

# Relaxation des spins nucléaires dans les alliages dilués. II

Autor(en): **Giovannini, B. / Heeger, A.J.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **42 (1969)**

Heft 4

PDF erstellt am: **08.08.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-114082>

## **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.

## Relaxation des spins nucléaires dans les alliages dilués. II.

par B. Giovannini et A. J. Heeger<sup>1)</sup>

Institut de Physique expérimentale, Université de Genève, Genève (Suisse)

29. IX. 68

*Résumé.* Les résultats obtenus dans une première publication sont établis de manière plus rigoureuse et complétés. Il est montré qu'à l'ordre où nous calculons, l'interaction de Yosida contient toutes les contributions importantes au temps de relaxation des noyaux via les impuretés magnétiques.

### Introduction

Lors d'une première publication [1], nous avons montré que le spin des noyaux, dans un alliage magnétique dilué, peut relaxer via une excitation virtuelle des impuretés magnétiques auxquelles il est couplé par l'interaction de Yosida. Pour établir ce mécanisme de relaxation, nous avons utilisé un Hamiltonien d'interaction qui permet de calculer facilement le processus physique décrit plus haut:

$$\mathcal{K}' = -\frac{A}{N} \sum \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\varrho}(\mathbf{q}) - \frac{J}{N} \sum e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} \mathbf{S}^n \boldsymbol{\varrho}(\mathbf{q}) + \sum K_{n0} \mathbf{S}^n \cdot \mathbf{I} \quad (1)$$

où

$$K_{n0} = 9\pi \frac{AJ}{E_f} z^2 F(2k_f | \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m |) \quad (2)$$

$$F(x) = \frac{x \cos x - \sin x}{x^4} \quad (3)$$

et  $z$  est le nombre d'électrons de conduction par atome. (Les autres quantités sont définies dans la partie I). L'Hamiltonien (1) n'est cependant pas rigoureusement correct, car la troisième partie est contenue implicitement dans les deux premières.

Nous nous proposons dans ce travail de dériver de façon rigoureuse le résultat obtenu dans [1], ceci afin de pouvoir en particulier discuter les incidences que pourrait avoir l'effet KONDO [2] sur notre résultat.

### Première partie

Nous considérons le système formé d'un spin nucléaire  $\mathbf{I}$  placé à l'origine et qui interagit avec les électrons de conduction et indirectement avec des spins  $\mathbf{S}^n$  placés en  $\mathbf{R}_n$ . L'Hamiltonien s'écrit:

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_0 + \mathcal{K}' \quad (4)$$

$$\mathcal{K}_0 = -\omega_n I_z + \omega_i \sum S_z^n + \sum \varepsilon_{ks} c_{ks}^+ c_{ks} \quad (5)$$

$$\mathcal{K}' = -A/N \sum \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\varrho}(\mathbf{q}) - J/N \sum e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} \mathbf{S}^n \cdot \boldsymbol{\varrho}(\mathbf{q}) \quad (6)$$

<sup>1)</sup> John Simmon Guggenheim Fellow 1968-1969. Adresse permanente: Department of Physics, University of Pennsylvania, Philadelphia, Penna (USA).

$\omega_n(\omega_i)$  est la fréquence de Larmor du spin nucléaire (des spins d'impuretés),  $\varepsilon_{k_s} = \varepsilon_k + s \omega_e$  ( $s = \pm 1/2$ ) est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie de Zeeman d'un électron de conduction dans l'état de Bloch  $k$  et de spin  $s$ ,  $c_{k_s}^+$  ( $c_{k_s}$ ) est l'opérateur de création (d'annihilation) pour un électron dans l'état de Bloch  $k$ ,  $\boldsymbol{\rho}(\mathbf{q}) = \sum_k c_{k-\mathbf{q}s}^+ \boldsymbol{\sigma}_{s s'} c_{k s'}$  ( $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$  sont les matrices de Pauli) est le vecteur de densité de spin pour les électrons de conduction et  $N$  est le nombre d'atomes par unité de volume.

Nous voulons calculer la probabilité de transition:

$$W_{if} = (2\pi) \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2 \quad (7)$$

où

$$T_{if} = \langle i | \mathcal{K}' | f^+ \rangle \quad (8)$$

$$|f^+\rangle = |f\rangle + \frac{1}{E_f - \mathcal{K}_0 + i\delta} \mathcal{K}' |f^+\rangle. \quad (9)$$

Par itération de l'équation (9) on obtient la série de Born:

$$T_{if} = \mathcal{K}'_{if} + \sum_c \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cf}}{E_f - E_c + i\delta} + \sum_{c,d} \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cd} \mathcal{K}'_{df}}{(E_f - E_c + i\delta)(E_f - E_d + i\delta)} + \dots \quad (10)$$

où

$$\mathcal{K}'_{if} = \langle i | \mathcal{K}' | f \rangle \text{ et}$$

$$\mathcal{K}_0 |f\rangle = E_f |f\rangle$$

$$\mathcal{K}_0 |c\rangle = E_c |c\rangle \text{ etc.}$$

Pour calculer le mécanisme décrit dans l'introduction, il faut aller jusqu'au troisième ordre pour  $T_{if}$ , c'est-à-dire jusqu'au quatrième ordre pour  $W_{if}$ .

$$\begin{aligned} W_{if} = 2\pi \delta(E_i - E_f) & \left\{ \mathcal{K}'_{if} \mathcal{K}'_{fi} + \left( \sum \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cf} \mathcal{K}'_{fi}}{E_f - E_c + i\delta} + c.c. \right) \right. \\ & + \left( \sum \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cd} \mathcal{K}'_{df} \mathcal{K}'_{fi}}{(E_f - E_c + i\delta)(E_f - E_d + i\delta)} + c.c. \right) \\ & \left. + \left| \sum_c \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cf}}{E_f - E_c + i\delta} \right|^2 \right\} = W_{if}^{(2)} + W_{if}^{(3)} + W_{if}^{(4)} \quad (11) \end{aligned}$$

Nous voulons ensuite calculer

$$W_{m m+1} = \sum_{if} e^{-\beta E_i} W_{if}$$

où l'on somme sur toutes les variables excepté celles du spin nucléaire.

Nous choisissons maintenant

$$|i\rangle = |m, \{M\}, \phi_i\rangle \quad |f\rangle = |m+1, \{M\}, \phi_f\rangle \quad (12)$$

où

$$m = \langle i | I^z | i \rangle, \quad \{M\} = \{ \langle i | S'_z | i \rangle, \dots, \langle i | S''_z | i \rangle, \dots \}$$

et  $\phi_i$  représente l'état des électrons de conduction. Nous avons choisi les états finaux de telle manière que le spin des impuretés soit conservé. La raison est que la relaxation des spins des impuretés ne se fait que par les électrons de conduction.

Le premier terme de (11) correspond à la relaxation de Korringa :

$$W_{m \rightarrow m+1}^{(2)} = 2\pi \left( \frac{A N(0)}{N} \right)^2 k T (I + m + 1) (I - m) \quad (13)$$

les processus contribuant au deuxième terme de (11) sont représentés schématiquement sur la figure 1 et calculés dans l'appendice A.

On obtient :

$$W^{(3)} \sim W^{(2)} \frac{A}{N} N_0 \log T/D \quad (14)$$

ce qui est l'effet Kondo pour le noyau, et complètement négligeable parce que  $A/E_f \sim 10^{-6}$ .

Les processus contribuant à  $W_{ij}^{(4)}$  sont représentés schématiquement sur la figure 2 et sont calculés dans l'appendice B. Le fait que les deux parties de  $W_{ij}^{(4)}$  contiennent en principe les mêmes processus peut se voir en écrivant

$$\delta(E_i - E_f) \left| \sum_c \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cf}}{E_f - E_c + i\delta} \right|^2 = \sum_c \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cf} \mathcal{K}'_{f'c'} \mathcal{K}'_{c'i}}{(E_f - E_c + i\delta)(E_f - E_{c'} - i\delta)} \delta(E_i - E_f) \quad (15)$$

ou bien, en changeant de notation

$$= \sum \frac{\mathcal{K}'_{ic} \mathcal{K}'_{cd} \mathcal{K}'_{df} \mathcal{K}'_{fi}}{(E_d - E_c + i\delta)(E_d - E_f - i\delta)} \delta(E_d - E_i) \quad (16)$$

On voit que seuls les dénominateurs et la fonction  $\delta$  changent.

On trouve :

$$W^{(4)} = + 12\pi (I + m + 1) (I - m) \left( \frac{A J}{N} \right)^2 c z \frac{\ll S_z \gg}{\omega_i E_f} \times \sum_{k, k'} U \left( \frac{|k - k'|}{2 k_f} \right) f_{k\uparrow} (1 - f_{k'\downarrow}) \delta(\varepsilon_{k\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + \omega_n) \quad (17)$$

où

$$U(x) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x} \right]$$

est une fonction de Lindhard.

Il y a évidemment d'autres contributions à  $W^{(4)}$ , qui sont calculées dans l'appendice B, mais elles sont toutes négligeables.

Nous avons ainsi montré que les résultats obtenus dans [1] sont corrects, et que l'effet KONDO n'apparaît pas de manière significative à l'ordre calculé.

### Appendice A

Dans les représentations diagrammatiques des figures 1, 2, 3 et 4, les lignes ondulées représentent une interaction  $\mathcal{K}'$  (c.à.d. soit une interaction  $J S \cdot \sigma$  soit une interaction  $A I \cdot \sigma$ ). Une ligne montante représente un trou, une ligne descendante un électron. Les diagrammes sont à lire de haut en bas.

Dans la diagramme (a) de la figure 1 par exemple, une interaction  $\mathcal{K}'$  crée une paire électron trou ( $q, k\uparrow$ ) (c'est l'état intermédiaire), puis l'électron ( $q$ ) est diffusé dans l'état ( $k'\downarrow$ ). La paire électron trou ( $k\uparrow, k'\downarrow$ ) est l'état final. A cause de notre choix de l'état final, la dernière interaction est forcément  $A I_+ \sigma_-$  pour les diagrammes qui contribuent à  $W^{(3)}$ .

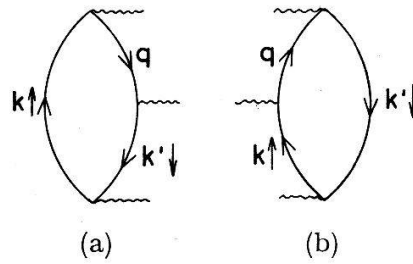


Figure 1

Diagramme contribuant à  $W^{(3)}$ .

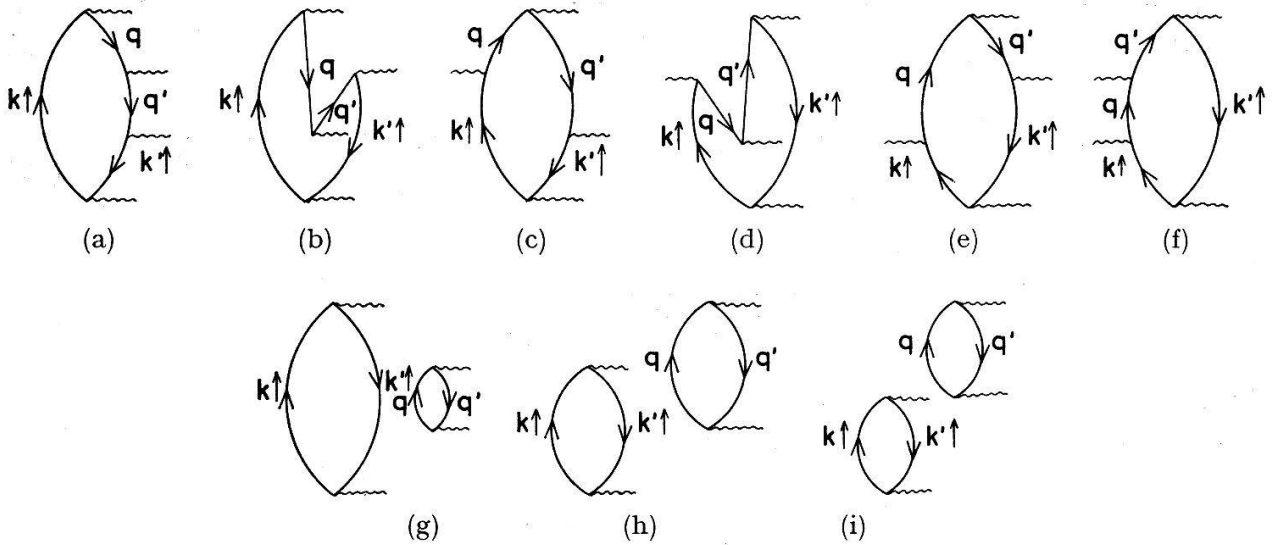


Figure 2

Diagramme contribuant à  $W^{(4)}$ .

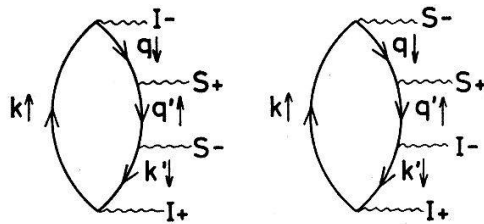


Figure 3

Explication des diagrammes correspondant à la Figure 2 (a).

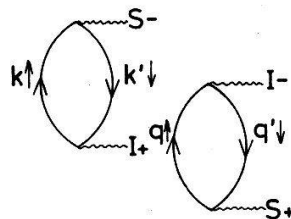


Figure 4

Type de diagramme contribuant en principe à  $W^{(4)(2)}$ .

Les diagrammes s'évaluent de la façon suivante:

- 1) Pour chaque ligne montante  $k$ , introduire un facteur  $f_k$ .
  - 2) Pour chaque ligne descendante  $k$ , introduire un facteur  $\bar{f}_k$  ( $\bar{f}_k = 1 - f_k$ ,  $f_k = 1/(e^{\beta \varepsilon_k} + 1)$ ), le zéro de l'énergie est choisi de telle sorte que  $\mu = 0$ ).
  - 3) Multiplier par un facteur  $(-1)^{r+k}$  où  $r$  est le nombre de trous dans le diagramme et  $s$  est le nombre de boucles fermées.
  - 4) Multiplier par le nombre idoine de facteurs  $-A/N$ ,  $-J/N$ , selon le diagramme, et par le facteur de phase  $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_n}$  correspondant.
  - 5) Multiplier par les éléments de matrice des opérateurs  $S$  et  $I$  correspondant au diagramme. Le facteur  $(I+m+1)(I-m) = \langle i | I - I_+ | i \rangle$  est présent dans chaque diagramme.
  - 6) Un signe  $(-1)$  apparaît en plus pour chaque transition longitudinale avec spin en bas car le vertex longitudinal s'écrit:  $I_z (c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}\downarrow})$ .
- Convention: nous écrivons

$$\left(-\frac{A}{N}\right) \left(-\frac{J}{N}\right) (I+m+1)(I-m) = \{A J\}$$

$$\left(-\frac{A}{N}\right) \left(-\frac{J}{N}\right)^2 (I+m+1)(I-m) = \{-A J^2\} \text{ etc.}$$

### Evaluation des diagrammes de la figure 1

Un des deux premiers vertex des diagrammes de la figure 1 est nécessairement  $A I_- \sigma_+$ , et l'autre est soit  $A I_z \sigma_z$ , soit  $J S_z \sigma_z$ . Comme il y a deux places possibles pour  $A I_- \sigma_+$ , on obtient quatre contributions par diagramme.

#### Diagramme a

1) Avec  $A/N I_z \sigma_z$

$$(i) \quad 2\pi \{A^3\} \sum \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{\bar{f}_{q\downarrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} (m+1)}{\varepsilon_{k\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow} + i\delta} \quad (A-1)$$

$$(ii) \quad -2\pi \{A^3\} \sum \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{\bar{f}_{q\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} m}{\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_m - \varepsilon_{q\uparrow} + i\delta} \quad (A-2)$$

2) Avec  $J/N S_z \sigma_z$

$$(i) \quad 2\pi \{A^2 J\} \sum \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{\bar{f}_{q\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} \langle S_z \rangle e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}_n}}{-\varepsilon_{q\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + i\delta} \quad (A-3)$$

$$(ii) \quad -2\pi \{A^2 J\} \sum \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{\bar{f}_{q\uparrow} \bar{f}_{k'\uparrow} f_{k\uparrow} \langle S_z \rangle e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_n}}{\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q\uparrow} - \omega_m + i\delta} \quad (A-4)$$

#### Diagramme b

1) Avec  $A/N I_z \sigma_z$

$$(i) \quad 2\pi \{A^3\} \sum \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{q\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} (m+1)}{\varepsilon_{q\uparrow} + \varepsilon_{k\uparrow} + i\delta} \quad (A-5)$$

$$(ii) \quad -2\pi \{A^3\} \sum \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{q\downarrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} m}{\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m + i\delta} \quad (A-6)$$

2) Avec  $J/N S_z \sigma_z$

$$(i) \quad 2 \pi \{A^2 J\} \Sigma \delta (\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{q\downarrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} \langle S_z \rangle e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{\varepsilon_{q\uparrow} - \varepsilon_{k\uparrow} + i \delta} \quad (A-7)$$

$$(ii) \quad - 2 \pi \{A^2 J\} \Sigma \delta (\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{q\downarrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} \langle S_z \rangle e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n}}{\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m + i \delta} \quad (A-8)$$

Nous pouvons partout faire d'abord la somme sur  $\varepsilon_{k'}$ , ce qui donne pour  $(A-1)$ , en prenant un modèle de bande symétrique avec une densité d'état constante  $N_0$

$$(A-1) = 2 \pi \{A^3\} N_0^3 \int d\varepsilon_k d\varepsilon_q \frac{\bar{f}_{q\downarrow} \bar{f}_{k\uparrow} f_{k\uparrow} (m+1)}{\varepsilon_{k\uparrow} - \varepsilon_{q\downarrow} + \omega_m + i \delta}$$

d'où

$$2 \operatorname{Re} (A-1) \cong - 4 \pi \{-A^3\} N_0^3 T \log \left( \frac{T}{D} \right) (m+1) \quad (A-9)$$

où  $D$  est la largeur de bande. De façon semblable,

$$2 \operatorname{Re} (A-2) = 4 \pi \{-A^3\} N_0^3 k T \log \left( \frac{T}{D} \right) (m) \quad (A-10)$$

$$2 \operatorname{Re} (A-5) = - 4 \pi \{-A^3\} N_0^3 k T \log \left( \frac{T}{D} \right) (m+1) \quad (A-11)$$

$$2 \operatorname{Re} (A-6) = 4 \pi \{-A^3\} N_0^3 k T \log \left( \frac{T}{D} \right) (m). \quad (A-12)$$

En sommant ces quatre contributions, on obtient:

$$8 \pi \{A^3\} N_0^2 T \log \frac{T}{D} = W_{\text{Korringa}}^{(2)} [4(A/N) N \log(T/D)]. \quad (A-13)$$

Les contributions dépendant de  $\{A^2 J\}$  posent un petit problème. La seule manière de traiter une distribution aléatoire d'impuretés est de remplacer la somme sur  $\mathbf{R}_n$  par une intégrale. Dans ce cas toutes ces contributions sont purement imaginaires. Si l'on hésite à utiliser cet argument pour montrer que ces contributions sont négligeables, il faut considérer le problème avec une seule impureté.

On obtient alors par exemple:

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Re} (A-3 + A-8) &= - 2 \pi \{A^2 J\} N_0 P \int \frac{\bar{f}_{k'\downarrow} f_{k'\downarrow} e^{i(k'-q) \cdot \mathbf{R}_n}}{\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow} + i \delta} \langle S_z \rangle d^3 k' d^3 q \\ &\leq - 2 \pi \{A^2 J\} N_0^2 \langle S_z \rangle \int d^3 k' \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k'\downarrow} \log \left| \frac{D + \varepsilon_{k'\downarrow}}{-D + \varepsilon_{k'\downarrow}} \right| \sim 0. \end{aligned}$$

## Appendice B

Chacun des diagrammes de la figure 2 contient au moins un vertex  $A I_- \sigma_+$  et un vertex  $A I_+ \sigma_-$ . Pour les deux autres vertex on a le choix entre

- 1) deux transitions longitudinales,
- 2) deux transitions de renversement de spin.

Il est facile de voir que chacun des diagrammes de la figure 2 donne lieu à une grande prolifération de contributions différentes. Il est cependant inutile de les calculer toutes. En effet

- 1) Puisque  $A \sim 10^{-6} J$ , les contributions proportionnelles à  $A^2 J^2$  dominent certainement les contributions proportionnelles à  $A^3 J$  ou  $A^4$ .

- 2) Les contributions provenant de deux transitions longitudinales  $S_z$  sont essentiellement équivalentes à celles que l'on obtiendrait avec un potentiel indépendant du spin. Nous les négligerons (cf. les contributions A.3, A.4, A.7, A.8).
- 3) Certaines contributions provenant de (2) (g) par exemple sont non-connexes, et représentent des fluctuations du vide. N.B. Contrairement aux apparences, certaines contributions provenant de (2) (g) sont connexes: lorsque un vertex  $J S_-^n \sigma_+$  apparaît sur une boucle et un vertex  $J S_+^n \sigma_-$  apparaît sur l'autre boucle. Nous écrivons maintenant:

$$W_{if}^{(4)} = W_{if}^{(4)(1)} + W_{if}^{(4)(2)}$$

où  $W_{if}^{(4)(2)}$  est donné par la formule (15).

#### A) Contributions à $W_{if}^{(4)(1)}$

Dans ce cas le dernier vertex est nécessairement  $A I_+ \sigma_-$ .

##### Diagramme a

A titre d'exemple les deux possibilités découlant du diagramme (a) sont explicitées dans la figure 3.

$$) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{\bar{f}_{q\downarrow} \bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow} + i\delta) (\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} + \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-1})$$

c.c. signifie: complexe conjugué.

$$i) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{\bar{f}_{q\downarrow} \bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_n - \varepsilon_{q\downarrow} - \omega_i + i\delta) (\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_n - \varepsilon_{q'\uparrow} + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-2})$$

##### Diagramme b

$$) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{\bar{f}_{q\downarrow} \bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow} + i\delta) (\varepsilon_{q'\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow} - \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-3})$$

$$i) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{\bar{f}_{q\downarrow} \bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_n - \varepsilon_{q\downarrow} - \omega_i + i\delta) (\varepsilon_{q'\uparrow} - \varepsilon_{q\downarrow} - \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-4})$$

##### Diagramme c

$$) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{\bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} + \omega_i + i\delta) (\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} + \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-5})$$

$$i) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{\bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} + \omega_i + i\delta) (\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_n - \varepsilon_{q'\uparrow} + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-6})$$

##### Diagramme d

$$) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{f_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_i + i\delta) (\varepsilon_{k'\uparrow} - \varepsilon_{q\downarrow} - \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-7})$$

$$i) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_n) \frac{f_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + \omega_n + i\delta) (\varepsilon_{q'\uparrow} - \varepsilon_{q\downarrow} - \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-8})$$

##### Diagramme e

$$) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{\bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k'\uparrow} + \omega_i + i\delta) (\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-9})$$

$$i) \quad -2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{\bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q\downarrow} f_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} + \omega_i + i\delta) (\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + \omega_i + \omega_n + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (\text{B-10})$$



*Diagramme f*

$$(i) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} f_{q\downarrow} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_i + i\delta)(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

$$(ii) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{q'\uparrow} f_{k'\downarrow} f_{k\uparrow} f_{q\downarrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + \omega_n + i\delta)(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} + \omega_n + \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

*Diagramme g*

$$(i) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q'\downarrow} f_{q\uparrow} e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}' + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(-\omega_m - \omega_i + i\delta)(\varepsilon_{-q\uparrow} \varepsilon_{q'\downarrow} - \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

$$(ii) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q'\uparrow} f_{q\downarrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(-\omega_m - \omega_i + i\delta)(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} - \omega_m + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

*Diagramme h*

$$(i) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} f_{q\uparrow} \bar{f}_{q'\downarrow} e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}' + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\uparrow} - \varepsilon_{q'\downarrow} + \omega_m + i\delta)(\varepsilon_{q\uparrow} - \varepsilon_{q'\downarrow} - \omega_n + \omega_i + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

$$(ii) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} f_{q\downarrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q'\uparrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{k'\uparrow} - \omega_i + i\delta)(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

*Diagramme i*

$$(i) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \bar{f}_{q'\downarrow} f_{q\uparrow} e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}' + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\uparrow} - \varepsilon_{q'\downarrow} + \omega_m + i\delta)(\omega_i + \omega_m + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

$$(ii) \quad 2\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} f_{q\downarrow} \bar{f}_{q'\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q\downarrow} - \varepsilon_{q'\uparrow} + \omega_i + i\delta)(\omega_i + \omega_m + i\delta)} + \text{c.c.} \quad (B-1)$$

B) Contribution à  $W_{if}^{(4)(2)}$ 

En principe, chacun des diagrammes de la figure 2 contribue à  $W_{if}^{(4)(2)}$ , et il y a aussi quelques diagrammes supplémentaires, tels que celui de la figure 4, car le vertex  $A I_+ \sigma_-$  n'est plus nécessairement le dernier, mais un des derniers. Il est facile de voir cependant qu'aucun des diagrammes possibles ne satisfait notre choix d'états finaux (équation 12), compte tenu du fait que nous négligeons les transitions longitudinales. On trouve donc

$$W_{if}^{(4)(2)} = 0. \quad (B-19)$$

C) Calcul de  $W_{if}^{(4)}$ 

Pour chacune des contributions (B-1), (B-2), etc., il faut calculer la partie réelle. Celle-ci provient de deux termes. Symboliquement, on peut écrire, si  $A$  est réel

$$\text{Re} \Sigma \frac{A}{(E_f - E_c + i\delta)(E_f - E_d + i\delta)} = P \Sigma \frac{A}{(E_f - E_c)(E_f - E_d)} - \Sigma A \pi^2 \delta(E_p - E_c) \delta(E_f - E_d) \quad (B-20)$$

On voit qu'en intégrant sur les angles de  $\mathbf{k}'$  et  $\mathbf{q}$  dans (B-1) par exemple, le numérateur devient réel.  $A$  est donc réel et nous pouvons appliquer la formule ci-dessus.

## 1) Calcul des parties principales

Nous rencontrons à nouveau le problème rencontré à la fin de l'appendice A.

Nous nous contenterons de montrer que pour une seule impureté, la plupart des contributions sont négligeables.

On trouve:

$$\begin{aligned} \text{B-1} + \text{B-2} + \dots + \text{B-12} = & -4\pi \{A^2 J^2\} P \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\uparrow} - \varepsilon_{k\downarrow} - \omega_m) f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \\ & \times \left\{ \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\downarrow} - \varepsilon_{k'\downarrow})(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow})} (\langle S_- S_+ \rangle f_{q'\uparrow} + \langle S_+ S_- \rangle \bar{f}_{q'\uparrow}) \right. \\ & \left. + \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\downarrow} + \omega_i - \varepsilon_{k'\downarrow})(\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_i - \varepsilon_{q\downarrow})} (\langle S_- S_+ \rangle f_{q'\uparrow} + \langle S_+ S_- \rangle \bar{f}_{q'\uparrow}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B-21})$$

En écrivant

$$\langle S_+ S_- \rangle = \langle S_- S_+ \rangle + 2\langle S_z \rangle$$

on obtient

$$\begin{aligned} & -\langle S_- S_+ \rangle 4\pi \{A^2 J^2\} \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \\ & \times \left\{ \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\downarrow} - \varepsilon_{k'\downarrow})(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow})} + \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_n}}{(\varepsilon_{q'\downarrow} + \omega_i - \varepsilon_{k'\downarrow})(\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_i - \varepsilon_{q\downarrow})} \right\} \\ & -\langle S_z \rangle 8\pi \{A^2 J^2\} \Sigma \delta(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} - \omega_m) f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow} \\ & \times \left\{ \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}_n} \bar{f}_{q'\uparrow}}{(\varepsilon_{q'\downarrow} - \varepsilon_{k'\downarrow})(\varepsilon_{k'\downarrow} - \varepsilon_{q\downarrow})} + \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_n} \bar{f}_{q'\uparrow}}{(\varepsilon_{q'\downarrow} + \omega_i - \varepsilon_{k'\downarrow})(\varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_i - \varepsilon_{q\downarrow})} \right\} \end{aligned} \quad (\text{B-22})$$

Pour une impureté, le premier terme est de l'ordre

$$\sim \langle S_- S_+ \rangle \{A^2 J^2\} N_{(0)}^4 \log\left(1 + \frac{\omega_i}{D}\right)^2$$

Le deuxième terme est de l'ordre

$$\sim \{A^2 J^2\} N_{(0)}^4 \log\left(1 + \frac{\omega_i}{D}\right) \log\frac{kT}{D}$$

Ces deux termes sont négligeables.

Les termes B-13, 14, 17 et 18 correspondent à l'expression calculée dans la référence 1. Pour montrer cela il est pratique de faire d'abord la moyenne sur les impuretés:

$$\text{B-13} = 4\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle N_c \Sigma \delta(\varepsilon_{k\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow}}{-\omega_m - \omega_i} \sum_{\bar{k}} \frac{\bar{f}_{\bar{k}\downarrow} f_{\bar{k}+k'-k\uparrow}}{\varepsilon_{\bar{k}+k'-k\uparrow} - \varepsilon_{\bar{k}\downarrow} - \omega_i} \quad (\text{B-23})$$

$$\text{B-14} = 4\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle N_c \Sigma \delta(\varepsilon_{k\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_m) \frac{f_{k\downarrow} \bar{f}_{k'\downarrow}}{-\omega_m - \omega_i} \sum_{\bar{k}} \frac{\bar{f}_{\bar{k}\uparrow} f_{\bar{k}+k'-k\uparrow}}{\varepsilon_{\bar{k}+k'-k\downarrow} - \varepsilon_{\bar{k}\downarrow} - \omega_m} \quad (\text{B-24})$$

$$\text{B-17} = 4\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle N_c \Sigma \delta(\varepsilon_{k\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow}}{\omega_m + \omega_i} \sum_{\bar{k}} \frac{\bar{f}_{\bar{k}\downarrow} f_{\bar{k}+k'-k\uparrow}}{\varepsilon_{\bar{k}+k'-k\uparrow} - \varepsilon_{\bar{k}\downarrow}} \quad (\text{B-25})$$

$$\text{B-18} = 4\pi \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle N_c \Sigma \delta(\varepsilon_{k\uparrow} - \varepsilon_{k'\downarrow} - \omega_m) \frac{f_{k\uparrow} \bar{f}_{k'\downarrow}}{\omega_m + \omega_i} \sum_{\bar{k}} \frac{\bar{f}_{\bar{k}\uparrow} f_{\bar{k}+k'-k\downarrow}}{\varepsilon_{\bar{k}+k'-k'\downarrow} - \varepsilon_{\bar{k}\uparrow} + \omega_i} \quad (\text{B-26})$$

Dans ces expressions, la somme sur  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  se fait sur la surface de Fermi, de telle sorte que  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$  varie entre 0 et  $2k_f$ . Il s'ensuit que pour la plus grande partie de la somme

$$\varepsilon_{\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}} - \varepsilon_{\bar{\mathbf{k}}} \gg \omega_i$$

$$\sum \frac{\bar{f}_{\bar{\mathbf{k}}} \bar{f}_{\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}}}{\varepsilon_{\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}} - \varepsilon_{\bar{\mathbf{k}}}} \simeq - \frac{N(0)}{2} U \left( \frac{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|}{2k_f} \right)$$

où

$$U(x) = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right)$$

D'où

$$\text{B-13} + \text{B-14} + \text{B-17} + \text{B-18}$$

$$= -8\pi \{A^2 J^2\} N_0 \frac{\langle S_z \rangle}{\omega_i} N_c \sum \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}'\downarrow} + \omega_m) f_{\mathbf{k}\uparrow} f_{\mathbf{k}'\downarrow} U \frac{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|}{2k_f} \quad (\text{B-27})$$

$$= -12\pi z \left( \frac{A^2 J^2}{N^4} \right) \frac{N}{E_f} (I + m + 1) (I - m)$$

$$\times \frac{\langle S_z \rangle}{\omega_i} N_c z \sum \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}'\downarrow} + \omega_m) f_{\mathbf{k}\uparrow} f_{\mathbf{k}'\downarrow} U \frac{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|}{2k_f} \quad (\text{B-28})$$

Il reste B.15 et B.16

$$\begin{aligned} \text{B-15} &= 4\pi \{A^2 J^2\} \langle S_- S_+ \rangle N_c \sum \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}'\downarrow} + \omega_m) \frac{1}{\omega_i} f_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{f}_{\mathbf{k}'\downarrow} \sum \bar{f}_{\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{k} - \mathbf{k}'} \bar{f}_{\bar{\mathbf{k}}} \\ &\times \left\{ \frac{1}{\varepsilon_{\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{k} - \mathbf{k}'\uparrow} - \varepsilon_{\bar{\mathbf{k}}\downarrow}} - \frac{1}{\varepsilon_{\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{k} - \mathbf{k}'\uparrow} - \varepsilon_{\bar{\mathbf{k}}\downarrow} + \omega_i} \right\} \simeq 0 \end{aligned}$$

et pour la même raison que ci-dessus B.16  $\simeq 0$ .

## 2) Calcul des parties imaginaires

Il est facile de voir que toutes ces contributions sont de l'ordre

$$\sim W^{(2)} \left( \frac{J}{E_f} \right)^2$$

Par exemple, pour B.1, on obtient, pour une impureté:

$$\sim \frac{\pi^3}{2} \{A^2 J^2\} \langle S_+ S_- \rangle k T e^{i(k'-q)R_n} N_0^4.$$

## Références

- [1] B. GIOVANNINI et A. J. HEEGER, 7, 287 (1969).
- [2] J. KONDO, Progr. Theor. Phys. 32, 37 (1964).