

Zeitschrift: Archives des sciences [1948-1980]
Herausgeber: Société de Physique et d'Histoire Naturelle de Genève
Band: 19 (1966)
Heft: 3

Artikel: Corrélations entre vitesse ultrasonore et susceptibilité magnétique de quelques alliages de palladium
Autor: Belahmi, Ouazzani
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-739332>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 05.01.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

CORRÉLATIONS ENTRE VITESSE ULTRASONORE ET SUSCEPTIBILITÉ MAGNÉTIQUE DE QUELQUES ALLIAGES DE PALLADIUM

PAR

Ouazzani BELMAHI

INTRODUCTION

Les alliages de Palladium-Rhodium et Palladium-Argent ont déjà été étudiés expérimentalement par divers auteurs pour les propriétés suivantes :

*chaleur spécifique électronique (coefficient γ) ;
susceptibilité magnétique en fonction de la température ;
température de Debye ;
résistivité en fonction de la température.*

Il a été établi que le coefficient de chaleur spécifique électronique et les susceptibilités magnétiques mesurées de ces alliages présentaient un maximum bien prononcé autour de la concentration Pd-Rh 95/5. Les deux courbes montraient que la chaleur spécifique aussi bien que la susceptibilité se réduisaient à celles de l'Argent vers la concentration atomique de 55 % d'Argent ; ce qui permettait d'attribuer au Pd 0,55 trous environ par atome dans la bande d. Quant à la courbe des températures de Debye mesurées, elle présente un minimum autour de la concentration Pd-Rh 95/5.

L'étude qui est présentée dans cette thèse (nous en donnons ici un résumé) se propose d'établir théoriquement et expérimentalement une corrélation entre la vitesse ultra-sonore, la compressibilité et la susceptibilité magnétique sur des échantillons polycristallins de ces alliages. Les mesures ont été faites à 300° K et 70° K.

La théorie part du modèle du jellium et de la décomposition de jellium en :

*énergie cinétique + énergie électrostatique des ions plongés dans un bain uniforme de charge négative des électrons ;
il est tenu compte ensuite de l'effet des électrons.*

La constante diélectrique apparaît dans son rôle de renormalisation du couplage électron-phonon et de la fréquence phononique longitudinale. Les résultats des calculs théoriques plus poussés sont donnés.

Les résultats expérimentaux concernant les mesures des vitesses longitudinales paraissent confirmer, à ce stade de la recherche, la validité de la théorie pour une bande parabolique des électrons.

Des mesures ont été faites aussi pour les vitesses transversales ; dans l'interprétation, on montre que le module de cisaillement g ne peut être obtenu dans le modèle du jellium ; la température de Debye pourrait contribuer à l'explication de cet effet.

Le critère de Gusman-Brout qui est défini par la valeur du rapport de la compressibilité du "core" ionique à la compressibilité électronique permettra d'aboutir à la suppression de la supraconductivité de nos alliages.

Une remarque : la corrélation pourrait être obtenue dans le cadre de la théorie de Landau des liquides de Fermi. Une publication sera faite à ce sujet.

CHAPITRE PREMIER

PARTIE THÉORIQUE: ÉTABLISSEMENT DE LA CORRÉLATION

I. COMPRESSIBILITÉ D'UN GAZ ÉLECTRONIQUE

Je considère avec Delaunay [1] et Rayne [2] que la compressibilité du gaz électronique dans un métal est donné par:

$$K_e = V \frac{\partial^2 U}{\partial V^2}$$

où V est le volume et U l'énergie interne du gaz électronique. Cette dernière est donnée par:

$$U = U_0 + V \int_0^{\epsilon_f} N(\epsilon) \epsilon d\epsilon + \frac{\pi^2}{3} (kT)^2 \left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} \{ \epsilon N(\epsilon) \} \right]_{\epsilon_f}; \quad \epsilon_f = \text{énergie de Fermi}$$

ce qui, au zéro absolu, donne:

$$U = U_0 + V \int_0^{\epsilon_f} N(\epsilon) \epsilon d\epsilon$$

$N(E)$ est la densité d'état. Je laisse de côté U_0 qui tient compte de toutes les contributions des bandes remplies, etc. pour n'écrire que:

$$U = V \int_0^{\epsilon_f} N(\epsilon) \epsilon d\epsilon$$

On a:

$$\frac{\partial U}{\partial V} = \int_0^{\epsilon_f} N(\epsilon) \epsilon d\epsilon + V \int_0^{\epsilon_f} N(\epsilon) \frac{d\epsilon}{dV} d\epsilon.$$

Je suppose N indépendant du volume.

D'où:

$$\frac{\partial U}{\partial V} = \int_0^{\epsilon_f} N(\epsilon) \epsilon d\epsilon + V N(\epsilon_f) \int_0^{\epsilon_f} \frac{d\epsilon}{dV} d\epsilon = \int_0^{\epsilon_f} N(\epsilon) \epsilon d\epsilon + V N(\epsilon_f) \epsilon_f \frac{d\epsilon_f}{dV}$$

Mais:

$$\frac{\partial \varepsilon_f}{\partial V} = \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial n} \cdot \frac{\partial n}{\partial V}$$

$\partial \varepsilon_f / \partial n$ est l'inverse de la densité d'états à la surface de Fermi. En effet, on peut écrire:

$$\left(\frac{dn}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_f} = \left[\left(\frac{dn}{dk} \right) \frac{1}{\partial \varepsilon_k / \partial k} \right]_{k=k_f} = \frac{mk_f}{\pi^2 \hbar^2} = N(\varepsilon_f)$$

et:

$$\left(\frac{1}{\partial \varepsilon_k / \partial k} \right)_{k=k_f} = \frac{m}{\hbar^2 k_f}; \quad \left(\frac{dn}{dk} \right)_{k_f} = \frac{k_f^2}{\pi^2}$$

car:

$$k_f^3 = \frac{3\pi^2}{n}; \quad n = \frac{N}{V}$$

et comme:

$$\frac{\partial n}{\partial V} = -\frac{n}{V},$$

on a:

$$\frac{\partial \varepsilon_f}{\partial V} = -\frac{n}{VN(\varepsilon_f)}.$$

Par suite:

$$\frac{\partial U}{\partial V} = \int_0^{\varepsilon_f} N(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon - n\varepsilon_f$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial^2 V} = N(\varepsilon_f) \varepsilon_f \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial V} - n \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial V} - \varepsilon_f \frac{\partial n}{\partial V} = -\frac{n\varepsilon_f}{V} + \frac{n^2}{VN(\varepsilon_f)} + \frac{n\varepsilon_f}{V}$$

d'où:

$$K_e = \frac{n^2}{N(\varepsilon_f)}.$$

La compressibilité est inversement proportionnelle à la densité d'états à la surface de Fermi, $N(E_f)$.

Estimation (pour les électrons d dans le Palladium [2]):

$$n = 6,1 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$$

$$N(E) = 1,6 \cdot 10^{35} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{erg}^{-1} \left(\text{tiré de } N = \frac{2}{3} \cdot \frac{\epsilon f}{n} \right)$$

d'où:

$$K_e = 2,3 \cdot 10^{12} \text{ dynes} \cdot \text{cm}^{-2}$$

II. MODÈLE DE SCHRIEFFER [3]

Le hamiltonien de base qui décrit notre modèle du solide est de la forme:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{ion} + \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{el-ion} \\ \mathcal{H}_{ion} &= \sum_i \frac{P_i^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(R_i - R_j) \end{aligned}$$

où:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{el} &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \\ \mathcal{H}_{el-ion} &= \sum_{i,j} v(\sigma_i - R_j) \end{aligned}$$

Nous considérons ici le hamiltonien total \mathcal{H} pour les électrons de conduction dans les métaux; et, dans ce hamiltonien, nous tenons compte:

des effets de l'interaction électron-électron;

de l'interaction électron-ion

sur le mouvement des phonons et des électrons.

Nous pouvons écrire ce hamiltonien total sous la forme:

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i\alpha} v(r_i - R_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \mathcal{H}_{phon}$$

où, par transformation en modes normaux [4], on a:

$$\mathcal{H}_{phon} = \sum_{k\mu} \frac{P_{k\mu}^+ P_{k\mu}}{2} + \frac{\Omega^2 k\mu}{2} q_{k\mu}^+ q_{k\mu}$$

Le modèle de Schrieffer part du modèle du jellium et de la décomposition de ce jellium en:

énergie cinétique électrostatique des ions plongés dans un bain uniforme de charge négative des électrons;

il considère ensuite l'effet des électrons.

Nous avons donc affaire à un réseau d'ions qui interagissent seulement par des interactions coulombiennes. Le fait de supposer que les ions sont plongés dans un bain uniforme de charge négative assure la neutralité de charge et la stabilité.

Pour un tel système, les fréquences phononiques pour une direction donnée de propagation satisfont à une règle de somme très simple [4]:

$$M \sum_{\lambda} \omega_{k\lambda}^2 = N V_k k^2 .$$

D'autre part, pour des interactions coulombiennes entre les ions, V_k est donné par [4]:

$$V_k = \frac{4\pi Z^2 e^2}{k^2}$$

Z est la charge sur chaque ion.

On a alors:

$$\sum_{\lambda} \omega_{k\lambda}^2 = \frac{4\pi N Z^2 e^2}{M} = \Omega_p^2$$

Nous nous trouvons donc dans le cas d'un plasma ionique dont la fréquence de plasma est donnée par:

$$\Omega_p = \left[\frac{4\pi N Z^2 e^2}{M} \right]^{\frac{1}{2}}$$

Quels sont maintenant les effets des électrons ?

La partie du hamiltonien total considéré par le modèle de Schrieffer est la partie ionique, qui donne lieu au hamiltonien phononique. La principale influence de l'interaction électron-électron est d'écranter les interactions électron-ion et ion-ion. Nous savons qu'au premier ordre, le hamiltonien électron-ion donne lieu à l'interaction électron-phonon.

Qu'en est-il du couplage (ou élément de matrice que nous désignerons avec Bardeen [5] par V_k^i) des électrons au champ phononique ? Il s'ensuit un champ de polarisation dans le gaz électronique qui change ce couplage de sorte que l'interaction électron-phonon effective est l'interaction électron-phonon renormalisée par la constante diélectrique statique (à une certaine approximation) $\varepsilon(k, 0)$:

$$V_k^{eff} = \frac{V_k^i}{\varepsilon(k, 0)}$$

Autrement, quand un ion se déplace, il se produit une perturbation de charge associée à ce mouvement ionique, ce qui tend à polariser le gaz électronique; cette polarisation à son tour change l'interaction effective entre les ions (ou champ ionique

effectif), et par suite change les fréquences phononiques caractéristiques des ions plongés dans un bain uniforme de charge négative. Ainsi la fréquence phononique longitudinale « nue » se trouve aussi renormalisée par la constante diélectrique (exactement par $\sqrt{(\epsilon k, 0)}$) et l'interaction ion-ion « nue » par $\epsilon(k, 0)$.

Nous allons examiner ceci un peu plus en détails.

Nous regardons le mouvement ionique comme introduisant une perturbation dans le gaz électronique, de sorte qu'on peut écrire pour la charge :

$$\rho = edn + n_0 e$$

d'où: $\Delta V = -4\pi\rho\epsilon$ V , potentiel résultant.

Par transformée de Laplace avec $V = \sum V_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$, on a :

$$q^2 V_q = 4\pi e(edn_q + n_{0q} e) .$$

D'autre part :

$$\mu = \epsilon_f + V = \text{const.}$$

soit: $d\epsilon_f = -dV = -V$ (linéarisation).

On peut écrire :

$$\frac{dn}{n} = \frac{1}{n} \frac{dn}{d\epsilon_f} d\epsilon_f$$

mais :

$$dn/dE_f = \text{densité d'états, } N(E_f) .$$

On sait que :

$$N = \frac{3}{2} \frac{n}{e_f}$$

ce qui conduit à

$$\frac{dn}{n} = \frac{3}{2} \frac{d\epsilon_f}{\epsilon_f}$$

ou :

$$dn = -\frac{3}{2} \frac{nV}{\epsilon_f} .$$

Ce qui entraîne :

$$q^2 V_q = 4\pi \left[-\frac{3}{2} \frac{nV_q e^2}{\epsilon_f} + e^2 n_0 \right] = -\frac{6\pi n e^2}{\epsilon_f} V_q + 4\pi e^2 n_0$$

d'où:

$$V_q = -\frac{6\pi n e^2}{q^2 \epsilon_f} V_q + \frac{4\pi e^2 n_0}{q^2}.$$

Posons:

$$V_q^o = \frac{4\pi e^2}{q^2} n_0.$$

Finalement:

$$\frac{V_q}{V_q^o} = \frac{1}{1 + \frac{6\pi n e^2}{q^2 \epsilon_f}} = \frac{1}{\kappa}$$

K est la fonction diélectrique.

En introduisant le potentiel V_q , la fréquence effective d'onde sonore longitudinale devient:

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi Z^2 e^2 n}{M\kappa}.$$

Pour $q = 0$, on a:

$$K = 1 + \frac{k_T^2}{q^2} = \frac{k_T^2}{q^2}$$

(approximation de Thomas-Fermi).

D'où:

$$\frac{\omega_p^2}{q^2} = \frac{4\pi e^2 Z^2 n}{M k_{TF}^2}$$

avec:

$$k_{TF}^2 = \frac{6\pi n e^2}{\epsilon_f}.$$

La vitesse de propagation du son dans le métal est donné par:

$$v_l = \frac{\omega_p}{q}.$$

On a alors:

$$v_l^2 = \frac{4\pi e^2 Z^2 n}{M \cdot 6\pi n e^2} \epsilon_f = \frac{2 Z^2}{3 M} \epsilon_f$$

d'où:

$$v_l^2 = \frac{1}{3} \frac{m^*}{M} v_f^2$$

avec $Z = 1$

soit:

$$v_l = \sqrt{\frac{1}{3} \cdot \frac{m^*}{M}} \cdot v_f$$

v_f = vitesse de Fermi.

Passons à la compressibilité qui est donnée par:

$$\bar{K} = \rho_m \cdot \frac{\omega_p^2}{q^2} = nM \cdot \frac{4\pi e^2 Z^2 n}{M k_{TF}^2}$$

avec:

$$\rho_m = nM .$$

soit:

$$\bar{K} = \frac{4\pi e^2}{k_{TF}^2} \cdot Z^2 n^2$$

mais:

$$k_{TF}^2 = \frac{6\pi n e^2}{\varepsilon_f}$$

d'où finalement:

$$\bar{K} = \left(\frac{2}{3} \cdot \frac{\varepsilon_f}{n} \right) \cdot Z^2 n^2 .$$

La quantité entre parenthèses n'est pas autre chose que l'inverse de la densité d'états à la surface de Fermi; on peut alors écrire:

$$\bar{K} = \frac{Z^2 n^2}{N(\varepsilon_f)}$$

résultat que nous avons déjà vu.

Signalons que le résultat pour la vitesse du son longitudinale a été obtenu par d'autres méthodes par Bohm et Staver [6], puis par Kittel [7].

Dans l'approximation *RPA* [8], K est donnée par:

$$K = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} N(\varepsilon_f) U\left(\frac{q}{2k_f}\right)$$

où $U(x)$ est donnée par:

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

Un calcul meilleur donné par Giovannini, Peter et Schrieffer [8] donne, en tenant compte de l'échange:

$$K = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} N(\epsilon_f)/(1 - N(\epsilon_f) \bar{V} U(x))$$

\bar{V} est l'élément de matrice représentant l'échange.

Comme:

$$v_{son} \sim \frac{1}{K}$$

on voit que la vitesse du son, de même que la compressibilité, présenteront un minimum là où la susceptibilité χ présentera un maximum.

III. SUSCEPTIBILITÉ ET EFFET D'ÉCHANGE

Nous allons exposer ici brièvement les diverses contributions à la susceptibilité pour les métaux de transition qui nous intéressent et à leurs alliages.

La susceptibilité totale χ peut s'écrire sous la forme:

$$\chi_{tot} = \chi_{diam} + \chi_{vv} + \chi_L + [\chi_{s(P)} + \chi_{d(P)}] + \chi_i.$$

Je n'insiste pas sur les première, deuxième, troisième et cinquième contributions. Je donnerai des ordres de grandeur dus à Seitchik et Gossard [10].

χ_{diam} : contribution diamagnétique provenant du mouvement orbital des électrons liés aux atomes métalliques;

une estimation: $\chi_{diam} \cong -25 \cdot 10^{-6}$ emu/mole.

χ_{vv} : susceptibilité de Van Vleck, orbitale, indépendante de la température;

une estimation: $\chi_{vv} \cong 30 \cdot 10^{-6}$ emu/mole.

χ_L : susceptibilité du diamagnétisme de Landau dû au mouvement orbital des électrons de conduction;

on a:

$$\chi_{L(s)} = -\frac{1}{3} \chi_{s(P)}$$

$P = \text{Pauli.}$

$$\chi_{L(d)} \ll \chi_d(P)$$

d'où $\chi_L(d)$ négligé.

- χ_i : contribution due aux impuretés magnétiques dissoutes dans le métal; elle est faible dans les métaux purs, mais peut devenir importante dans les alliages.
- $\chi_s(P)$: susceptibilité de spin de Pauli des électrons s ; elle est donnée par:

$$\chi_s(P) = 2\beta^2 N_s(\varepsilon_f)$$

$N_s(E_f)$ est la densité d'états des électrons s à la surface de Fermi; une estimation:

$$\chi_s(P) = 6,2 \cdot 10^{-6} \text{ emu/mole [11].}$$

$\chi_d(P)$: susceptibilité des électrons d . Elle est donnée par [8]:

$$\chi_d = \frac{\chi_d^0}{1 - \bar{v} N_d(\varepsilon_f)},$$

χ_d^0 est donnée par:

$$\chi_d^0 = 2\beta^2 N_d(\varepsilon_f),$$

β est le magnéton de Bohr.

\bar{v} représente l'interaction d'échange entre les électrons d ; la densité d'états $N_d(E_f)$ peut être tirée du coefficient γ de la chaleur spécifique électronique. En effet, on a:

$$N_d(\varepsilon_f) = \frac{\gamma}{(2\pi^2/3) k_B^2},$$

k_B est la constante de Boltzmann.

Il est clair que si:

$$\bar{v} N_d(\varepsilon_f) \ll 1$$

alors: $\chi_d = \chi_d^0$; dans le cas où il tend vers 1, alors χ_d est la contribution la plus importante.

Ceci explique ce qui se passe pour les alliages de Palladium-Rhodium; en particulier la courbe présente un maximum pour le *Pd-Rh* 95/5.

Disons en plus que lorsque $\bar{v} N_d(\varepsilon_f) = 1$, alors χ_d devient infini, ce qui n'est pas possible car on arrive à saturation du moment magnétique (les spins des électrons d sont alignés); on pourrait avoir transition à l'état ferromagnétique, comme ce serait par exemple le cas du Nickel.

La grande susceptibilité électronique du *Pd* [8] est liée à une forte interaction d'échange.

On en arrive [8] à:

$$\chi_{(q)} = (\beta g_e/2)^2 \frac{2N(\varepsilon_f) U(x)}{1 - \bar{v} N(\varepsilon_f) U(x)}$$

où :

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

pour aboutir à :

$$\chi_{(o)} = \frac{g^2 \beta^2 N(\epsilon_f)/2}{1 - \bar{v} N(\epsilon_f)}.$$

Si l'on compare à la formule de la vitesse du son ou à celle de la compressibilité, on comprend alors l'existence d'une telle corrélation entre la vitesse ultra-sonore et la susceptibilité paramagnétique des alliages de *Pd-Rh* et *Pd-Ag*.

RÉFÉRENCES

1. DELAUNAY, J. in « Solid State Physics », edited by F. Seitz and D. Turnbull (*Academic Press, Inc.*, New York, 1956); vol. 2, p. 227.
2. RAYNE, J. A. Elastic Constants of *Pd* from 4.2 — 300° K. *Phys. Rev.*, 118 p. 1545 (1960).
3. SCHRIEFFER, J. R. *Physique des métaux aux basses températures*. Cours donné à l'Institut de Physique de Genève. Rédaction de Giovannini (1963).
4. PINES, D. *Elementary Excitations in Solids*. W. A. Benjamin, Inc., New York (1963).
5. BARDEEN, J. *Phys. Rev.*, 52, 688 (1937).
6. BOHM, D. and STAYER. *Phys. Rev.*, 84, 836 (1952).
7. KITTEL, C. *Quantum Theory of Solids* (1964).
8. GIOVANNINI, B., M. PETER and J. R. SCHRIEFFER. *Long Range Polarisation in High Susceptibility Metals* Genève (1963).
9. BAUD-BOVY, F. et M. PETER. *Susceptibilité métallique et résonance magnétique*. Genève (1965).
10. SEITCHIK et GOSSARD. *Phys. Rev.* (1965).
11. WOHLFARTH, P. *Proc. Leeds Phil. Soc.*, 5, 89 (1948).

CHAPITRE II

ÉTUDE GRAPHIQUE RAPIDE DE LA THÉORIE



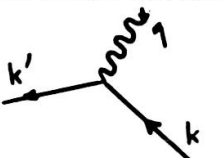
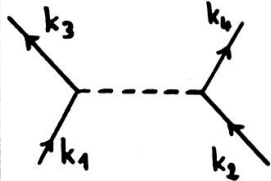
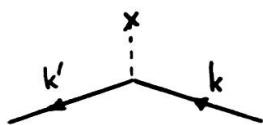

Dans ce chapitre, nous allons voir rapidement par une méthode élégante la corrélation trouvée dans le chapitre I. Les détails sont donnés dans le texte intégral de la thèse, dans le cours de Schrieffer, ou dans des ouvrages spécialisés de la théorie des champs et du problème à *N* corps. Il ne s'agit ici que d'un résumé. Nous passerons

sur la constante diélectrique et son rôle, la fonction de Lindhard (voir texte complet de la thèse); nous ne retiendrons que les résultats simples, essentiels.

Nous supposons acquis les résultats du formalisme de la seconde quantisation, des diverses représentations: représentations d'interaction, de Schrödinger, de Heisenberg et des notions sur les fonctions de Green des électrons, des phonons.

I. RÈGLES DE CALCUL GRAPHIQUE ET ÉVALUATIONS DE CERTAINS GRAPHES

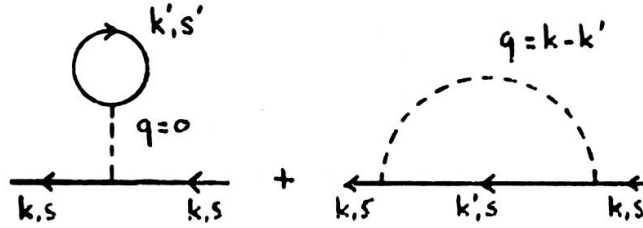
Le tableau suivant résume les règles de calcul pour les lignes électroniques, phononique, coulombienne, un potentiel et un vertex électron-phonon:

Appellation	Graphe	Facteur corresp.	$\times (-i)$	$\times (-1)$
ligne Phononique		$iD_0(q)$		
ligne Electronique		$iG_0(k)$		
Vertex Electron-Phonon		$g_{kk'\lambda}$	$(-i)$	
ligne Coulombienne		$\langle k_3 k_4 V k_1 k_2 \rangle$	$(-i)$	
Potentiel Extérieur à 1-Partic. U		$\langle k' \tilde{U} k \rangle$	$(-i)$	
ligne Electronique Fermée				(-1)

On donne maintenant dans ce qui suit des exemples d'évaluation de graphes. Auparavant, signalons qu'il ne faut pas oublier de multiplier entre eux tous les facteurs introduits par les graphes, intégrer et sommer sur toutes les variables internes (y compris la somme sur les spins).

Energie de Coulomb.

L'énergie de Coulomb peut être représentée par les deux graphes suivants:



Le premier terme représente l'interaction d'un électron libre avec la densité de charge des autres électrons libres (k', s'): c'est le premier terme du développement en série du potentiel de Hartree.

Voici comment on l'évalue:

- 2 lignes électroniques introduisant: $(ig(k))^2$,
- 1 ligne électronique fermée introduisant: $(-1)(ig(k'))$,
- 1 ligne coulombienne introduisant: $(-1)(kk' | V | kk')$.

On intègre le produit de tous ces facteurs et on somme sur les spins; on obtient ainsi:

$$\sum_{s'} \int \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} [ig_0(k)]^2 (-1) [ig_0(k')] (-i) \langle kk' | V | kk' \rangle .$$

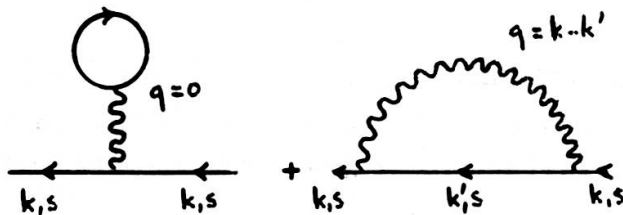
Le deuxième terme représente l'interaction d'un électron libre avec lui-même: c'est le premier terme du développement de Fock.

Il consiste en ce qui suit:

- 2 lignes électroniques donnant le facteur: $ig_0(k)^2$,
- 1 ligne électronique donnant: $ig(k')$,
- 1 ligne coulombienne donnant: $(-1)(k'k | V | kk')$.

Ceci nous donne le résultat après intégration et sommation:

$$\sum \int \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} [ig_0(k)]^2 [ig_0(k')] (-i) \langle k'k | V | kk' \rangle .$$

Interaction avec les phonons.

Le premier terme représente une translation en bloc du solide et ne présente pas d'intérêt.

Le deuxième terme représente l'émission d'un phonon par un électron, puis sa réabsorption ultérieure par le même électron.

Ce deuxième terme consiste en :

2 lignes électroniques impliquant: $(ig_0(k))^2$,

1 ligne électronique donnant: $ig(k')$,

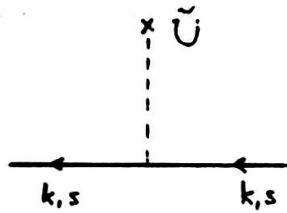
1 ligne phononique donnant: $iD_{0\lambda}(q)$; $q = k - k'$.

2 vertex él-phonon donnant le facteur: $(-i)^2 |g_{kk'\lambda}|^2$.

Ceci donne le résultat :

$$\sum \int \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} [ig_0(k)]^2 [ig_0(k')] [iD_{0\lambda}(k-k')] (-i)^2 |g_{kk'\lambda}|^2.$$

Potentiel extérieur.



On a, comme l'indique le graphe :

2 lignes électroniques donnant: $(ig_0(k))^2$,

1 potentiel extérieur U donnant: $(-i)(k | \tilde{U} | k)$.

Le résultat est :

$$\sum \int \dots [ig_0(k)]^2 (-i) \langle k | \tilde{U} | k \rangle.$$

Notons que toutes ces évaluations sont au premier ordre, et qu'à l'ordre zéro, on a :

$$ig(k) = ig_0(k).$$

La somme $ig_0(k) +$ les termes trouvés dans les trois cas précédents donnent $ig(k)$; la série diverge fortement à cause de la grande portée coulombienne.

II. LES GRAPHES IRRÉDUCTIBLES ET L'ÉQUATION DE DYSON

Définition.

On peut écrire $ig(k)$ sous la forme:

$$ig(k) = ig_0(k) + [ig_0(k)]^2 [-i \Sigma_R^I(k)]$$

forme valable à tous les ordres.

Σ_R est appelée « self-énergie réductible ».

On peut définir également une self-énergie irréductible par:

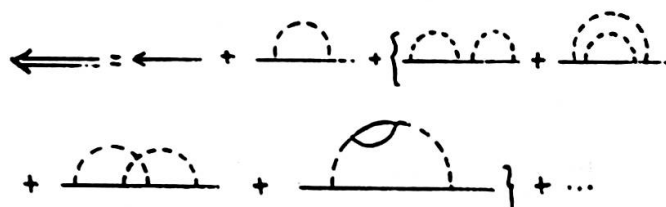
$$g(k) = g_0(k) + g_0(k) \Sigma_{irr}(k) g(k).$$

Nous verrons plus bas ce que cela veut dire.

Equation de Dyson.

Une procédure d'approximation systématique pour calculer $g(k)$ consisterait à sommer les contributions de tous les diagrammes de premier ordre. Il faut cependant observer que les propriétés analytiques telles que les pôles, le comportement asymptotique ne sont pas affectées si l'on inclut dans les calculs seulement un nombre fini de diagrammes.

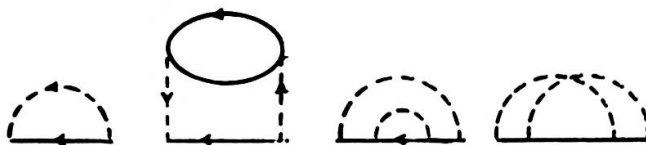
Considérons tous les diagrammes contribuant à $g(k)$:



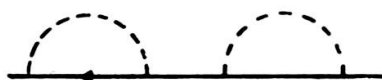
Nous allons établir une équation pour $g(k)$ en fonction d'une quantité $\Sigma_{irr}(k)$ qui est une somme sur un ensemble de diagrammes beaucoup plus simples. Excepté le diagramme d'ordre zéro, chaque diagramme peut être divisé en trois parties qu'on peut représenter schématiquement comme suit:



La partie 2 représente un sous-diagramme avec lignes d'entrée et sortie et qui ne peut être divisé en coupant une seule ligne électronique; nous en donnons des exemples:



Les diagrammes suivants ne sont pas de ce type:



Chaque diagramme de fonction de Green après l'ordre zéro est le produit de trois contributions:

$ig_0(k)$;

la contribution d'un sous-diagramme de self-énergie (propre) qu'on a déjà vu symbolisé par: $\sum(k)$

une troisième contribution qui a l'aspect d'un diagramme de fonction de Green.

Nous obtenons tous les diagrammes de fonction de Green en sommant sur tous les sous-diagrammes de self-énergie propre dans le deuxième facteur et sur tous les diagrammes de fonction de Green dans le troisième facteur et en ajoutant $ig_0(j)$ du diagramme d'ordre zéro.

On a ainsi:

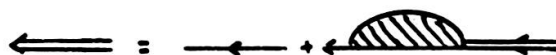
$$ig(k) = ig_0(k) + ig_0(k) \cdot \sum \text{sous-diagr. de self-énergie.} \\ \times \sum \text{diagr. de fonct. de Green}$$

soit, en supprimant i :

$$g(k) = g_0(k) + g_0(k) \sum(k) g(k).$$

C'est l'équation de Dyson.

L'équation de Dyson se représente symboliquement par:



D'où l'on tire:

$$g(k) = \frac{g_0(k)}{1 - g_0(k) \sum(k)}.$$

Le problème est alors de calculer $\sum(k)$ qui est une somme sur un nombre plus petit de diagrammes (les sous-diagrammes de self-énergie propre) que pour $g(k)$.

Nous savons que (voir texte de la thèse complète ou les ouvrages de Kittel, *Quantum Theory of Solids*, de Nozières: *The Theory of Interacting Fermi Systems*):

$$g_0(k) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(k) + i\delta_k}$$

d'où:

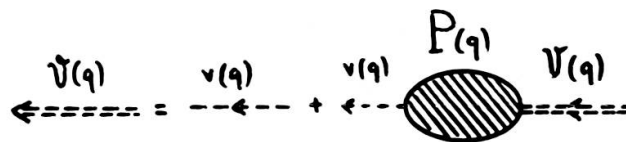
$$g(k) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(k) - \sum(k)}$$

$i\delta_k$ est omis, car $\Sigma(k)$ est en général complexe.

Ces deux expressions montrent que $\Sigma(k)$ joue le rôle d'une correction à l'énergie à 1-particule d'ordre zéro pour donner l'énergie réelle à 1-particule, d'où l'appellation « self-énergie ».

III. LIGNE D'INTERACTION ET LA CONSTANTE DIÉLECTRIQUE GÉNÉRALISÉE

Supposons que nous ayons un graphe contenant une ligne d'interaction. On peut sommer un grand sous-ensemble de tous les diagrammes si l'on somme sur tous les sous-graphes pouvant remplacer la ligne d'interaction, en gardant le reste du graphe constant. C'est ainsi que l'on peut remplacer la simple ligne d'interaction \longrightarrow par une ligne \dashrightarrow qui est une somme construite d'une façon analogue à celle de $g(k)$ à partir de $g_0(k)$ et $\Sigma(k)$, comme on l'a déjà vu :



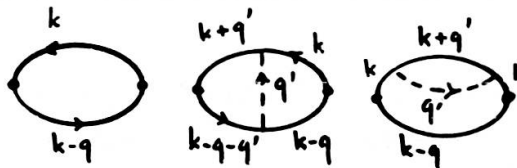
ce qui correspond dans le paragraphe précédent à :

$$g(k) = g_0(k) + g_0(k) \Sigma(k) g(k).$$

Ici $iP(q)$ est une somme sur tous les sous-graphes de polarisation propre.

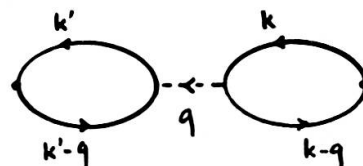
Note : Dans le cas où $v(q)$ est coulombien, on pourrait appeler ces sous-graphes par analogie avec l'électrodynamique quantique des « sous-graphes de self-énergie de photon longitudinal propre ».

Les premiers graphes seraient :



Ces diagrammes sont propres car le cercle hachuré ne peut être divisé en deux parties en coupant une seule ligne d'interaction.

Un diagramme qui en est exclu est le suivant :



On est ainsi conduit à l'équation suivante qui est analogue à l'équation de Dyson:

$$\mathcal{V}(q) = v(q) + v(q) P(q) \mathcal{V}(q)$$

avec la solution:

$$\mathcal{V}(q) = \frac{v(q)}{1 - v(q) P(q)}.$$

L'introduction de $\mathcal{V}(q)$ permet une réduction du nombre de graphes à dessiner. Et il ne faut tracer que les graphes irréductibles de polarisation et associer à chaque ligne d'interaction le facteur $-i\mathcal{V}(q)$ que l'on calcule en cherchant $P(q)$.

Comme $\mathcal{V}(q)$ est l'interaction contenant tous les effets de polarisation, la relation:

$$\mathcal{V}(q) = \frac{v(q)}{1 - v(q) P(q)}$$

suggère de définir la constante diélectrique généralisée $K(q)$ par:

$$\mathcal{V}(q) = v(q) / K(q)$$

d'où:

$$K(q) = 1 - v(q) P(q).$$

IV. APPLICATIONS

1. *Energie coulombienne*

a) *Potentiel de Hartree.*

Nous avons déjà vu que:

$$ig(k) = ig_0(k) + [ig_0(k)]^2 (-i \sum_{irr}(k)).$$

Nous avons vu en plus que le premier terme de Hartree s'écrivait:

$$\int \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} [ig_0(k)]^2 (-1) [ig_0(k')] (-i) \langle kk' | V | kk' \rangle$$

en laissant de côté la somme sur les spins.

Nous voulons calculer $-i \sum_{irr}^H(k)$. On a ainsi d'après ce qui précède:

$$-i \sum_{irr}^H(k) = 2i \int \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} \langle kk' | V | kk' \rangle [ig_0(k)].$$

Pour l'intégrale sur k_0 , on a :

$$\frac{i}{2\pi} \int g_0(k') dk'_0 = i \int \frac{e^{iko\delta}}{k'_0 - \varepsilon_{k'} + i\eta_{k'}} \cdot \frac{dk'_0}{2\pi}.$$

On a introduit le facteur $e^{iko\delta}$ ($\delta > 0$) pour lever l'ambiguïté de $g(k)$ pour $t = 0$. On définit ainsi :

$$g(k) |_{t=0} = i \langle c_k^* c_k \rangle = i \langle n_k \rangle$$

d'où :

$$i \int g_0(k') dk'_0 | 2\pi = \int \begin{matrix} -1 & \text{pour } k' < k_f \\ 0 & \text{pour } k' > k_f \end{matrix}$$

et l'on a :

$$-i \sum_{irr}^H = -2i \int_{k' < k_f} \langle kk' | V | kk' \rangle \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3}.$$

b) *Potentiel de Fock.*

On trouve par le même procédé pour l'énergie d'échange :

$$-i \sum_{irr}^F = i \int \langle kk' | V | k' k \rangle \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3}.$$

2. Interaction avec les phonons

De la même façon, on a :

$$\begin{aligned} -i \sum_{irr}^{Phon}(k) &= \sum_{\lambda} \int g_0(k') D_{0\lambda}(k-k') |g_{kk'\lambda}|^2 \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} \\ &= \sum_{\lambda} \int \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} \cdot \frac{1}{k'_0 - \varepsilon_{k'} + i\eta_{k'}} \left\{ \frac{2\Omega_{q\lambda}}{q_0^2 - \Omega_{q\lambda}^2 + i\eta} \right\} |g_{kk'\lambda}|^2 \end{aligned}$$

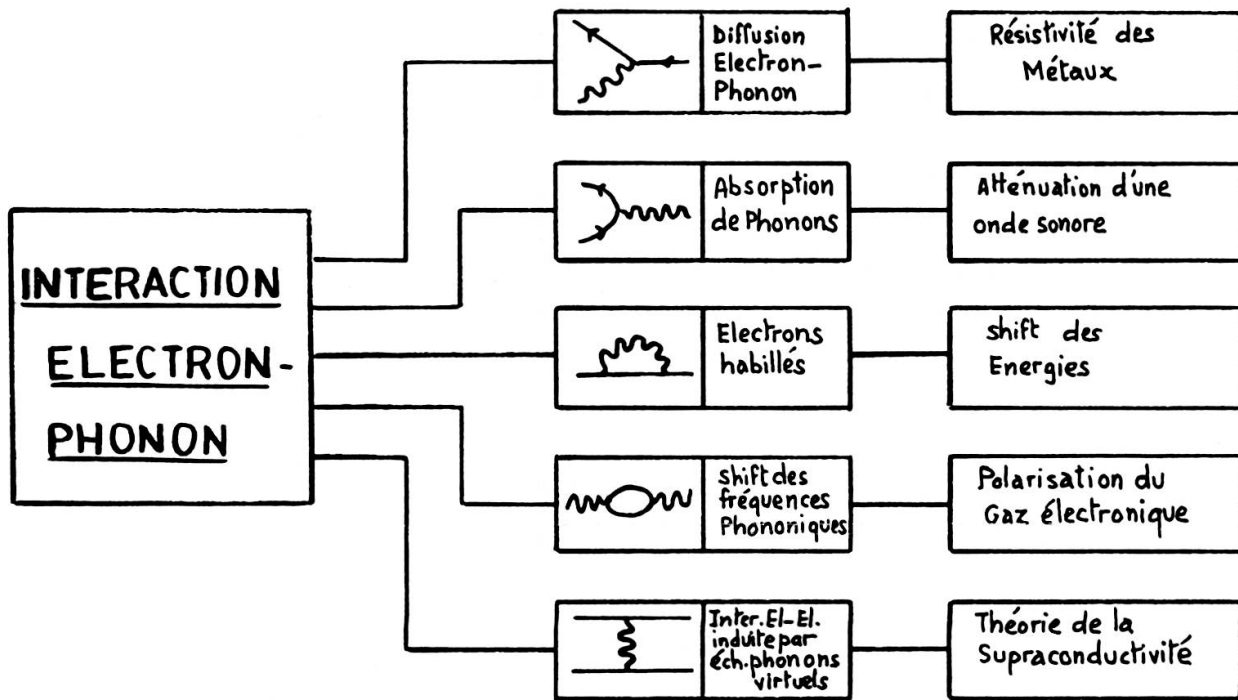
avec $q = k - k'$ et $q_0 = k_0 - k'_0$; ceci d'après la fonction de Green des phonons définie par (voir texte complet de la thèse :

$$D_0(q) = \frac{2\Omega_{q\lambda}}{q_0^2 - \Omega_{q\lambda}^2 + i\eta}$$

$-i \sum_{irr}^{Ph}(k)$ peut encore s'écrire :

$$-i \sum_{irr}^{Ph} = \sum_{\lambda} \int \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} \cdot \frac{|g_{kk'\lambda}|^2}{k'_0 - \varepsilon_{k'} + i\eta_{k'}} \left\{ \frac{1}{k_0^i - k_0 - \Omega_{q\lambda} + i\eta} - \frac{1}{k_0^i - k_0 + \Omega_{q\lambda} - i\eta} \right\}$$

On peut effectuer maintenant sans difficulté les calculs pour $k' > k_f$ et $k' < k_f$.



CONSEQUENCES DE L'INTERACTION EL-PH.

V. INTERACTION ÉLECTRON-PHONON PAR LES GRAPHES

i) Règles de calcul.

Une ligne phononique est représentée par:

Les lignes phononiques, comme les lignes d'interaction coulombienne, n'ont pas besoin d'être orientées car $D(-q) = D(q)$; mais on y met l'orientation pour raison de commodité;

Chaque ligne phononique introduit un facteur $iD_0(q)$ comme on l'a déjà vu dans le tableau des règles de calcul des graphes.

Chaque vertex avec une ligne phononique introduit un facteur $-ig_{kk'\lambda}$.

ii) Fréquence phononique renormalisée et vitesse du son.

L'énergie propre des électrons était définie par:

$$g(k) = g_0(k) + g_0(k) \sum_{irr} (k) g(k)$$

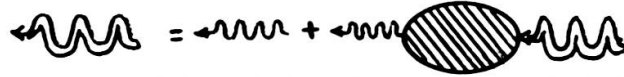
représentée symboliquement par:

$$\overleftrightarrow{\quad} = \overleftrightarrow{\quad} + \overleftrightarrow{\quad} \text{ (with a shaded loop) }$$

De la même façon, on peut définir l'énergie propre des phonons par:

$$D_{\lambda}(q) = D_{0\lambda}(q) + D_{0\lambda}(q) \Pi_{\lambda irr}(q) D_{\lambda}(q)$$

qu'on représente symboliquement par:



Π , comme précédemment, est donné par tous les diagrammes irréductibles, c'est-à-dire qu'on ne peut diviser en deux parties en coupant une seule ligne phononique.

On considère la suite des graphes en *RPA* (approximation des phases aléatoires):

$$\Pi_{\lambda}^{RPA}(q) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots$$

The first diagram is a loop with two vertices. The top vertex has an incoming line labeled $k+q$ and an outgoing line labeled q . The bottom vertex has an incoming line labeled q and an outgoing line labeled k . The second diagram is a chain of two loops connected by a dashed line.

où g est le couplage électron-phonon; on a:

$$\frac{\Pi_{\lambda}(q)}{|g_q|^2} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots$$

The first diagram is a single loop. The second diagram is a chain of two loops connected by a dashed line.

et:

$$\mathcal{V}(q) = v(q) + \frac{\Pi_{\lambda}(q)}{|g_q|^2} v^2(q) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots$$

The first diagram is a dashed line with arrows at both ends. The second diagram is a dashed line with arrows at both ends connected to a loop, which is then connected to another dashed line with arrows at both ends.

D'où:

$$\Pi_{\lambda}(q) = \frac{|g_q|^2}{v_q^2} [\mathcal{V}(q) - v_q] = \frac{|g_q|^2}{v_q} \left[\frac{1}{K_q^{RPA}} - 1 \right].$$

Maintenant, d'après l'équation que nous avons déjà vue:

$$D_{\lambda}(q) = D_{0\lambda}(q) + D_{0\lambda}(q) \Pi_{\lambda irr}(q) D_{\lambda}(q)$$

on tire:

$$D_{0\lambda}(q) = D_{\lambda}(q) - D_{0\lambda}(q) \Pi_{\lambda}(q) D_{\lambda}(q)$$

soit, en divisant par $D_{0\lambda}(q) D_{\lambda}(q)$:

$$\frac{1}{D_{\lambda}(q)} = \frac{1}{D_{0\lambda}(q)} - \Pi_{\lambda}(q).$$

Or nous avons déjà vu que la fonction de Green des phonons était donnée par :

$$D_0(q) = \frac{2\Omega_\lambda(q)}{q_o^2 - \Omega_{q\lambda}^2 + i\delta}$$

ce qui entraîne :

$$D_\lambda^{-1}(q) = \frac{q_o^2 - \Omega_\lambda^2(q) - 2\Pi_\lambda(q)\Omega_\lambda(q)}{2\Omega_\lambda(q)}.$$

Dans le modèle du jellium (les ions y formant un plasma positif avec un fond de charge négative uniforme des électrons qui y sont libres) on sait que (voir texte complet de la thèse) :

$$2|g_q|^2 = \Omega_p v_q$$

où Ω_p est la fréquence de plasma.

Maintenant, en portant l'expression de Π dans celle de $D^{-1}(q)$, on obtient :

$$D_\lambda^{-1}(q) = \frac{q_o^2 - \Omega_p^2 |K(q)|}{2\Omega_p}.$$

Le phonon renormalisé de vecteur d'onde q a la fréquence $\omega(q)$ donnée par le pôle de $D(q, \omega)$, soit :

$$q_a^2 - \frac{\Omega_p^2}{K(q)} = 0, \quad q_o \text{ ou } \omega.$$

Mais nous avons déjà vu que :

$$\Omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 N}{M} \quad \text{et} \quad \frac{1}{K(q)} = \frac{q^2}{q^2 + \frac{6\pi N e^2}{\epsilon_f}}$$

ce qui donne :

$$\lim_{q \rightarrow 0} \omega^2(q) = \frac{2}{3} M \epsilon_f q^2 = \frac{m}{3M} v_f^2 q^2 = (v_s q^2),$$

résultat déjà obtenu.

En général, v_f (vitesse de Fermi est de l'ordre de 10^8 cms^{-1} et $(m/M)^{1/2} = 10^{-2}$ à 10^{-3} ; il en découle que :

$$v_s = \text{vitesse du son} = 10^5 \text{ à } 10^6 \text{ cms}^{-1}.$$

(ce que confirmera l'expérience)

VI. RÉPONSE A UN CHAMP MAGNÉTIQUE EXTÉRIEUR [2] FONCTION DE SUSCEPTIBILITÉ

Soit un champ magnétique orienté suivant l'axe-z qu'on désignera par $H_z(rt)$. La magnétisation pour un système isotrope, homogène, sera $M_z(rt)$. Nous allons établir que cette magnétisation est de la forme suivante:

$$M_z(rt) = \int \chi(r-r', t-t') H_z(r' t') d^3 r' dt' .$$

En effet, on sait que:

$$M_z(rt) = -\beta(\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}) = \beta \Delta \rho$$

$\Delta \rho$ = différence des densités de spin (*up* et *down*).

Le hamiltonien du système peut s'écrire:

$$\mathcal{H}_M = \beta \int \Delta \rho H(rt) d^3 r ,$$

β = magnéton de Bohr.

En représentation d'interaction, on peut écrire:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\int_{-\infty}^{-t} \mathcal{H}_M(t') dt'} |0\rangle ,$$

$|0\rangle$ est l'état fondamental et où:

$$\mathcal{H}_M(t') = e^{i\mathcal{H}_0 t'} \mathcal{H}_M e^{-i\mathcal{H}_0 t'}$$

La valeur d'expectation pour $M_z(rt)$ peut s'écrire:

$$M_z(rt) = \langle \psi(rt) | \Delta \rho | \psi(rt) \rangle (-\beta)$$

ou:

$$M_z(qt) = \langle \psi(t) | \Delta \rho(q, t) | \psi(t) \rangle (-\beta) .$$

Or on a:

$$e^{-i\int_{-\infty}^t \dots} |0\rangle \cong (1 - i \int_{-\infty}^t \mathcal{H}_M(t') dt' |0\rangle)$$

d'où:

$$\begin{aligned} & \langle 0 | (1 + i \int \dots) M (1 - i \int \dots) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | M_0 \rangle + \int dt' \langle 0 | [\mathcal{H}_M(t'), M] | 0 \rangle \\ &= 0 + \int dt' \langle 0 | [\mathcal{H}_M(t'), M] | 0 \rangle . \end{aligned}$$

Ceci entraîne:

$$M_z(qt) = -i\beta \int_{-\infty}^t \langle 0 | \mathcal{H}_M(t'), \Delta \rho(qt) | 0 \rangle dt' .$$

Avec:

$$\mathcal{H}_M(t) = \beta \sum_q \{ \rho_{\downarrow}(-qt) - \rho_{\uparrow}(-qt) \} H(qt) .$$

on a:

$$M_z(qt) = -i\beta^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{q'} < 0 | [\Delta\rho(-q't'), \Delta\rho(qt)] | 0 > H(q't') dt' \delta(t-t') .$$

L'invariance de translation ($q = q'$) entraîne:

$$\chi(qr) = i\beta^2 < 0 | [\Delta\rho(qr), \Delta\rho(-q_0)] | 0 > \delta(\tau)$$

avec: $\tau = t - t'$.

Nous savons que:

$$\rho_{\uparrow}(qt) = \sum_k c_{k-q\uparrow}^+(t) c_{k\uparrow}(t) , \text{ (voir [2], [5])}$$

ce qui fait que:

$$\begin{aligned} \chi_0(qr) = \sum_{kp} 2i\beta^2 < 0 | c_{k-q\uparrow}^+(t) c_{k\uparrow}(t) c_{p+q\uparrow}^+(0) c_{p\uparrow}(0) \\ - c_{p+q\uparrow}^+(0) c_{p\uparrow}(0) c_{k-q\uparrow}^+(t) c_{k\uparrow}(t) | 0 > \delta(\tau) . \end{aligned}$$

Si $q \neq 0$, les seuls termes différents de zéro ont lieu pour $p + q = k$, d'où:

$$\begin{aligned} \chi_0(q\tau) &= \sum_k 2i\beta^2 e^{i\varepsilon k - q\tau - i\varepsilon k\tau} \{ < 0 | c_{k-q\uparrow}^+ c_{k\uparrow} c_{k\uparrow}^+ c_{k-q\uparrow} | 0 > \\ &\quad - < 0 | c_{k\uparrow}^+ c_{k-q\uparrow} c_{k-q}^+ c_{k\uparrow} | 0 > \} \delta(\tau) \\ &= 2i\beta^2 \sum_k e^{i\varepsilon k - q\tau - i\varepsilon k\tau} \{ f(k-q) [1 - f(k)] - f(k) [1 - f(k-q)] \} \delta(\tau) \end{aligned}$$

f = fonction de Fermi.

Ou encore:

$$\chi_0(q\tau) = 2i\beta^2 \sum_k e^{i(\varepsilon k - q - \varepsilon k)\tau} \{ f(k-q) - f(k) \} \delta(\tau) .$$

Il s'ensuit que (voir cours de Schrieffer):

$$\chi(qq_0) = -2\beta^2 \sum_k \frac{f(k-q) - f(k)}{q_0 + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k + i\delta} .$$

Pour $q_0 = 0$, la transformée de Fourier est:

$$\chi(r_0) = \chi_p \frac{2kf^3}{4\pi} \cdot \frac{\sin x - x \cos x}{x^4}$$

où: $\chi_p = 2\beta^2 N(0)$; $N(0)$ est la densité d'états à la surface de Fermi.

On définit comme pour la fonction $K(q)$:

$$\chi^T(q\tau) = i\beta^2 < T [\Delta_\rho(q\tau)] [\Delta_\rho(q_0)] >$$

et l'on démontre que:

$$\text{Re} \chi(qq_0) = \text{Re} \chi^T(qq_0)$$

$$\text{Im} \chi(qq_0) = \text{Im} \chi^T(qq_0) \text{ sign } q_0.$$

On montre que cette fonction χ^T est donnée par la somme des diagrammes du type:



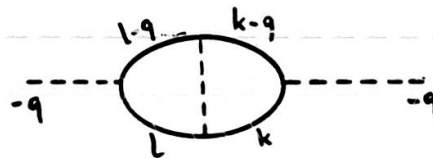
où — — — — est le champ magnétique et n'entre pas dans les calculs et le cercle hachuré est le diagramme que l'on ne peut séparer en deux parties en coupant une seule ligne.

Notons que le champ magnétique ne provoque pas de déplacement de charge; ainsi, $\rho^\uparrow + \rho_\downarrow$ reste constant, seul $\rho^\uparrow - \rho_\downarrow$ change.

Signalons que dans le calcul des graphes, il rentre ici le facteur $2i\beta^2$. A l'ordre zéro, on a:

$$\text{Diagram} = 2i\beta^2 \int g_0(k) g_0(k-q) \frac{(2\pi)^4}{d^4 k} (i)^2 (-1) = \beta^2 P^{RPA}(q)$$

où $P^{RPA}(q)$ est la polarisabilité irréductible dans l'approximation RPA . Au premier ordre, on a:



= premier ordre de l'approximation de Hartree-Fock.


Par itération, on a:

$$\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \dots = \frac{1}{2i\beta^2} \chi_{HF}(qq_0)$$

où χ_{HF} est la susceptibilité dans l'approximation de Hartree-Fock; il y est tenu compte des effets d'échange.

Le calcul de cette série implique la résolution de l'équation intégrale de la matrice t que l'on écrit symboliquement comme suit:

La chose consistait à faire ceci:

on réobtient la même série en ajoutant  dans tous les graphes, c'est-à-dire-

ce qui justifie ce que nous avons posé, soit:

Disons que cette matrice t décrit la diffusion multiple d'un électron et d'un trou.

On peut améliorer l'approximation de Hartree-Fock en remplaçant $v(q)$ par $\mathcal{V}(q)$ le potentiel effectif de portée plus courte que le potentiel coulombien.

On fait l'hypothèse $\mathcal{V}(q) = \bar{v} = \text{constante}$ et l'on résout l'équation intégrale:

$$t_{pk}^q = \bar{v} + \bar{v} \int ig_0(l+q) g_0(l) t_{pl}^q \frac{d^4 l}{(2\pi)^4}.$$

On peut sortir t_{pl}^q car le terme sous l'intégrale ne dépend pas de k ; d'où:

$$t_l^q = \bar{v} + \bar{v} t_l^q \int ig_0(l+q) g_0(l) \frac{d^4 l}{(2\pi)^4} = \bar{v} + \bar{v} t_l^q P(q)$$

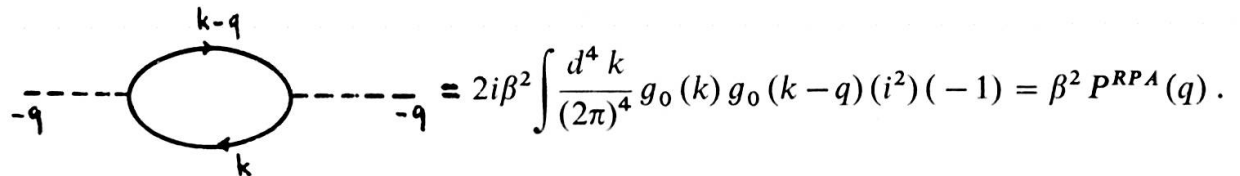
ou encore:

$$t_l^q = t^q = \frac{\bar{v}}{1 - \bar{v}P(q)}.$$

Il vient alors:

$$\chi_{HF}(q) = 2\beta^2 \left[P(q) + \frac{P^2(q) \bar{v}}{1 - \bar{v}P(q)} \right] = 2\beta^2 \frac{P(q)}{1 - \bar{v}P(q)}.$$

A l'ordre zéro, on a seulement (déjà vu):



$$= 2i\beta^2 \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} g_0(k) g_0(k-q) (i^2) (-1) = \beta^2 P^{RPA}(q).$$

Ce qui fait que:

$$\chi_{HF}(q) = \frac{\beta^2 P^{RPA}(q)}{1 - \bar{v} \frac{P^{RPN}(q)}{2}} = \frac{\chi_{RKY}(q)}{1 - \bar{v} \frac{P^{RPA}(q)}{2}}$$

où $\chi_{RKY}^{(q)} = \chi(q)$ Ruderman-Kittel-Yosida.

On a:

$$\chi_{HF}(q) = 2\beta^2 N(0) U\left(\frac{q}{2f}\right)$$

pour $q_0 = 0$.

$U(x)$ est donné dans le chapitre I.

Si $q = 0$, on obtient:

$$\chi(0) = \frac{2\beta^2 N(0)}{1 - \bar{v}N(0)} = \frac{X_p}{1 - \bar{v}N(0)},$$

correspondant au résultat de la page 231.

χ^P est la susceptibilité de Pauli. On a en général: $0 < 1 - \bar{V}N(0) < 1$, ce qui fait que l'échange augmente la susceptibilité.

On peut dire qu'en présence d'un champ H , quelques électrons de la bande à spin négatif sont transportés dans la bande à spin positif. En tenant compte de l'énergie d'échange, l'énergie nécessaire pour cette opération est petite.

Ceci explique le maximum de susceptibilité observé pour les alliages de *Rh-Pd-Ag*.

RÉFÉRENCES

1. SCHULTZ, T. D. *Quantum Field Theory and the Many-Body-Problem*. Gordon & Breach, Science Publishers, New York (1964).
2. SCHRIEFFER, J. R. *Les propriétés des métaux aux basses températures*. Cours donné à l'Institut de Physique de Genève.
3. GOLDSTONE, J. *Proc. Roy. Soc. (London)*, A 239, 268 (1957).
4. ABRIKOSOV, GORKOV and DZIALOSHINSKI. *Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Prentice Hall, New Jersey.
5. KITTEL, C. *Quantum Theory of Solids*. J. Wiley, NY (1963); « Many-Body Techniques and the Electron Gas.
6. PINES, D. *Elementary Excitations in Solids*. Benjamin, NY (1963).
7. WOLFF, P. A. Spin Susceptibility of an Electron Gas. *Phys. Rev.*, 120, 814 (1960).
8. RUDERMAN, M. A. and C. KITTEL. *Phys. Rev.*, 96, 99 (1954).
9. K. YOSIDA: *Phys. Rev.* 106, 896 (1957);
10. GIOVANNINI, B., M. PETER and J. R. SCHRIEFFER. Long Range Polarisation in High Susceptibility Metals. *Phys. Rev. Letters*, 12, 736 (1964).

CHAPITRE III

PARTIE EXPÉRIMENTALE:
MESURES ET ESSAIS D'INTERPRÉTATION

I. DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL

La technique utilisée ici est une technique d'impulsions et l'on a pris la méthode de mesure directe, c'est-à-dire dans laquelle on mesure avec précision les longueurs des échantillons et les temps de parcours des impulsions. Voici brièvement en quoi consiste la méthode d'impulsions:

production d'une impulsion électrique de fréquences et de longueur désirées;
conversion de l'énergie électrique en énergie ultra-sonore grâce à un piézo-quartz;

transmission des impulsions ultra-sonores à travers des liaisons généralement organiques dans l'échantillon de métal à étudier;

conversion de l'énergie ultra-sonore en énergie électrique grâce au piézoquartz récepteur;

enfin, mesure précise des intensités relatives et des intervalles de temps de parcours.

On envoie des impulsions de très courte durée à travers le milieu à étudier sur une distance de longueur connue avec précision et on mesure le temps de parcours de ces impulsions; on peut distinguer deux cas:

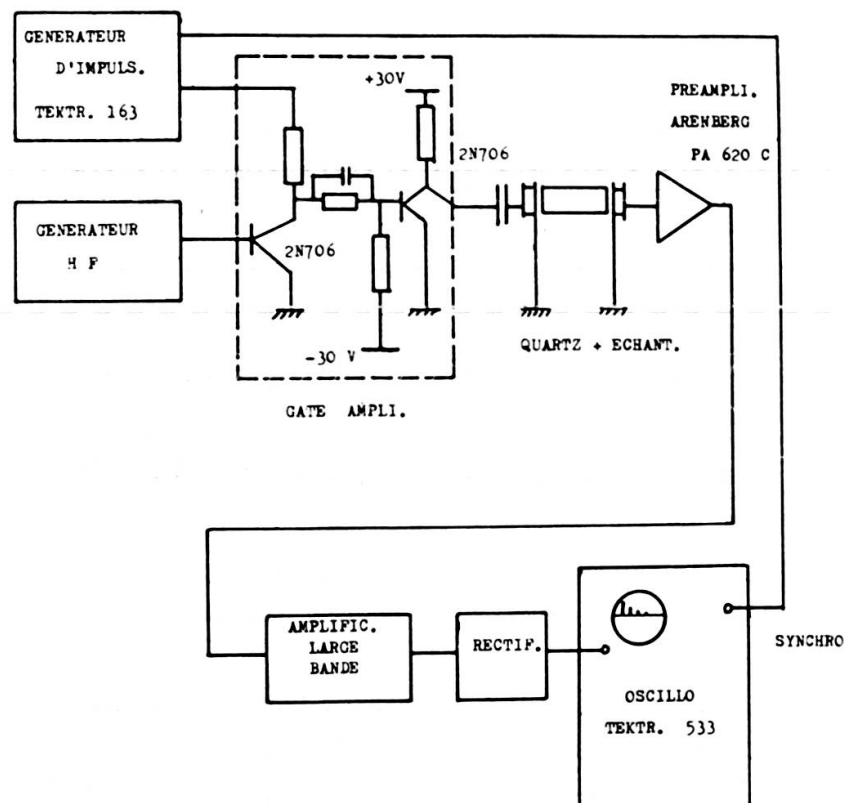
- l'impulsion sonore parcourt la distance une seule fois et donne au commencement et à la fin du parcours un signal;
- l'impulsion sonore fait un va-et-vient; elle est réfléchiée et on obtient ainsi des échos.

Nous avons utilisé deux dispositifs; le premier n'a pu nous donner la précision requise; nous les décrivons cependant tous les deux brièvement, le deuxième appareillage n'étant qu'une variante du premier avec certaines améliorations.

1° Première méthode :

Elle consiste en un générateur d'impulsions Tektronix type 163 dont les caractéristiques sont les suivantes:

Durée d'impulsion ajustable de moins de $1 \mu\text{/sec}$ à $10.000 \mu\text{/sec}$; les temps de montée et de descente (sans charge) sont: $t_t = 0,2 \mu\text{/sec}$ et $t_f = 0,2$ à $0,5 \mu\text{/sec}$.



BLOC SCHEMA 2

L'amplitude est de 25 volts, variable de 0 à 25; les impédances de sortie sont: gate = 100, impulsion = 500 (variant avec le contrôle d'amplitude); la résistance de charge minimum est de 3,5 k.

Un amplificateur « gate » comporte deux transistors 2N706, un générateur *HF* Hewlett-Packard modèle 606A de fréquence réglable de 50 kc/s à 65 Mc/s, ensuite vient l'échantillon avec deux cristaux de quartz (émetteur et récepteur); le signal passe dans un préamplificateur Arenberg type PA620C, un amplificateur à large bande Arenberg type 368, un redresseur et un oscilloscope Tektronix 533.

La mesure des temps de parcours se faisait sur l'échelle graduée même de l'oscilloscope. La précision est de l'ordre du 1%; on observe des échos, mais il est très difficile de localiser exactement le début des échos.

La page qui suit schématise ce dispositif.

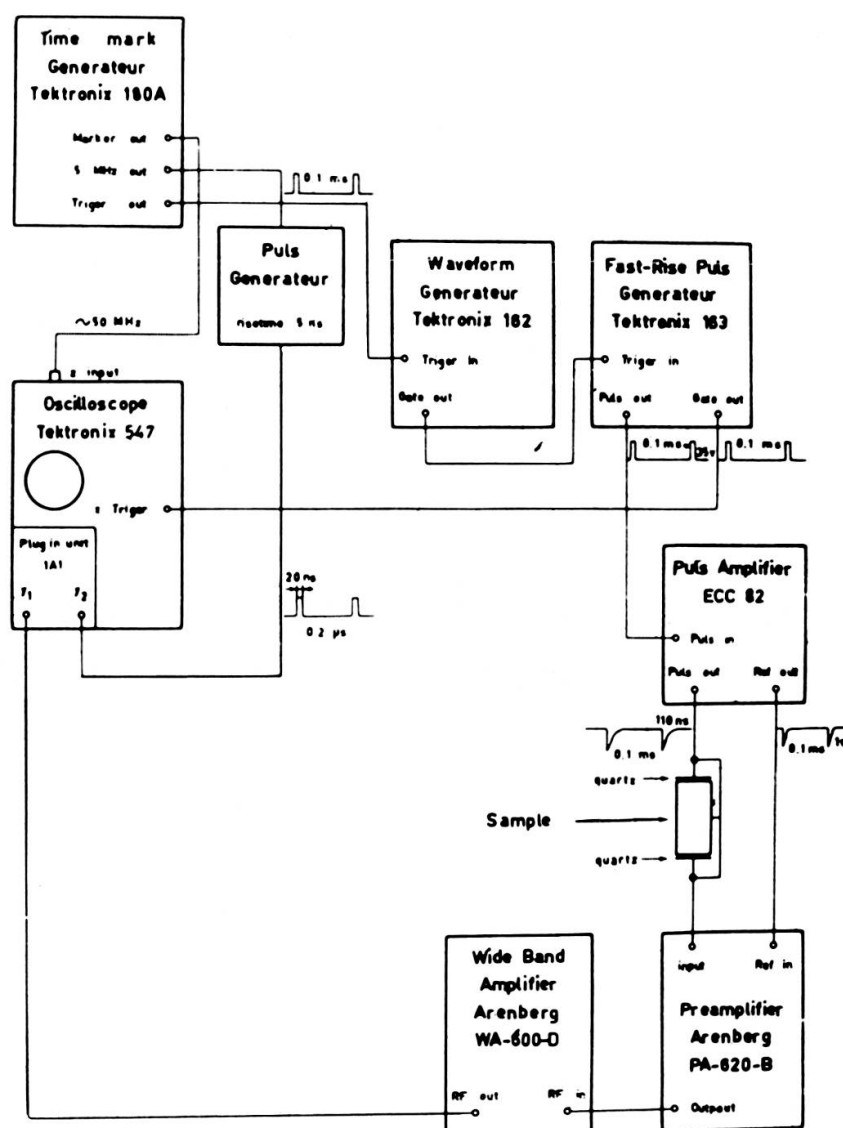
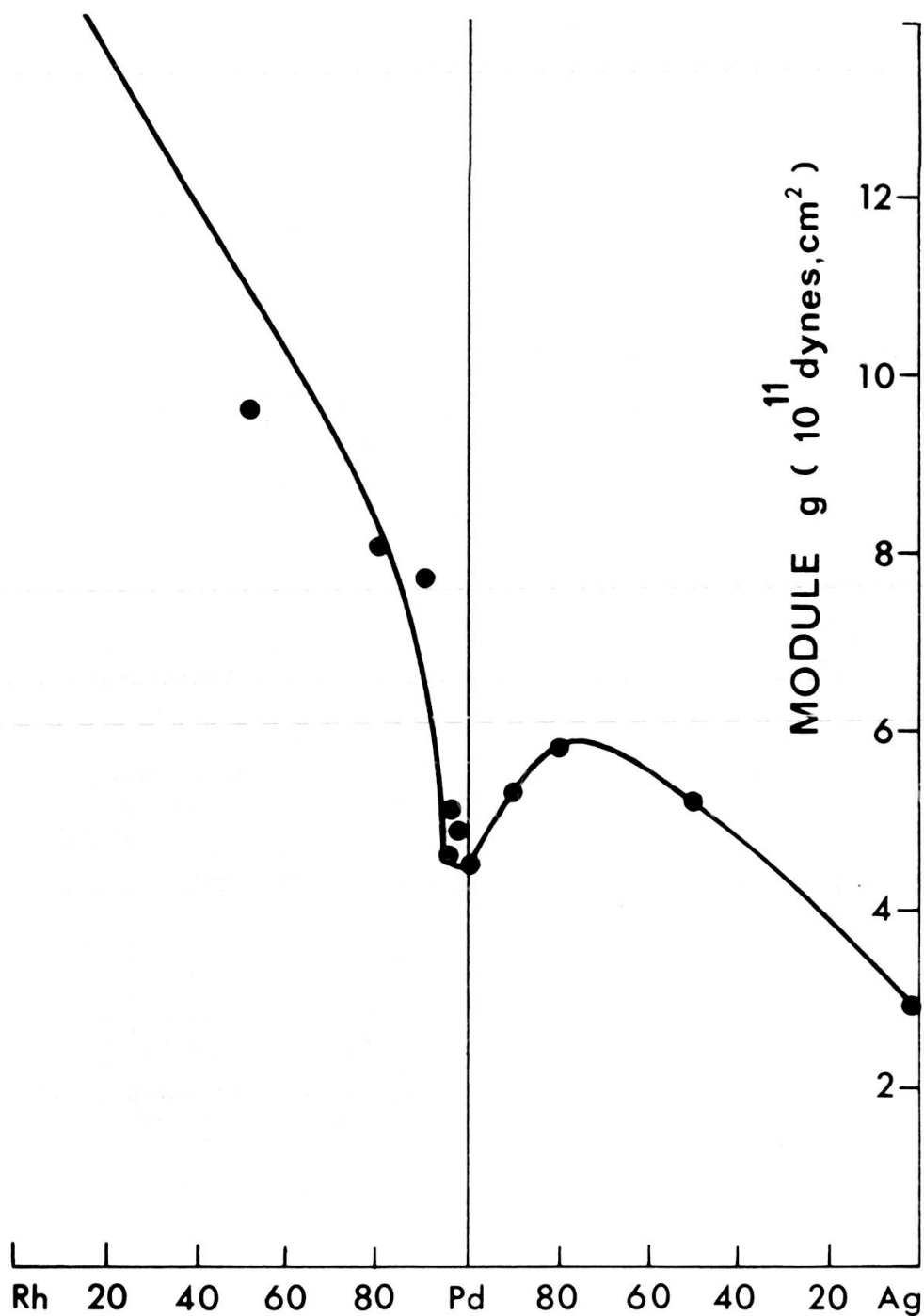


Fig. 3 Block diagram

2° Deuxième méthode :

Le dispositif reste en gros le même, mais il y a eu des modifications qui ont été décisives pour la mesure et les résultats obtenus. On a introduit ici un amplificateur d'impulsions à tubes ECC82 dont le schéma est donné ci-après (la HF est supprimée ici). Pour la mesure elle-même, on introduit une horloge « Time Mark Generator » Tektronix type 180A qui envoie 5 Mc/s sur un formeur d'impulsions à transistors 2N310 donnant des impulsions à 200 ns permettant ainsi des mesures très précises. Le schéma en est donné à la page 251.



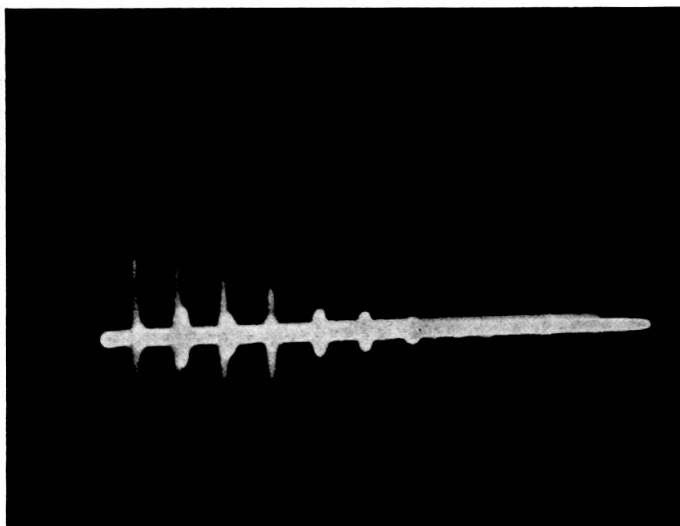
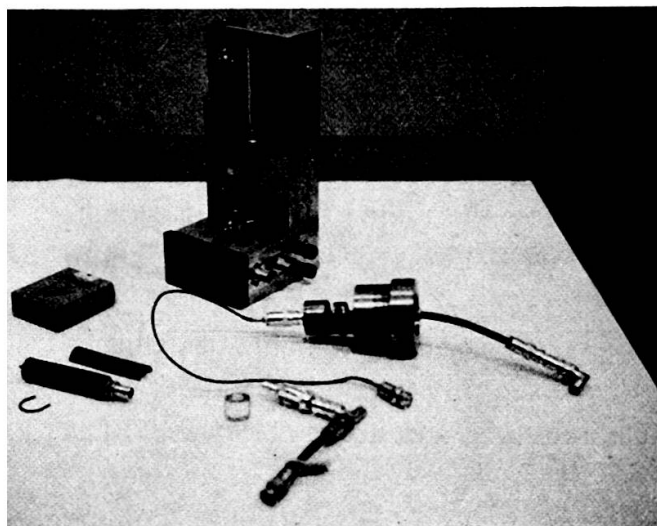
Les préamplificateur et amplificateur à large bande Arenberg restent les mêmes. On a introduit un nouvel oscilloscope Tektronix 547. Le schéma est donné dans la page 251.

II. JOINTS ADHÉSIFS. ECHANTILLONS. SUPPORTS

La méthode pour fixer un joint est de chauffer le cristal de quartz et l'échantillon à la température de fusion du joint si ce dernier est solide. Une pression suffisante est appliquée uniformément sur le cristal de sorte que les bulles d'air sont chassées et le liquide en excès repoussé du centre. On utilise comme substance adhésive très souvent:

- la glycérine, le polyisobutylène liquide,
- le poly- α -méthyl styrène,
- Nonaq stop-cock grease,
- le salol (salicylsäure phenylester) qui est solide; sa température de fusion est de 45°C ; il est soluble dans le benzène; il peut servir pour les mesures à température ambiante;
- EPA qui est un mélange de cinq parties d'éther, cinq d'isopentane et deux d'alcool éthylique; il peut être utilisé de 100°K à $4,2^{\circ}\text{K}$.

Signalons que la surface du cristal de quartz doit être quelque peu plus petite que celle de l'échantillon pour éviter les ondes de surface. Elle ne doit couvrir environ que les deux tiers de la surface de l'échantillon.



Signalons pour ce qui est des quartz, qu'ils ont été préparés par la Fabrique fédérale d'Armes (Berne).

Les échantillons utilisés ont été préparés par la firme « Métaux précieux, Neuchâtel » avec une pureté de 99,99 % sous forme de petits barreaux cylindriques

d'environ 2 cm de long et 1 cm de diamètre. Les surfaces des échantillons doivent être extrêmement plates à un quart de longueur d'onde optique et le parallélisme des surfaces à 10 secondes d'arc au plus. Ce travail de parallélisme et de polissage à la poudre de diamant a été exécuté à l'atelier de l'Institut de Physique.

Une vue d'ensemble des divers supports adoptés successivement au cours de l'expérimentation est donnée par l'image p. 253. Je donne également une image d'échos obtenus.

III. RÉSULTATS DE MESURES

A. VITESSES LONGITUDINALES

1° Mesures à 300 K et 70 K.

Les mesures des temps de parcours ont été faites plusieurs dizaines de fois, et on a pris même le soin de les faire par divers observateurs. Les longueurs des échantillons ont été mesurées au micron; les échantillons étaient nettoyés à l'acétone pour chaque nouvelle opération. Divers support-échantillons ont été essayés; dans chaque mesure, la même orientation était donnée aux disques de quartz (orientation faite aux rayons X), la même pression d'électrodes arrondies (nous avons en effet essayé plusieurs formes d'électrodes: les meilleurs signaux étaient obtenus pour la forme adoptée) sur les quartz de sorte qu'il ne subsiste plus d'incertitude, plus de déphasage entre les fronts d'impulsions. La précision sur la valeur de la vitesse mesurée était de l'ordre de 1% ou mieux. Le signal sur bruit était aussi noté: il variait entre 30 et 10; dans le pire des cas, il valait 8. On notait également le nombre d'échos par échantillon. On a obtenu jusqu'à 10 et même 14 échos.

Le tableau qui suit donne les résultats des mesures de la vitesse longitudinale à la température ambiante et à la température de l'azote liquide de même que la différence Δ en m/s. A noter déjà que cette variation thermique de la vitesse longitudinale diminue appréciablement dans la zone de l'anomalie et à sa plus petite valeur pour l'alliage *Pd-Rh 95/5*.

Il apparaît ainsi des anomalies dans la vitesse du son longitudinale des alliages polycristallins de *Pd-Rh* et *Pd-Ag*. Les figures qui suivent présentent la vitesse longitudinale v_l à 300° K et à 70° K avec une anomalie autour de *Pd-Rh 95/5*. Les abscisses donnent la masse atomique moyenne M .

Ces anomalies peuvent être reliées au maximum de la susceptibilité (comme nous l'avons vu théoriquement) pour *Pd-Rh 95/5*, ou à la courbe du coefficient γ de la chaleur spécifique électronique.

De cette corrélation on peut estimer le degré avec lequel les électrons d dans les alliages du *Pd* peuvent blinder les forces électrostatiques entre les ions du réseau métallique.

Pour pouvoir interpréter cette corrélation, nous considérons d'abord la compressibilité α_j dans le cas des cores d'ions positifs plongés dans un milieu d'électrons itinérants (modèle du jellium). Elle peut s'écrire:

$$\alpha_j = \frac{\beta^2 Z^2 n^2}{\chi}$$

β = magnéton de Bohr,

n = nombre d'atomes par cm^3 ,

z = le nombre d'électrons par atome,

χ = la susceptibilité paramagnétique.

Dans le cas des métaux alcalins, les valeurs observées de la compressibilité sont en bon accord avec celles prédites par ce modèle.

ECHANT.	300° K	70° K	Δ
Ag	3672	3759	87
Pd-Ag 50/50	4213	4296	83
Pd-Ag 80/20	4501	4584	83
Pd-Ag 90/10	4451	4516	65
Pd-Ag 95/ 5	4583	4632	49
Pd	4574	4614	40
Pd-Rh 99/ 1	4566	4611	45
Pd-Rh 97/ 3	4585	4639	54
Pd-Rh 96/4	4564	4608	44
Pd-Rh 95.5/4.5	4584	4634	50
Pd-Rh 95/ 5	4606	4643	37
Pd-Rh 92/ 8	4658	4713	55
Pd-Rh 90/10	4634	4690	56
Pd-Rh 85/15	4744	4785	41
Pd-Rh 80/20	4755	4815	60
Pd-Rh 50/50	5215	5298	83
Rh	5990	6086	96

Dans le cas des alliages de *Pd* où la susceptibilité est accrue par des effets de structure de bande et d'échange, le modèle prédirait une grande réduction et une dépendance de la température bien marquée de la compressibilité et par suite de la vitesse du son.

Nos mesures nous permettent de dire que la compressibilité dans nos alliages est la somme d'un terme α_n variant lentement avec la masse atomique moyenne et normalement avec la température et une autre contribution α_j due aux électrons *d*.

La vitesse longitudinale du son est donnée par:

$$\bar{v}_l = (\alpha/\rho)^{1/2}.$$

ρ = densité.

$$\text{On pose: } \alpha = \alpha_j + \alpha_n \quad \text{avec: } \alpha_n = \rho v_l^2$$

et, comme:

$$\alpha_j \ll \alpha_n$$

on obtient:

$$v_l \simeq v_1 + \frac{Z^2 \beta^2 A^2}{2v_1 M^2 \chi_{mass}}$$

où *A* est le nombre d'Avogadro.

Dans la figure 1, la courbe *A* représente les valeurs mesurées de v_l à 70° K et la courbe *B* représente celles à 300° K.

La courbe *F* de la figure 2 donne les valeurs mesurées de V_1 (70° K) — V_1 (300° K). Notons que la dispersion des points expérimentaux des courbes *A* et *B* est due à la structure microcristalline et probablement aussi aux différences dans le traitement thermique des divers échantillons.

On voit quand même que l'anomalie dans la variation thermique de la vitesse longitudinale est reliée à la forte anomalie de la susceptibilité des alliages de palladium comme le donnent Hoare et collaborateurs.

Dans la figure 2, les courbes *H* et *I* donnent respectivement la susceptibilité corrigée à 70° K et 300° K. Les corrections ont été faites en soustrayant la partie orbitale et la partie diamagnétique de la susceptibilité des valeurs mesurées par Budworth, Hoare et les autres [1]. Notons que ces parties ont été estimées en utilisant la discussion d'un article de Seitchik et Gossard [2] sur la susceptibilité du palladium.

Les courbes *C* et *D* de la figure 1 donnent les valeurs de V_1 (70° K) et V_1 (300° K) qu'on obtient en utilisant des valeurs de V_1 des courbes *A* et *B*, les valeurs χ_{corr} données par les courbes *H* et *I* et les valeurs de *Z* données par la courbe *E* et l'expression déjà vue:

$$v_l \simeq v_1 + \frac{Z^2 \beta^2 A^2}{2v_1 M^2 \chi_{mass}}.$$

Avec ces valeurs de Z , nous obtenons une dépendance linéaire de V_1 de M , la masse atomique moyenne dans l'intervalle allant de $Pd-Ag$ 50/50 au Rh , et l'anomalie de V_1 peut être attribuée à α_j , c'est-à-dire à la contribution résultant des électrons d .

La différence $V_1(70^\circ K) - V_1(300^\circ K)$ est de l'ordre de 100 m/s dans cet intervalle et correspond à la courbe K de la figure 2. On peut alors prédire aussi, par le même modèle $V_1(70^\circ K) - V_1(300^\circ K)$, et les valeurs obtenues sont données par la courbe G.

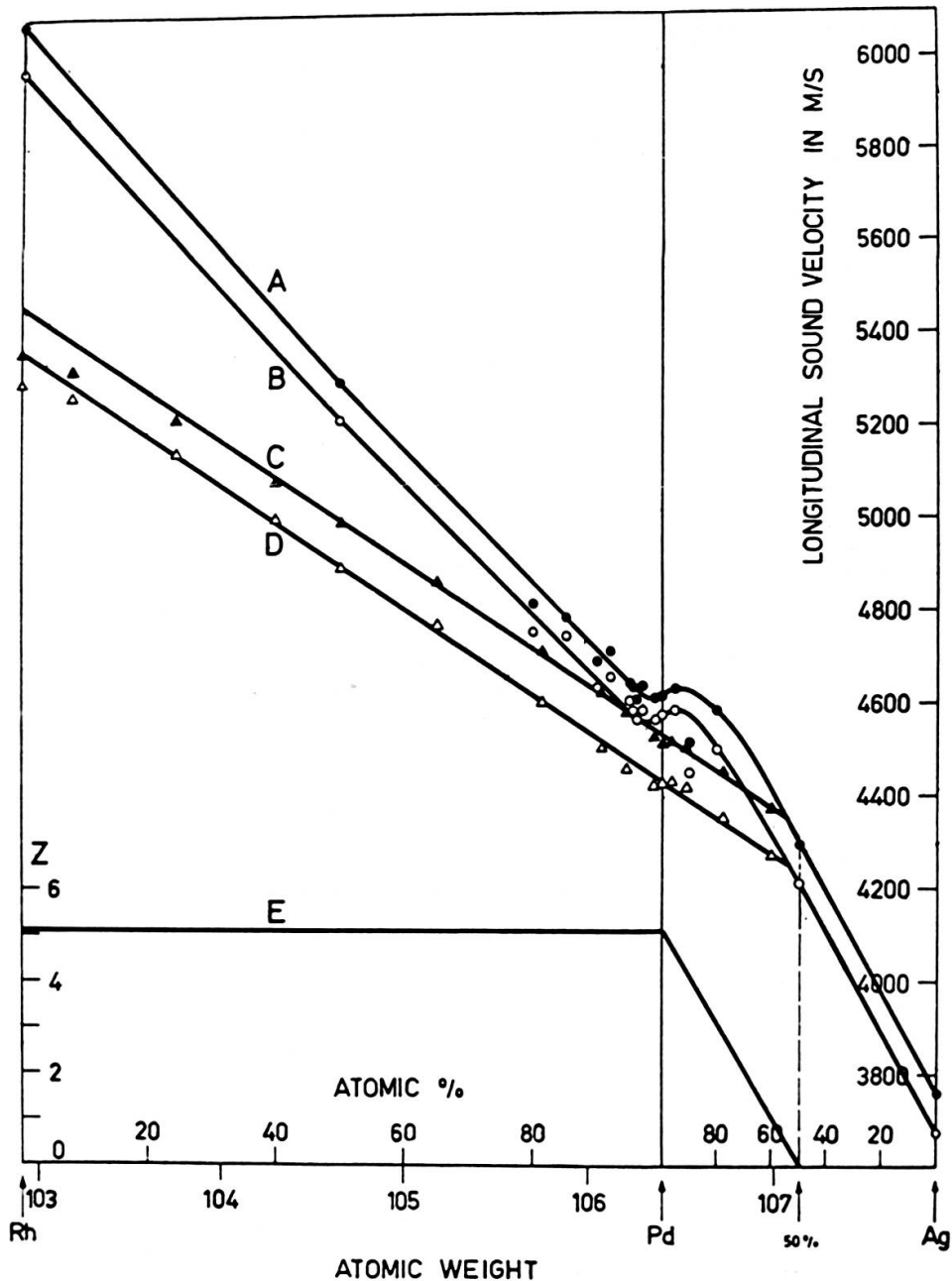


Fig. 1.

B. Vitesses transversales

Avec les disques de quartz dz coupe Y , c'est-à-dire pour les ondes transversales pour un grand nombre d'échantillons, on observe difficilement des échos, particuliè-

rement à température ambiante et pour la zone où l'on devrait observer l'anomalie déjà vue pour les ondes longitudinales. On a pu cependant faire des mesures pour certains échantillons à 300° K et obtenir des valeurs de vitesse transversale, de

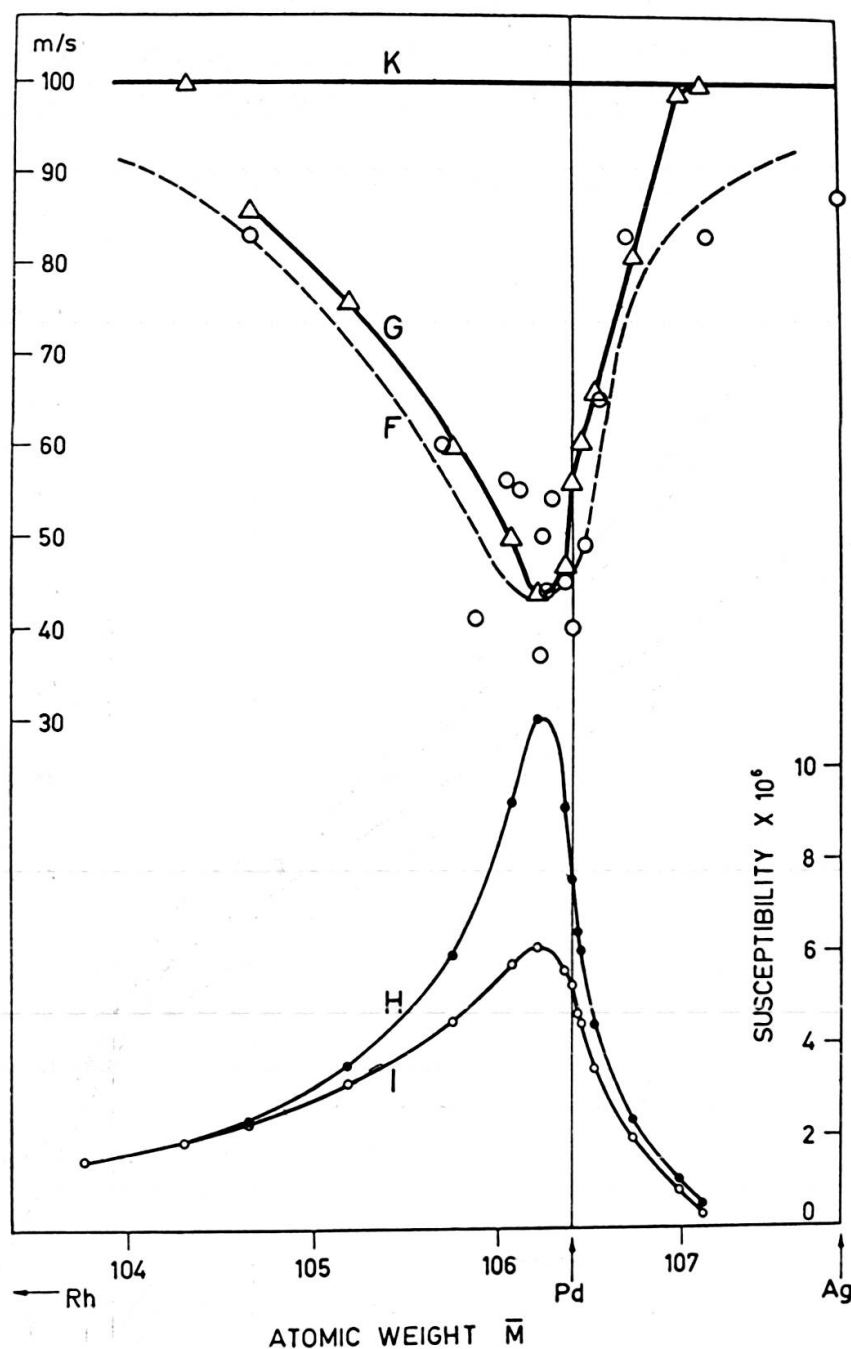


Fig. 2.

module de Young, de compressibilité, de module de cisaillement qui sont en bon accord avec les résultats obtenus par d'autres auteurs. L'observation est beaucoup plus facile à basse température: les signaux sont plus nombreux et meilleurs. Cette forte atténuation est certainement due à la structure microcristalline de nos échantillons polycristallins. La solution serait donnée par des mesures sur des monocristaux de ces alliages.

1° A la température de 300 K :°

Avec les formules suivantes:

$$V_1 = \left[\frac{2g}{\rho} \cdot \frac{m-1}{m-2} \right]^{1/2}$$

$$V_t = [g/\rho]^{1/2}$$

où: $m = 1/\sigma$, σ étant le coefficient de Poisson, g le module de cisaillement, ρ la densité et avec la relation bien connue:

$$E = 2g \frac{m+1}{m}$$

où E est le module de Young, on peut donner le tableau suivant:

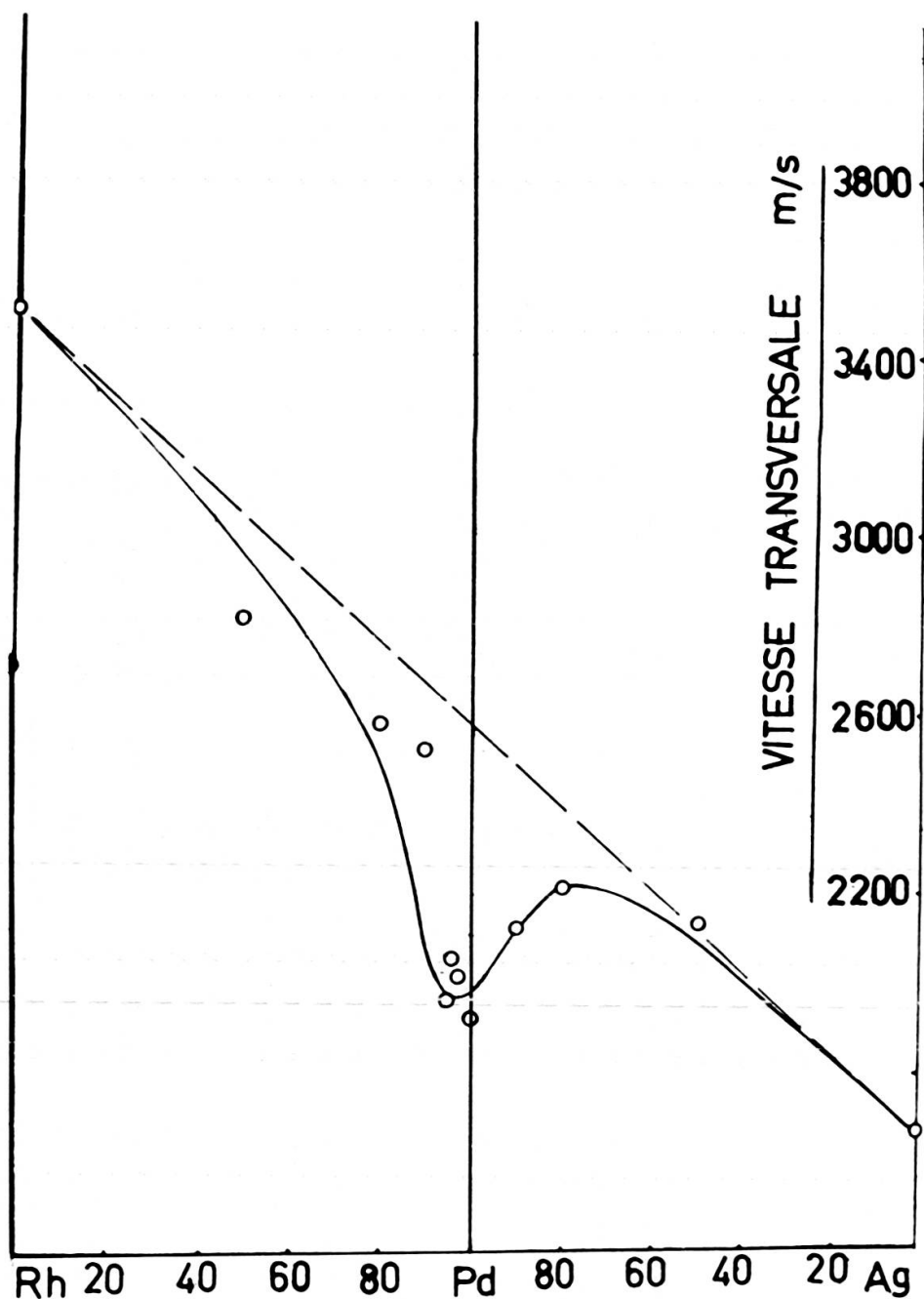
Echantillons	E (10^{11} dyn/cm ²)	μ ou σ	V_L (m/s)	E (10^{11} dyn/cm ²)	μ ou σ	V_L (cm/s)
Ag	8.06	0.38	3672	8.16	0.37	3680
Pd	12.50	0.39	4574	12.36	0.39	4500
Rh	37.97	0.25	5990	38.64	0.26	6150
Auteurs	Nos Résultats			Résultats de Werner		

2₁ A la température de 70° K :

On obtient ici de bons signaux, de quatre à six échos. La courbe représentant (ci-après) la vitesse transversale montre un minimum bien prononcé dans la région autour du Pd-Rh 95/5. On peut dire déjà que la vitesse transversale est reliée au module de cisaillement g par: $V_t = (g/\rho)^{1/2}$ et que ce module de cisaillement ne peut être obtenu dans le modèle du Jellium; qu'il est un effet essentiellement de structure de bande, de périodicité du cristal.

Nous signalons d'autre part que ce module- g est lié à la température de Debye Θ_D . Celle-ci a été étudiée expérimentalement d'une part pour les alliages Pd-Ag par

Yates [3], d'autre part pour les alliages *Pd-Rh* par Hoare et Matthews [4]. Signalons qu'elle vaut environ 260° K pour le *Rd-Rh* 95/5; elle présente ici un minimum bien marqué.



IV. L'INSUFFISANCE DU MODÈLE DU JELLIUM

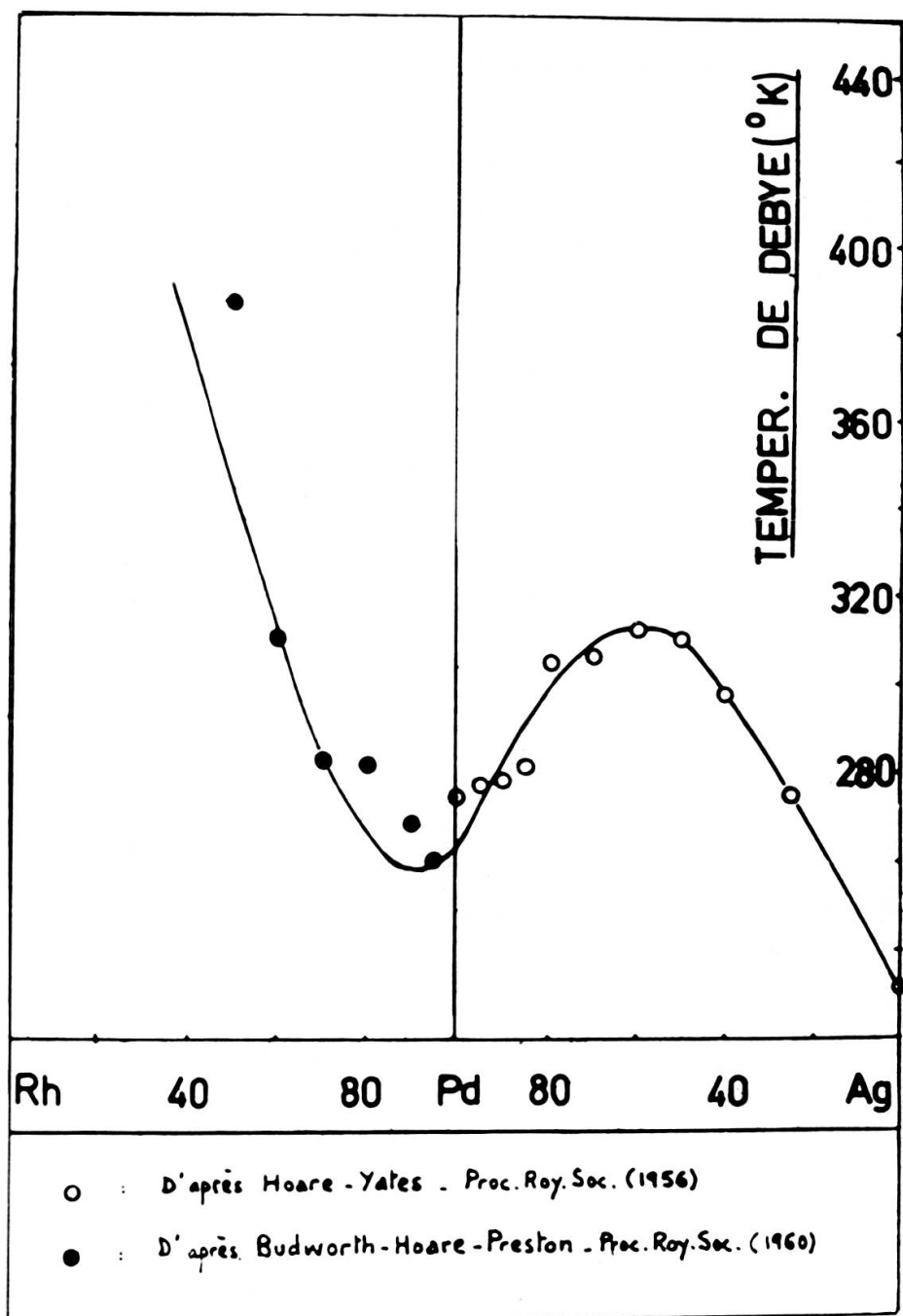
a) *Le module g ne peut être obtenu dans le modèle du Jellium.*

La formule complète de la règle de somme pour les fréquences phononiques est donnée par [5]:

$$M \sum_{\lambda} \omega_{k\lambda}^2 = N V_k k^2 + N \sum_{K \neq 0} V_{k+k_n} (k+k_n)^2 - V_{k_n} k_n^2$$

obtenue à partir de la relation de dispersion sonore tridimensionnelle:

$$M \omega_{k\lambda}^2 \varepsilon_{k\lambda} = N V_k k k \cdot \varepsilon_{k\lambda} + N \sum_{K \neq 0} V_{k+k_n} (k+k_n) (k+k_n) \cdot \varepsilon_{k\lambda} - V_{k_n} k_n k_n \cdot \varepsilon_{k\lambda}.$$



Le deuxième terme du membre de droite conduit aux vibrations transversales qui proviennent de la périodicité du cristal.

Et c'est en négligeant justement ce deuxième terme que l'on a été conduit pour une part à notre modèle simplifié.

Dans le cas des vibrations longitudinales seules, on peut écrire:

$$M\omega_{k\lambda}^2 \varepsilon_{k\lambda} = Nk(k \cdot \varepsilon_{k\lambda}) V_k ,$$

ε_k est un vecteur de polarisation unité; $\lambda = 1, 2, 3$ désigne les trois polarisations correspondant à un k donné. Nous savons en effet qu'à une direction de propagation et à une longueur d'onde données, il correspond trois polarisations et trois fréquences. Si l'on prend le vecteur unité de propagation k parallèle à ε_{k1} , on trouve pour $\omega_{k\lambda}^2$:

$$M\omega_{k\lambda}^2 = Nk^2 V_k .$$

Comme ε_{k2} et ε_{k3} sont perpendiculaires à ε_{k1} et perpendiculaires entre eux, leur produit scalaire par k (parallèle à ε_{k1}) est nul. Et l'on a alors:

$$M\omega_{k2}^2 \varepsilon_{k2} = M\omega_{k3}^2 \varepsilon_{k3} = 0 ; \quad \omega_{k2}^2 = \omega_{k3}^2 = 0 .$$

Avec V_k coulombien, nous avons été ainsi amenés à notre modèle du jellium où les effets de périodicité ionique étaient négligés et où les ions formaient un plasma ionique positif, avec les caractéristiques suivantes:

modes longitudinaux:

$$\omega_{k1} = \Omega_p = \left(\frac{4\pi NZ^2 e^2}{M} \right)^{1/2}$$

modes transversaux:

$$\omega_{kL} = 0 .$$

Il n'y a donc pour ainsi dire pas de résistance au cisaillement. Nous avons donc des processus normaux ($K_n = 0$, voir la relation de dispersion) et seuls les modes longitudinaux sont couplés aux électrons.

Le couplage des modes transversaux aux électrons ne peut donc avoir lieu que par des processus Umklapp. ($K_n \neq 0$).

Il est alors clair que le module g qui est lié aux vitesses transversales ne peut être obtenu dans le modèle du Jellium.

On pourrait peut-être proposer un autre modèle dans lequel on tiendrait compte des effets de périodicité ionique tout en supposant toujours des interactions électron-ion et ion-ion purement coulombiennes. On pourrait obtenir dans ce nouveau modèle les vibrations transversales et leurs fréquences en partant de la même relation générale de dispersion.

Je pourrais rattacher à ce sujet un article de Leigh [6] sur l'aluminium, article qui pourrait avoir son intérêt dans l'étude des monocristaux de nos alliages. Leigh a essayé d'étudier et d'analyser les diverses contributions aux constantes de cisaille-

ment: $1/2 (c_{11} - c_{12})$ et c_{44} , en suivant le travail de Fuchs sur les métaux monovalents, c'est-à-dire en écrivant l'énergie totale d'un métal comme une somme de termes séparés: $E = E_1 + E_2 + \dots$

En essayant de calculer comment varient ces termes quand le métal est cisailé, il est alors possible d'obtenir les constantes élastiques du métal sous la forme d'une somme correspondante de contributions séparées. Leigh en arrive à deux contributions principales: les contributions coulombiennes positives, trop grandes et les contributions des électrons de recouvrement, contributions négatives et permettant ainsi de justifier les valeurs trouvées par Lazarus pour les constantes élastiques de *Al*.

Notons que $1/2 (c_{11} - c_{12})$ sont reliées aux vitesses transversales par

$$\begin{aligned} \rho v_{t1}^2 &= c_{44} \\ \rho v_{t2}^2 &= 1/2 (c_{11} - c_{12}) \end{aligned} \quad \text{et} \quad \rho v_l^2 = \frac{1}{2} (c_{11} + c_{12} + 2c_{44}) .$$

Notons d'autre part que:

$$\Theta_D \simeq \frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_{t1}^3} + \frac{1}{v_{t2}^3}$$

et que, en général:

$$v_l \simeq 2v_t .$$

ce qui montre que les contributions principales à θ_{Deb} proviennent des vitesses transversales; la température de Debye présente un minimum dans la région de l'anomalie, v_t également et g aussi.

Il ressort de cet article que plus la densité d'états augmente, plus faibles sont les constantes élastiques $1/2 (c_{11} - c_{12})$ et c_{44} , qui devraient présenter une décroissance notable dans la région de l'anomalie.

d) Conclusion.

Une étude des monocristaux des alliages de *Pd* éclaircirait beaucoup la situation sur les diverses contributions aux constantes élastiques. Et le problème du rôle de la texture sera définitivement élucidé.

Il n'en reste pas moins vrai que la corrélation entre propriétés électroniques et propriétés élastiques est bien établie, théoriquement et expérimentalement, et ceci pour la première fois. Le modèle du Jellium est suffisant tant qu'on se limite aux processus normaux. Le cisaillement pourrait trouver son explication dans un modèle plus complet où l'on tiendrait compte de la périodicité ionique. Cette étude pourrait être étendue à d'autres alliages que ceux du *Pd*; je citerai par exemple les alliages de *Ir-Pt-Au* dont la susceptibilité présente aussi une anomalie comme les alliages de *Rh-Pd-Ag*.

RÉFÉRENCES

1. BUDWORTH, D. W., F. E. HOARE and J. PRESTON. *Proc. Roy. Soc.*, A 257, 260 (1960).
2. SEITCHIK, J. A., V. JACCARINO, Jh. WERNICK and GOSSARD. *Phys. Rev.*, 138, A 148 (1965).
3. YATHES, B. and H. E. HOARE. *Proc. Roy. Soc.*, A 240, 42 (1957).
4. HOARE, F. E., J. C. MATTHEWS and J. C. WALLING. *Proc. Roy. Soc.*, A 216, 502 (1953).
5. PINES, D. *Elementary Excitations in Solids*. Benjamin, Inc., New York (1963).
6. LEIGH, R. S. *Phil. Mag.*, 42, 139 (1951).

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION	221
CHAPITRE I: <i>Partie théorique : établissement de la corrélation</i>	223
1) Compressibilité d'un gaz électronique	223
2) Modèle de Schrieffer	225
3) Susceptibilité et effet d'échange	230
Références	232
CHAPITRE II: <i>Etude graphique rapide de la théorie</i>	232
1) Règles du calcul graphique	233
2) Les graphes irréductibles et l'équation de Dyson	236
3) Constante diélectrique généralisée	238
4) Applications	239
5) Interaction électron-phonon par les graphes	241
6) Réponse à un champ magnétique extérieur: susceptibilité	244
CHAPITRE III: <i>Partie expérimentale : mesures et interprétations</i>	249
1) Dispositif expérimental	249
2) Joints; supports et échantillons	253
3) Résultats des mesures	254
A) Vitesses longitudinales	254
B) Vitesses transversales	257
4) L'insuffisance du modèle du Jellium	260
Conclusion	263