l'on peut construire en contractant la suite initiale de toutes les manières possibles.

Ces produits normaux sont à multiplier par les facteurs scalaires définis par (37) et qui dépendent des contractions effectuées. En général, il y a plusieurs facteurs scalaires différents pour la même suite partielle d'opérateurs, mais chaque facteur différent ne doit être compté qu'une seule fois, même s'il correspond à plusieurs contractions «topologiquement» différentes.

La démonstration de ce théorème a été publiée [20] et il est inutile de la répéter ici.

L'existence d'un théorème de WICK permet d'exprimer la série de perturbation sous la forme de séries de diagrammes qui peuvent être comptés et calculés d'une manière automatique, à l'aide des règles énoncées ci-dessous:

a) *Graphologie.*

- (i) A chaque opérateur S on associe un point.
- (ii) A chaque contraction $S_+ S_-$, $S_+ S_z$ et $S_- S_z$ on associe des lignes dessinées dans la figure 1 a, b et c. 
- (iii) Chaque ordre d'interaction est représenté par une ligne ondulée (figure 1 d).

b) Règles de calcul.

1) A chaque contraction $S_+^{n'}(t') S_-^{n''}(t; t_1 \dots t_m)$ (figure 1 a) associer un facteur

$$- 2 \delta_{n n'} e^{-i\omega_i(t-t')} \vartheta(t-t') \vartheta(t_1-t') \dots \vartheta(t_m-t').$$

2) A chaque contraction $S_z^{n''}(t_i'; t) S_+^{n'}(t')$ (figure 1 b) associer un facteur

$$\delta_{n n'} \vartheta(t'' - t').$$

3) A chaque contraction $S_-^{n'}(t_i'; t_1 \dots t_m) S_z^{n''}(t_i'; t)$ (figure 1 c) associer un facteur

$$- \vartheta(t - t') \delta_{n n'}.$$

4) Inclure la puissance correcte de S , en se rappelant que S_z «disparaît» quand il est contracté.

5) A chaque ligne d'interaction (figure 1 d), associer un facteur

$$i N^{-1} J(\mathbf{q}) e^{i \mathbf{q} \mathbf{R}_n}$$

6) La partie électronique s'évalue comme dans la théorie habituelle.

7) Diviser par un facteur γ , qui est défini par les nombres de contractions répétées d'opérateurs S_+ ou S_- avec des opérateurs S_z . Si ces nombres sont n_1, n_2, \dots, n_n dans un diagramme donné, $\gamma = \prod_i (n_i!)$. Ceci correspond au nombre de permutations entre les variables t_i qui n'engendrent pas de termes différents dans l'expression donnée par le théorème de Wick généralisé.

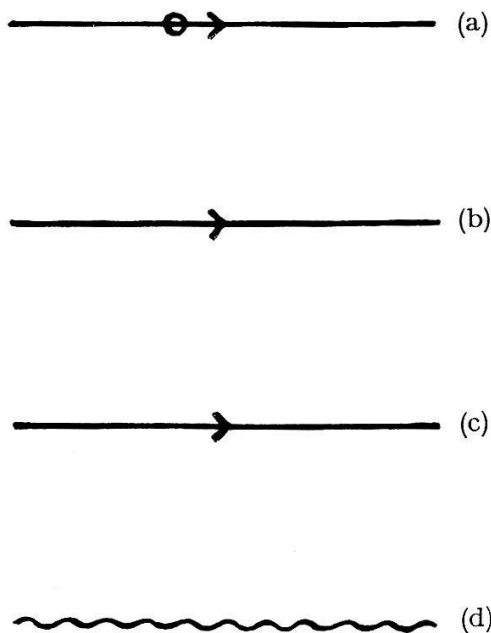


Figure 1

(a), (b) et (c): contractions $S_+ S_-$, $S_+ S_z$ et $S_- S_z$; (d): ligne d'interaction.

Aucune confusion ne peut exister entre les lignes $S_+ S_z$ et $S_- S_z$, car elles sont connectées de manière différente dans les diagrammes.

- 8) Sommer sur tous les n , \mathbf{q} et directions de spins (pour les électrons) et intégrer sur les variables $t_1 \dots t_n$.

L'auteur a utilisé cette méthode pour calculer $\chi_-^i(t)$ à température zéro [16]. Le résultat peut s'écrire de la manière suivante:

$$\chi_-^i(\omega) = \frac{c}{\omega - \omega_i + \Sigma(\omega)} \quad (17)$$

où c est indépendant de ω et $\Sigma(\omega)$ est une énergie propre qui déforme la ligne de résonance (voir partie I).

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega) = & J(0) N^{-1} \langle \rho_{\uparrow}(0) + \rho_{\downarrow}(0) \rangle \\ & + \frac{4S}{g_e^2 \mu^2 N^2} \sum_{\mathbf{q}_n} |J(\mathbf{q})|^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n} (\chi_-^e(\omega, \mathbf{q}) - \chi_z^e(\omega = 0, \mathbf{q})) \\ & + \frac{4}{N^2 \mu^2 g_e^2} \sum_{\mathbf{q}} |J(\mathbf{q})|^2 \{ \tilde{\chi}_z^e(\omega - \omega_i, \mathbf{q}) - \tilde{\chi}_-^e(\omega, \mathbf{q}) \} \end{aligned} \quad (38)$$

S est la grandeur du spin des ions et les fonctions χ_-^e , χ_z^e , $\tilde{\chi}_-^e$ et $\tilde{\chi}_z^e$ sont définies par

$$\begin{aligned} \chi_-^e(t, \mathbf{q}) &= 2i\mu^2 \ll [\rho_-(\mathbf{q}t), \rho_+(-\mathbf{q}, 0)] \gg \vartheta(t) \\ \chi_z^e(t, \mathbf{q}) &= i\mu^2 \ll [\rho_{\uparrow}(\mathbf{q}t) - \rho_{\downarrow}(\mathbf{q}t), \rho_{\uparrow}(-\mathbf{q}, 0) - \rho_{\downarrow}(-\mathbf{q}, 0)] \gg \vartheta(t) \\ \tilde{\chi}_-^e(t, \mathbf{q}) &= 2i\mu^2 \ll T \{ \rho_-(\mathbf{q}t) \rho_+(-\mathbf{q}, 0) \} \gg \vartheta(-t) \\ \tilde{\chi}_z^e(t, \mathbf{q}) &= i\mu^2 \ll T \{ (\rho_{\uparrow}(\mathbf{q}t) - \rho_{\downarrow}(\mathbf{q}t)) (\rho_{\uparrow}(-\mathbf{q}, 0) - \rho_{\downarrow}(-\mathbf{q}, 0)) \} \gg \vartheta(t). \end{aligned}$$

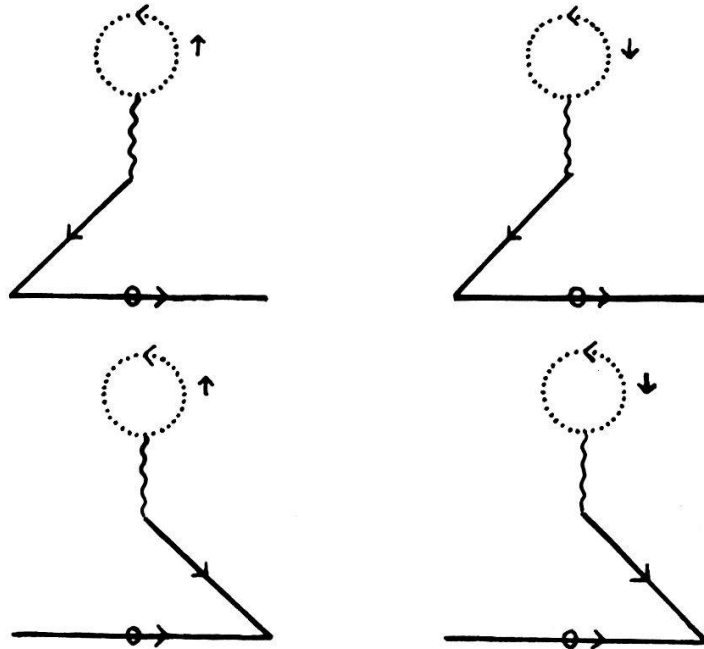


Figure 2

Représentation diagrammatique de l'énergie propre de premier ordre $J(0) N^{-1} \langle \rho_{\uparrow}(q=0) - \rho_{\downarrow}(q=0) \rangle$. La ligne pointillée représente le propagateur électronique, la flèche donne la direction du spin, la ligne ondulée l'interaction. Les autres symboles sont des propagateurs de spin.

Pour faire apparaître une énergie propre au dénominateur de $\chi_-^i(\omega)$ il faut évidemment sommer une série infinie de termes; les diagrammes ci-dessus sont le premier de ces termes. Pour plus de détails voir réf. [16].

A température zéro, la moyenne thermodynamique représentée par $\ll A \gg$ (où $\ll A \gg$ signifie $Tr e^{-\beta(\mathcal{H} - \mathcal{H}_{ei})} A$) est remplacée par la moyenne sur l'état fondamental correspondant.

Ces fonctions sont relativement faciles à calculer dans l'approximation des électrons libres [16] [22] (voir appendice).

On peut montrer [22] que le troisième terme de (38) est négligeable [25]. La signification des deux premiers termes de l'équation (36) est la suivante.

a) le terme

$$J(0) N^{-1} \langle \rho_{\uparrow}(\mathbf{q} = 0) - \rho_{\downarrow}(\mathbf{q} = 0) \rangle. \quad (39)$$

Ce terme est représenté diagrammatiquement dans la figure 2. Il correspond au déplacement de KNIGHT: le ion précède dans un champ effectif qui est la somme du champ extérieur et de la polarisation statique des électrons de conduction.

b) Le deuxième terme provient de deux types de diagrammes différents (figure 3 et figure 4). En prévision des résultats à température finie, nous décomposons le deuxième terme en deux parties:

$$(i) \quad \frac{4 S J^2}{g_e^2 \mu^2 N^2} \sum_{\mathbf{R}_n \neq 0} (\chi_{-}^e(w, \mathbf{R}_n) - \chi_{z}^e(w = 0, \mathbf{R}_n)) \quad (40)$$

avec l'approximation $J(\mathbf{q}) = J = \text{constante}$.

On peut montrer que la partie réelle de (40) peut s'écrire

$$J N^{-1} \left\{ \frac{4 S J N_0}{g_e^2 N \mu^2} Re (\chi_{-}^e(w, \mathbf{q} = 0) - \chi_{z}^e(w = 0, \mathbf{q} = 0)) \right\} \quad (41)$$

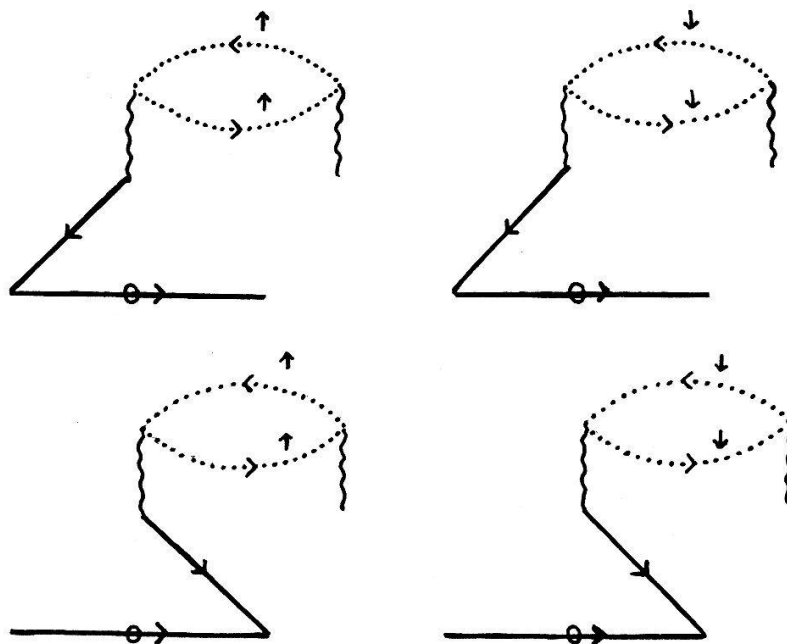


Figure 3

Représentation diagrammatique de l'énergie propre de deuxième ordre: terme proportionnel à $\chi_{z}^e(w, \mathbf{q})$. La série infinie est semblable à celle de la figure 1.

où N_0 est le nombre d'impuretés par unité de volume. Ceci est dû au fait que $Re \chi_z^e$ et $Re \chi_-^e$ ne diffèrent que pour $q \sim 2 m w_i / k_f \sim 10^3 \text{ cm}^{-1}$, ce qui revient à dire que la différence $Re(\chi_z^e(0, \mathbf{R}) - \chi_-^e(w_i, \mathbf{R}))$ varie très lentement à l'échelle atomique.

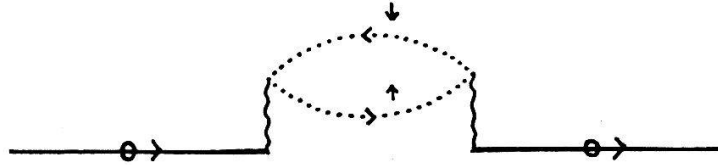


Figure 4

Représentation diagrammatique de l'énergie propre de deuxième ordre: terme proportionnel à $\chi_-^e(w, \mathbf{q})$. La série infinie est semblable à la série RPA pour la fonction diélectrique dans la théorie du gaz d'électrons (série de diagrammes bulles).

Dans l'équation (41), le terme en χ_z^e s'interprète immédiatement comme une renormalisation de $\langle \rho_{\uparrow}(0) - \rho_{\downarrow}(0) \rangle$ dans (39): la polarisation uniforme des électrons est due aussi au champ moléculaire des ions. Cette interprétation est évidente si l'on compare les diagrammes des figures 2 et 3.

Ce terme seul donnerait le déplacement célèbre de KITTEL et MICHELL [23]. Il est compensé cependant par un deuxième terme $Re \chi_-^e(w, \mathbf{q} = 0)$. Pour fixer les idées on peut remplacer χ_z^e et χ_-^e par leur valeur pour des électrons libres. On obtient (équation A.1)

$$Re \frac{S J^2 N_0}{N^2 \mu^2} \chi_z^e(w = 0, \mathbf{q} = 0) \left(\frac{-w_e}{w - w_e + i \delta} - 1 \right). \quad (42)$$

On voit que la compensation est complète lorsque $w \ll w_e$ (résonance nucléaire) et nulle lorsque $w \gg w_e$ (résonance de ions dont le facteur g est beaucoup plus grand que 2).

Physiquement, cela signifie qu'à très basse fréquence ($w \ll w_e$) les électrons suivent parfaitement le champ moléculaire total, tandis qu'à haute fréquence ($w \gg w_e$), ils restent inertes dans la direction du champ H_z ; il est raisonnable de penser que ces cas limites sont valables aussi si on calcule χ_-^e et χ_z^e de façon plus réaliste. Un calcul microscopique de χ_-^e qui tienne compte de la relaxation rapide des électrons de conduction n'a pas été entrepris dans ce travail, et il faut faire des hypothèses phénoménologiques. Nous reviendrons sur ce point. Seul χ_-^e concourt à la partie imaginaire de l'équation (40), car $Im \chi_z^e(w = 0, \mathbf{R}) = 0$. Dans l'approximation des électrons libres $Im \chi_-^e(w, \mathbf{R})$ est une fonction qui varie rapidement sur des distances interatomiques (équation A.2), ce qui rend l'approximation $\sum_{\mathbf{R}} \chi_-^e(w, \mathbf{R}_n) \sim N_0 \chi_-^e(w, \mathbf{q} = 0)$ difficile à justifier du moins pour des électrons libres; il y a de bonnes raisons [22] de penser que cette approximation est bien meilleure dans la limite de relaxation rapide.

(ii) La deuxième partie du deuxième terme est

$$\frac{4 S J^2}{g_e^2 \mu^2 N^2} (\chi_-^e(w, \mathbf{R} = 0) - \chi_z^e(w = 0, \mathbf{R} = 0)) \quad (43)$$

avec l'approximation $J(\mathbf{q}) = \text{constante}$.

On peut montrer que le déplacement dû à ce terme est pratiquement nul ($Re \chi_-^e(w_i, \mathbf{R} = 0) \simeq Re \chi_z^e(w = 0, \mathbf{R} = 0)$). Ceci montre que le champ moléculaire d'un ion isolé n'a aucun effet sur la résonance: il suit parfaitement le mouvement. Une théorie RPA ou de champ moléculaire pour ce cas donnerait des résultats complètement erronés. Ceci n'a rien d'étonnant: on sait qu'une théorie RPA n'est valable que pour des effets presque uniformes ($\mathbf{q} \simeq 0$).

L'élargissement dû à (43) est proportionnel à $Im \chi_-^e(w, \mathbf{R} = 0)$ et correspond à l'élargissement de KORRINGA [24].

D'après ce qui précède, $\Sigma(w)$ se compose de trois termes: on peut les rassembler sous la forme

$$\begin{aligned} \Sigma(w) = & J N^{-1} \langle \varrho_{\uparrow}(\mathbf{q} = 0) - \varrho_{\downarrow}(\mathbf{q} = 0) \rangle \\ & + \frac{4 J^2 S}{g_e^2 N^2 \mu^2} \left\{ N_0 Re (\chi_-^e(w, \mathbf{q} = 0) - \chi_z^e(w = 0, \mathbf{q} = 0)) \right. \\ & \left. + i \sum_{\mathbf{R}_n \neq 0} Im \chi_-^e(w, \mathbf{R}_n) \right\} + \frac{4 J^2 S}{g_e^2 N^2 \mu^2} i Im \chi_-^e(w, \mathbf{R} = 0). \end{aligned} \quad (44)$$

Si on fait l'approximation $\sum_{\mathbf{R}_n \neq 0} Im \chi_-^e(w, \mathbf{R}_n) \sim N_0 Im \chi_-^e(w, \mathbf{q} = 0)$ on peut écrire (44) de la manière suivante:

$$\begin{aligned} \Sigma(w) = & J N^{-1} \langle \varrho_{\uparrow}(\mathbf{q} = 0) - \varrho_{\downarrow}(\mathbf{q} = 0) \rangle + \frac{4 J^2 S}{g_e^2 N^2 \mu^2} i Im \chi_-^e(w, \mathbf{R} = 0) \\ & + \frac{4 J^2 S}{g_e^2 N^2 \mu^2} \left\{ N_0 \chi_z^e(w = 0, \mathbf{q} = 0) \left(\frac{-w_e}{w - w_e - 2 J N^{-1} S + i \delta_e} - 1 \right) \right\} \end{aligned} \quad (45)$$

avec la forme phénoménologique:

$$\chi_-^e = \frac{-w_e \chi_z^e(w = 0, \mathbf{q} = 0)}{w - w_e - 2 J N^{-1} S + i \delta_e} \quad (46)$$

En remplaçant dans l'équation (35), et en changeant quelque peu les notations, on obtient

$$\chi_-^i(w) = \frac{c (w - w_e + 2 J N^{-1} \langle S_z^i \rangle + i \delta_e)}{(w - w_i + 2 J N^{-1} \langle S_z^e \rangle + i \delta_i) (w - w_i + 2 J N^{-1} \langle S_z^i \rangle + i \delta_e) - 4 J^2 N^{-2} \langle S_z^i \rangle \langle S_z^e \rangle} \quad (47)$$

ci $\langle S_z^i \rangle = -S$ et $\langle S_z^e \rangle = \frac{1}{2} \langle \varrho_{\uparrow}(q = 0) - \varrho_{\downarrow}(q = 0) \rangle$

ont la même signification que dans l'équation (33). Nous retrouvons les deux pôles de cette expression.

Nous voyons donc que dans une certaine approximation, notre calcul peut être comparé avec les modèles simples présentés dans la partie II. Dans la forme (46), il a été tenu compte, par raison de symétrie, du champ moléculaire des ions (figure 5), et, phénoménologiquement, d'un processus de relaxation dans la direction du champ H_z . On pourrait calculer cette grandeur microscopiquement, en évaluant les diagrammes appropriés (en tenant compte par exemple de la relaxation spin-orbite), mais il serait impossible d'obtenir une forme qualitativement plus réaliste (relaxation dans la direction du champ moléculaire instantané) dans le cadre de la réponse linéaire (formule de KUBO), car celle-ci s'exprime en fonction de valeurs d'attente de certains opérateurs sur le système à l'équilibre thermique.

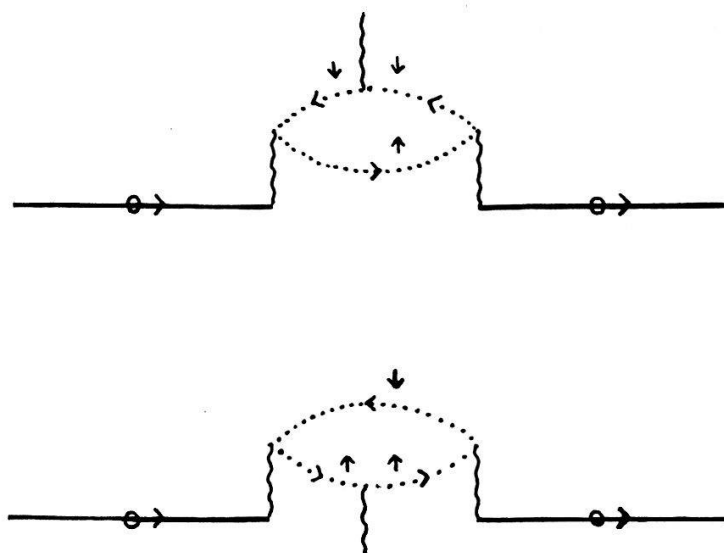


Figure 5

Diagrammes contribuant à la renormalisation de χ_-^e due au champ moléculaire des ions.

La méthode utilisée pour faire les calculs à température zéro n'est pas généralisable à température finie. On peut cependant calculer la série de perturbations terme après terme.

Il est évidemment exclu de calculer une série infinie, mais la comparaison des termes de premier et deuxième ordre avec les termes correspondants à température zéro permet d'identifier $\Sigma(w, T)$ et l'on obtient [17]

$$\begin{aligned} \Sigma(w, T) \simeq & J(0) N^{-1} \ll \varrho_{\uparrow}(\mathbf{q} = 0) - \varrho_{\downarrow}(\mathbf{q} = 0) \gg \\ & - \frac{4 J^2 \ll S_z \gg}{g_e^2 N^2 \mu^2} \left\{ N_0 \operatorname{Re}(\chi_-^e(w, \mathbf{q} = 0) - \chi_z^e(w = 0, \mathbf{q} = 0)) \right. \\ & \left. + i \sum_{\mathbf{R}_n \neq 0} \operatorname{Im} \chi_-^e(w, \mathbf{R}_n) \right\} + i \frac{2 J^2}{g_e^2 N^2 \mu^2} \frac{k T}{w_i} \operatorname{Im} \chi_-^e(w, \mathbf{R} = 0) \quad (48) \end{aligned}$$

pour $k T \gg w_i$.

La discussion de $\Sigma(w, T)$ est complètement analogue à la discussion de $\Sigma(w)$; pour pouvoir discuter les conséquences expérimentales de (48) il est nécessaire de faire certaines approximations. Nous avons choisi pour χ_-^e la forme phénoménologique

$$\chi_-^e(w, \mathbf{q} = 0) = \chi_z^e(w = 0, \mathbf{q} = 0) \left(1 - \frac{w}{w - w_e + 2 J N^{-1} \langle S_z^e \rangle + i \delta_e} \right)$$

qui correspond à une relaxation dans la direction du champ moléculaire instantané. La discussion de (48) a été publiée en détail (réf. [17]) et ne sera pas répétée. Elle a permis de prédire certains effets observables dans la résonance ionique lorsque certaines conditions sont réalisées, en particulier lorsqu'on s'approche de la température de CURIE dans certains alliages. Ces effets ont été effectivement observés [12].

En résumé, l'analyse microscopique a permis de prédire certains effets et de gagner une meilleure compréhension sur l'interaction effective entre les ions, qui est anisotropique en présence d'un champ statique H_z ; cette analyse a aussi permis de justifier par avance le modèle de champ moléculaire, qui n'est valable que dans une certaine approximation et ne permet pas de calculer les effets à courte portée, mais qui

permet par contre de discuter beaucoup plus facilement le problème de la relaxation (voir équation (34)).

L'auteur tient à exprimer sa reconnaissance à Messieurs les professeurs S. KOIDE et M. PETER qui ont montré un intérêt constant dans le développement de ce travail.

Il tient aussi à remercier Messieurs les professeurs G. J. BENE, C. ENZ, J. M. JAUCH et J. R. SCHRIEFFER et Messieurs H. COTTET et J. DUPRAZ pour des discussions précieuses sur certains aspects de cette recherche.

Appendice

Les fonctions de susceptibilité $\chi_z^e(\omega, \mathbf{q})$ et $\chi_z^e(\omega, \mathbf{q})$ que l'on écrit dans l'approximation des électrons libres $\chi_z^{0e}(\omega, \mathbf{q})$ et $\chi_z^{0e}(\omega, \mathbf{q})$ ont dans cette approximation les propriétés suivantes.

a)

$$\chi_z^{0e}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \{ \chi_{z\uparrow}^{0e}(\omega, \mathbf{q}) + \chi_{z\downarrow}^{0e}(\omega, \mathbf{q}) \}$$

où

$$\chi_{z\uparrow}^{0e}(\omega, \mathbf{q})$$

par exemple est donné par

$$Re \chi_{z\uparrow}^{0e}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{\mu^2 m}{2 \pi^2} \{ k_{f\uparrow} + A_+(k_{f\uparrow}; \omega, \mathbf{q}) - A_-(k_{f\uparrow}; \omega, \mathbf{q}) \}$$

avec

$$A_{\pm}(k_{f\uparrow}; \omega, \mathbf{q}) = \frac{k_{f\uparrow}^2}{2q} \left\{ 1 - \left(\frac{m\omega}{q k_{f\uparrow}} \pm \frac{q}{2 k_{f\uparrow}} \right)^2 \right\} \ln \left| \frac{1 + (m\omega/q k_{f\uparrow} \pm q/2 k_{f\uparrow})}{1 - (m\omega/q k_{f\uparrow} \pm q/2 k_{f\uparrow})} \right|$$

(où $q = |\mathbf{q}|$)

et

$$Im \chi_{z\uparrow}^{0e}(\omega, \mathbf{q}) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 2m|\omega| > q^2 + 2q k_{f\uparrow} \\ 0 & \text{pour } q > 2k_{f\uparrow} \text{ et } 2m|\omega| < q^2 - 2q k_{f\uparrow} \\ \frac{\mu^2 m^2}{2\pi} \frac{\omega}{q} & \text{pour } q < 2k_{f\uparrow} \text{ et } 2m|\omega| < |q^2 - 2q k_{f\uparrow}| \\ \frac{\mu^2 m}{4\pi q} k_{f\uparrow}^2 \left\{ 1 - \left(\frac{q}{2k_{f\uparrow}} - \frac{m\omega}{q k_{f\uparrow}} \right)^2 \right\} & \text{pour } |q^2 - 2q k_{f\uparrow}| < 2m|\omega| < q^2 + 2q k_{f\uparrow} \end{cases}$$

où $k_{f\uparrow}$ est l'impulsion de Fermi pour les électrons de spin up.

$\chi_{z\downarrow}^{0e}(\omega, \mathbf{q})$ est défini de manière semblable; seul $k_{f\uparrow}$ est remplacé par $k_{f\downarrow}$.

Pour simplifier les notations, discutons $\chi_z^{0e}(\omega, \mathbf{q})$ pour le cas $k_{f\uparrow} = k_{f\downarrow} \equiv k_f$.

On voit que

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} Re \chi_z^{0e}(\omega, \mathbf{q}) = \mu^2 m k_f \pi^{-2} U(x)$$

$$U(x) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right\} \text{ où } x = \frac{q}{2k_f}.$$

D'où

$$\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{w \rightarrow 0} \operatorname{Re} \chi_z^{0e}(w, \mathbf{q}) = \mu^2 m k_f \pi^{-2}.$$

On reconnaît la susceptibilité de PAULI. Remarquons que

$$\lim_{w \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \operatorname{Re} \chi_z^{0e}(w, \mathbf{q}) = 0.$$

En effet, pour

$$\omega \gg \frac{q^2 + 2 q k_f}{2 m}$$

$$\operatorname{Re} \chi_z^{0e}(w, \mathbf{q}) \simeq - \frac{\mu^2 q^2 n}{m w^2}$$

où n est le nombre d'électrons par unité de volume.

b) $\chi_-^{0e}(w, \mathbf{q})$:

$$\operatorname{Re} \chi_-^{0e}(w, \mathbf{q}) = \frac{\mu^2 m}{4 \pi^2} \left(k_{f\uparrow} + k_{f\downarrow} + \frac{2 m (w - w_e)}{q^2} (k_{f\uparrow} - k_{f\downarrow}) \right. \\ \left. + 2 A_+(k_{f\uparrow}; w - w_e, \mathbf{q}) - 2 A_-(k_{f\downarrow}; w - w_e, \mathbf{q}) \right).$$

(i) $\operatorname{Im} \chi_-^{0e}(w, \mathbf{q})$ pour $w - w_e > 0$.

1) Si $q < k_{f\uparrow} + k_{f\downarrow}$

$$\operatorname{Im} \chi_-^{0e}(w, \mathbf{q}) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 2 m (w - w_e) > q^2 + 2 k_{f\downarrow} q \\ \frac{\mu^2 m^2}{2 \pi} \frac{w}{q} & \text{pour } 2 m (w - w_e) < 2 k_{f\uparrow} q - q^2 \\ \frac{\mu^2 m}{2 \pi} \frac{k_{f\downarrow}^2}{2 q} \left\{ 1 - \left(\frac{q}{2 k_{f\downarrow}} - \frac{m (w - w_e)}{q k_{f\downarrow}} \right)^2 \right\} & \text{pour } 2 k_{f\uparrow} q - q^2 < 2 m (w - w_e) < q^2 + 2 k_{f\downarrow} q. \end{cases}$$

2) Si $q > k_{f\uparrow} + k_{f\downarrow}$:

$$\operatorname{Im} \chi_-^{0e}(w, \mathbf{q}) = \begin{cases} 0 & \text{pour } q^2 - 2 k_{f\downarrow} q > 2 m |w - w_e| \\ & \text{et pour } 2 m |w - w_e| > q^2 + 2 k_{f\downarrow} q \\ \frac{\mu^2 m}{4 \pi} \frac{k_{f\downarrow}^2}{q} \left\{ 1 - \left(\frac{q}{2 k_{f\downarrow}} - \frac{m (w - w_e)}{q k_{f\downarrow}} \right)^2 \right\} & \text{pour } q^2 - 2 k_{f\downarrow} q < 2 m |w - w_e| < q^2 + 2 k_{f\downarrow} q. \end{cases}$$

(ii) $\operatorname{Im} \chi_-^{0e}(w, \mathbf{q})$ pour $w - w_e < 0$.

1) Si $q < k_{f\uparrow} + k_{f\downarrow}$

$$\operatorname{Im} \chi_-^{0e}(w, \mathbf{q}) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 2m |w - w_e| > q^2 + 2k_{f\uparrow} q \\ \frac{\mu^2 m^2}{2\pi} \frac{w}{q} & \text{pour } 2m |w - w_e| < 2k_{f\downarrow} q - q^2 \\ \frac{\mu^2 m}{4\pi} \frac{k_{f\downarrow}^2}{q} \left\{ 1 - \left(\frac{q}{2k_{f\downarrow}} - \frac{m(w - w_e)}{q k_{f\downarrow}} \right)^2 \right\} & \text{pour } 2k_{f\downarrow} q - q^2 < 2m |w - w_e| < 2k_{f\downarrow} q + q^2. \end{cases}$$

2) Si $q > k_{f\uparrow} + k_{f\downarrow}$

Comme sous (i) 2).

On voit que $\lim_{\substack{w_e \rightarrow 0 \\ k_{f\uparrow} - k_{f\downarrow} \rightarrow 0}} \chi_-^{0e} = \chi_z^{ee}$ comme il se doit.

En outre:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_-^{0e}(w, \mathbf{q}) \simeq - \frac{\chi_z^{ee}(w=0, q=0) w_e}{w - w_e + i\delta} \quad \text{pour } |k_{f\uparrow} - k_{f\downarrow}| \ll k_f. \quad (\text{A.1})$$

Pour $w \ll E_f$

$$\operatorname{Im} \chi_-^e(w, \mathbf{q}) \simeq \begin{cases} \frac{\mu^2 m^2}{2\pi} \frac{w}{q} & \text{pour } q < 2k_f \\ 0 & \text{pour } q > 2k_f. \end{cases}$$

D'où

$$\operatorname{Im} \chi_-^e(w, \mathbf{R}) \simeq \frac{\mu^2 m^2 k_f^2}{2\pi^3} w \frac{\sin^2(k_f x)}{(k_f x)^2} \quad (\text{A.2})$$

où

$$|\mathbf{R}| = x \text{ et } k_f = \frac{k_{f\uparrow} + k_{f\downarrow}}{2}.$$

Références

- [1] Cette publication est un résumé d'une thèse de doctorat présentée à l'Université de Genève (mars 1966).
- [2] K. YOSIDA, Phys. Rev. 106, 893 (1957); K. YOSIDA, Phys. Rev. 107, 396 (1957).
- [3] R. E. WATSON, S. KOIDE, M. PETER et A. J. FREEMAN, Phys. Rev. [A] 139, 167 (1965).
- [4] Nous posons $\hbar = 1$.
- [5] D. SHALTIEL, J. H. WERNICK, H. J. WILLIAMS et M. PETER, Phys. Rev. [A] 135, 1346 (1964).
- [6] J. KONDO, Prog. theor. Phys. 32, 37 (1964).
- [7] A. A. ABRIKOSOV, Physics 2, 5, 61 (1965); Y. NAGAOKA, Phys. Rev. [A] 138, 1112 (1965); Prog. theor. Phys. 37, 13 (1967); H. SUHL, Lectures presented at the 1966 International School of Physics «Enrico Fermi», Varenna, Italy; O. R. HAMANN, Phys. Rev. 158, 570 (1967).
- [8] J. R. SCHRIEFFER, J. appl. Phys. 38, 1143 (1967).
- [9] La seule publication qui aborde ce sujet est celle de H. J. SPENCER et S. DONIACH, Phys. Rev. Lett. 18, 994 (1967).

- [10] H. HASEGAWA, Prog. theor. Phys. (Kyoto) *21*, 483 (1959).
- [11] Le cas où il n'y a pas de relaxation des électrons de conduction mais où les facteurs g sont différents a été discuté récemment par P. A. FEDDERS, Phys. Rev. *158*, 288 (1967).
- [12] M. PETER, J. DUPRAZ et H. COTTET, Helv. phys. Acta *40*, 301 (1967).
- [13] R. KUBO, *Lectures in Theoretical Physics*, Vol. 1, Interscience Publishers, New York (1959).
- [14] Pour une discussion du problème de relaxation dans un contexte très semblable, voir S. V. VONSOVSKII, *Ferromagnetic Resonance*, Pergamon Press (1966).
- [15] Il est difficile de prouver cette assertion de manière générale. On peut le prouver facilement au premier ordre (voir ref. [16]).
- [16] B. GIOVANNINI et S. KOIDE, Prog. theor. Phys. *34*, 705 (1965).
- [17] B. GIOVANNINI, M. PETER et S. KOIDE, Phys. Rev. *149*, 251 (1966).
- [18] G. WICK, Phys. Rev. *80*, 268 (1950).
- [19] H. L. DAVIS, Phys. Rev. *120*, 789 (1960); R. L. MILLS, R. P. KENAN et J. KORRINGA, Physics *26*, 204 (1960).
- [20] B. GIOVANNINI, Sci. Pap. Coll. Gen. Educ. Univ. Tokyo *15*, 49 (1965).
- [21] Y. L. WANG, S. SHTRIKMAN et H. CALLEN, Phys. Rev. *148*, 419 (1966); E. M. YOLIN, Proc. Phys. Soc. *85*, 759 (1965); A. A. ABRIKOSOV, Physics *2*, 5 (1965); S. DONIACH, Phys. Rev. *144*, 382 (1966); W. W. LEWIS et R. B. STINCHCOMBE (à paraître); H. J. SPENCER (à paraître).
- [22] Le texte intégral de la thèse peut être obtenu de l'auteur.
- [23] C. KITTEL et A. H. MITCHELL, Phys. Rev. *101*, 1611 (1956).
- [24] J. KORRINGA, Physica *16*, 601 (1950).
- [25] Note ajoutée en cours d'impression: A température zéro, cette affirmation est correcte. Récemment H. SPENCER et R. ORBACH ont proposé (communication privée) que ce terme peut donner à température finie une contribution appréciable à $Im \Sigma$, rendant ainsi $T_2 < 2 T_1$.