



THÈSE

PRÉSENTÉE A

L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX 1

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Physique du Solide

Par

Jacques CURELY

Tome 2

Annexes

Soutenue le : 11 juin 1990, devant la commission d'examen :

MM. **P. HAGENMULLER**
B. BARBARA
D. BELTRAN
M. DRILLON
J. ETOURNEAU
R. GEORGES
P. MARSAU

Président
Examineur(s)

Tome 2

**CONTRIBUTION A L'ETUDE THERMODYNAMIQUE
DE DIVERS TYPES DE CHAINES DE SPINS**

ANNEXES

SOMMAIRE DU TOME II

Annexe 0 : Mise au point :	
Effet du champ cristallin sur les propriétés des ions magnétiques	1
Annexe 1 : Longueur de corrélation pour une chaîne homogène infinie, présentant un couplage z-z	11
Annexe 2 : Susceptibilité d'une chaîne homogène, infinie, présentant un couplage de Heisenberg et une distribution cationique à caractère aléatoire	15
Annexe 3 : Fonction de partition et corrélations en champ nul, pour une chaîne aléatoire alternée classique-quantique, de longueur finie, présentant un couplage de Heisenberg ..	23
Annexe 4 : Susceptibilité initiale pour une chaîne aléatoire alternée classique-quantique, infinie, présentant un couplage de Heisenberg	33
Annexe 5 : Comportement à basse température d'une chaîne régulière alternée classique-quantique, infinie, présentant un couplage de Heisenberg	37
Annexe 6 : Chaîne régulière alternée classique, infinie, présentant	

un couplage de Heisenberg	49
Annexe 7 : Comportement à basse température d'une chaîne aléatoire classique-quantique, infinie, présentant un couplage de Heisenberg	57
Annexe 8 : Fonction de partition en champ nul et susceptibilité initiale pour une chaîne aléatoire isotrope comportant des séquences alternées de spins classiques et de sous-systèmes quantiques	63
Annexe 9 : Chaîne régulière ($s', 1/2$) présentant un couplage z-z. Etablissement des expressions de l'aimantation et de la susceptibilité parallèles, et de la longueur de corrélation	73
Annexe 10 : Comportement à basse température de la susceptibilité et de l'aimantation parallèles d'une chaîne régulière ($s', 1/2$) présentant un couplage z-z	77
Annexe 11 : Chaîne régulière (s', s) présentant un couplage z-z. Etablissement de l'expression de la matrice de transfert (\mathcal{T}). Comportement de la susceptibilité parallèle et de la longueur de corrélation à basse température. Cas de la chaîne classique.	85
Annexe 12 : Chaîne aléatoire alternée ($S, 1/2$) de longueur finie, présentant un couplage z-z. Fonction de partition en présence d'un champ B parallèle à l'axe Oz. Corréla-	

tions en champ nul	93
Annexe 13 : Chaîne aléatoire ($S,1/2$) infinie, présentant un couplage z-z. Etablissement des expressions de l'aimantation et de la susceptibilité parallèles	103
Annexe 14 : Chaîne aléatoire alternée ($S,1/2$) de longueur finie, présentant un couplage z-z. Etablissement de l'expression de la susceptibilité perpendiculaire	107
Annexe 15 : Expressions de la susceptibilité et de l'aimantation parallèles, de la longueur de corrélation et de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne régulière ($S,1/2$) infinie, présentant un couplage z-z	111
Annexe 16 : Expressions de la susceptibilité et de l'aimantation parallèles, de la longueur de corrélation et de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne régulière ($S,1/2$) infinie présentant un couplage z-z, avec alternance dans l'échange. Comportement à basse température	131
Annexe 17 : Chaîne classique-quantique alternée ($S,1/2$) infinie, présentant un couplage z-z à caractère aléatoire. Comportement à basse température des susceptibilités parallèle et perpendiculaire	151
Annexe 18 : Chaîne régulière ($s',1/2$) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de l'axe Oz) sur les spins s' . Etablissement des expressions de l'ai-	

- mantation et de la susceptibilité parallèles. Etude de leur comportement à basse température 165
- Annexe 19** : Expressions de la susceptibilité et de l'aimantation parallèles, de la longueur de corrélation et de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne régulière ($S, 1/2$), infinie, présentant un couplage $z-z$ et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin classique ($d=3$).
Comportements à basse température 175
- Annexe 20** : Chaîne aléatoire alternée ($S, 1$) de longueur finie, présentant un couplage $z-z$ et une anisotropie uniaxiale (le long de l'axe Oz), sur le spin 1. Fonction de partition en présence d'un champ B parallèle à l'axe Oz . Corrélations en champ nul. Expression de la susceptibilité parallèle de la chaîne régulière 197
- Annexe 21** : Chaîne régulière ($S, 1$) infinie, présentant un couplage $z-z$ et une anisotropie uniaxiale (le long de l'axe Oz) pour le spin 1. Comportement à basse température de la susceptibilité et de l'aimantation parallèles, de la longueur de corrélation et de la susceptibilité perpendiculaire 215
- Annexe 22** : Chaîne ($s', 1/2$) de type A, présentant un couplage $z-z$.
Etude de la susceptibilité parallèle 229
- Annexe 23** : Chaîne ($1/2, 1/2$) de type B, présentant un couplage $z-z$. Etude de la susceptibilité parallèle 241

Annexe 0

MISE AU POINT

Effet du champ cristallin sur les propriétés
des ions magnétiques

Dans cette mise au point, on considère brièvement, du point de vue du facteur de Landé et des interactions d'échange, les propriétés d'un ion présentant un couplage spin-orbite et soumis à un champ d'anisotropie uniaxiale (axe de symétrie : Oz). Nous supposons que l'ion est caractérisé par un spin total S et un moment orbital total L . Nous nous bornons au domaine des basses températures, en considérant que le terme de Boltzmann, $k_B T$, reste faible devant l'énergie qui sépare le fondamental du premier niveau excité. En fait, la plupart des aspects que l'on peut observer sont déjà présents dans le cas simple où le moment orbital est égal à la constante de Planck \hbar ($L=1$), et où le moment de spin est égal à $\hbar/2$ ($S=1/2$), ce qui serait le cas pour un électron unique dans un multiplet t_{2g} , avec déformation axiale du site octaédrique.

En l'absence de champ appliqué, l'hamiltonien peut être écrit sous la forme :

$$\mathcal{H}_0 = 2\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + k(L^z)^2 \quad . \quad (\text{A0-1})$$

Dans la base des états $|L^z, S^z\rangle$, la représentative de \mathcal{H}_0 s'écrit :

Annexe 0

MISE AU POINT

Effet du champ cristallin sur les propriétés
des ions magnétiques

Dans cette mise au point, on considère brièvement, du point de vue du facteur de Landé et des interactions d'échange, les propriétés d'un ion présentant un couplage spin-orbite et soumis à un champ d'anisotropie uniaxiale (axe de symétrie : Oz). Nous supposons que l'ion est caractérisé par un spin total S et un moment orbital total L . Nous nous bornons au domaine des basses températures, en considérant que le terme de Boltzmann, $k_B T$, reste faible devant l'énergie qui sépare le fondamental du premier niveau excité. En fait, la plupart des aspects que l'on peut observer sont déjà présents dans le cas simple où le moment orbital est égal à la constante de Planck \hbar ($L=1$), et où le moment de spin est égal à $\hbar/2$ ($S=1/2$), ce qui serait le cas pour un électron unique dans un multiplet t_{2g} , avec déformation axiale du site octaédrique.

En l'absence de champ appliqué, l'hamiltonien peut être écrit sous la forme :

$$\mathcal{H}_0 = 2\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + k(L^z)^2 \quad . \quad (\text{A0-1})$$

Dans la base des états $|L^z, S^z\rangle$, la représentative de \mathcal{H}_0 s'écrit :

$$({\mathcal{H}}_0) = \begin{matrix} & |1,\uparrow\rangle & |1,\downarrow\rangle & |0,\uparrow\rangle & |0,\downarrow\rangle & |-1,\uparrow\rangle & |-1,\downarrow\rangle \\ \begin{matrix} \langle 1,\uparrow| \\ \langle 1,\downarrow| \\ \langle 0,\uparrow| \\ \langle 0,\downarrow| \\ \langle -1,\uparrow| \\ \langle -1,\downarrow| \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccccc} k+\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k-\lambda & \lambda\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k+\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k-\lambda & \lambda\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda\sqrt{2} & 0 \end{array} \right) \end{matrix} \cdot \quad (\text{A0-2})$$

Si on applique un champ d'amplitude B suivant la direction Oz , la perturbation

$${\mathcal{H}}^{z,\text{mag.}} = - (2s^z + L^z) B \quad (\text{A0-3})$$

a pour représentative :

$$({\mathcal{H}}^{z,\text{mag.}}) = B \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \quad (\text{A0-4})$$

Si le champ est appliqué suivant une direction perpendiculaire à Oz (ici, la direction Ox , mais ce choix est sans importance), la perturbation

$${\mathcal{H}}^{x,\text{mag.}} = - (2s^x + L^x) B \quad (\text{A0-5})$$

a pour représentative :

$$({\mathcal{H}}^{x,\text{mag.}}) = B \begin{pmatrix} 0 & -1 & -r & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -r \\ -r & 0 & 0 & 0 & -r & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -r \\ 0 & 0 & -r & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -r & -1 & -r & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad r = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \quad (\text{A0-6})$$

La représentative de \mathcal{H}_0 est diagonale dans la base des états

$$|X_1\rangle = |1, \uparrow\rangle, \quad (\text{A0-7})$$

$$|X_2\rangle = c |1, \downarrow\rangle + s |0, \uparrow\rangle, \quad (\text{A0-8})$$

$$|X_3\rangle = -s |1, \downarrow\rangle + c |0, \uparrow\rangle, \quad (\text{A0-9})$$

$$|X_4\rangle = |-1, \uparrow\rangle, \quad (\text{A0-10})$$

$$|X_5\rangle = c |-1, \uparrow\rangle + s |0, \downarrow\rangle, \quad (\text{A0-11})$$

$$|X_6\rangle = -s |-1, \uparrow\rangle + c |0, \downarrow\rangle. \quad (\text{A0-12})$$

Dans ces expressions,

$$c = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{k-\lambda}{\sqrt{k^2 - 2\lambda k + 9\lambda^2}} \right)}, \quad (\text{A0-13})$$

$$s = \frac{2\lambda}{\sqrt{k^2 - 2\lambda k + 9\lambda^2} + (k-\lambda)\sqrt{k^2 - 2\lambda k + 9\lambda^2}}. \quad (\text{A0-14})$$

Les valeurs propres associées sont :

$$E_1 = k + \lambda, \quad (\text{A0-15})$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \left(k - \lambda + \sqrt{k^2 - 2\lambda k + 9\lambda^2} \right), \quad (\text{A0-16})$$

$$E_3 = \frac{1}{2} \left(k - \lambda - \sqrt{k^2 - 2\lambda k + 9\lambda^2} \right), \quad (\text{A0-17})$$

$$E_4 = k + \lambda, \quad (\text{A0-18})$$

$$E_5 = \frac{1}{2} \left(k - \lambda + \sqrt{k^2 - 2\lambda k + 9\lambda^2} \right), \quad (\text{A0-19})$$

$$E_6 = \frac{1}{2} \left(k - \lambda - \sqrt{k^2 - 2\lambda k + 9\lambda^2} \right) . \quad (\text{A0-20})$$

En l'absence de champ, les niveaux d'énergie se rassemblent donc en trois doublets sauf lorsque le couplage spin-orbite est nul ; dans ce cas, les niveaux E_1, E_2 (ou E_3 selon le signe de k), E_4 et E_5 (ou E_6) constituent un quadruplet. Si l'on admet que λ n'est jamais strictement nul, et si l'on s'intéresse aux susceptibilités initiales ($B=0$), on peut d'emblée ignorer ce cas, et considérer que nous n'avons affaire qu'à des doublets. Dans la nouvelle base, les perturbations $\mathcal{H}^{z,\text{mag.}}$ et $\mathcal{H}^{x,\text{mag.}}$ ont pour représentatives :

$$(\mathcal{H}^{z,\text{mag.}}) = B \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -c^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix} , \quad (\text{A0-21})$$

$$(\mathcal{H}^{x,\text{mag.}}) = B \begin{pmatrix} 0 & -(c+rs) & s-rc & 0 & 0 & 0 \\ -(c+rs) & 0 & 0 & 0 & -s(2rc+s) & -r(c^2-s^2) \\ s-rc & 0 & 0 & 0 & -r(c^2-s^2) & c(2rs-c) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -(c+rs) & s-rc \\ 0 & -s(2rc+s) & -r(c^2-s^2) & -(c+rs) & 0 & 0 \\ 0 & -r(c^2-s^2) & c(2rs-c) & s-rc & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (\text{A0-22})$$

L'effet de ces perturbations sur le niveau fondamental donne lieu à une

modification linéaire en B de l'énergie correspondante. Au zéro absolu, la composante du moment magnétique dans la direction du champ est donnée par la valeur absolue du coefficient de B. S'agissant de doublets, on leur attribue habituellement un spin effectif 1/2, de sorte que le facteur de Landé associé est égal au double de cette valeur absolue. L'examen des représentatives des deux perturbations montre que le moment magnétique dépend de la direction du champ appliqué : ainsi s'introduit la notion de tenseur de Landé. Dans les conditions de symétrie que nous avons définies, ce tenseur, qui est symétrique par essence, se trouve être aussi diagonal, avec :

$$g^{zz} = g^{xx} = g^{yy} . \quad (\text{A0-23})$$

Nous utiliserons dans cette annexe la notation $g_{//}$ pour g^{zz} , et g_{\perp} pour g^{xx} et g^{yy} .

On doit alors considérer diverses situations caractérisées par les valeurs de k et de λ .

Lorsque k est positif, si le couplage spin-orbite est faible, le doublet non perturbé fondamental est constitué par la paire ($|X_3\rangle$, $|X_6\rangle$) et les éléments diagonaux du tenseur de Landé valent, au second ordre près en λ/k :

$$g_{//} = 2 \quad , \quad g_{\perp} = 2 \left(1 - \frac{2\lambda}{k} \right) . \quad (\text{A0-24})$$

Le moment orbital est maintenu dans le plan xOy par le terme d'anisotropie. Le tenseur de Landé est principalement associé au moment magnétique porté par le spin. Sa valeur est légèrement modulée en fonction de la direction d'application du champ, en raison de la faible contribution orbitale.

Si le couplage spin-orbite est positif et fort par rapport à l'anisotropie, les éléments du tenseur de Landé ont pour valeurs :

$$g_{//} = \frac{2}{3} \left(1 + \frac{4k}{9\lambda} \right) , \quad g_{\perp} = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{2k}{9\lambda} \right) . \quad (\text{A0-25})$$

Le multiplet fondamental est toujours formellement constitué des mêmes états ; mais le moment orbital et le moment de spin, fortement couplés, forment un moment cinétique résultant J de nombre quantique $1/2$ associé à un facteur de Landé égal à $3/2$. En présence d'une faible anisotropie on observe une légère modulation en fonction de la direction d'application du champ.

Si le couplage spin-orbite est fort mais négatif, les éléments du tenseur de Landé deviennent :

$$g_{//} = \frac{4}{3} \left(1 - \frac{2k}{9\lambda} \right) , \quad g_{\perp} = \frac{8}{3} \left(1 - \frac{k}{18\lambda} \right) . \quad (\text{A0-26})$$

Dans ce cas, le moment cinétique résultant a pour nombre quantique $3/2$; cette valeur est suffisante pour que le quadruplet associé éclate en deux doublets sous l'effet de l'anisotropie ; la composante J^z prend, dans le doublet fondamental les valeurs $\pm 1/2$, ce qui lui permet, sous l'action d'un champ, de présenter une composante non nulle dans la direction correspondante, quelle qu'elle soit. Mais cette composante varie fortement avec la direction : dans un schéma classique, tout se passe comme si le vecteur J était astreint à s'orienter suivant les génératrices d'un cône de demi-angle au sommet $\text{Arctan}(2-7k/36\lambda)$.

Considérons maintenant le cas où l'anisotropie favorise l'axe Oz ($k < 0$). Si le couplage spin-orbite est faible mais positif, nous avons :

$$g_{//} = 4 , \quad g_{\perp} = 0 . \quad (\text{A0-27})$$

En l'absence de champ, le doublet fondamental est encore constitué par les états $|X_3\rangle$ et $|X_6\rangle$. Dans la limite des très faibles valeurs de λ , ces

états se réduisent à $|1, \downarrow\rangle$ et $|-1, \uparrow\rangle$: le moment orbital est orienté suivant l'un ou l'autre des sens de l'axe Oz ; le très faible couplage spin-orbite positif étant suffisant pour orienter le moment de spin en sens inverse, le moment magnétique total s'annule. Les éléments du tenseur (g) seraient rigoureusement nuls si ce couplage ne contribuait pas, en même temps, à introduire des contributions respectivement de type $|0\uparrow\rangle$ ou $|0\downarrow\rangle$ (de moment non nul) dans l'état fondamental. Ces contributions expliquent les faibles valeurs de ces éléments, et le fait qu'elles croissent avec λ .

Dans l'autre limite ($\lambda \gg |k|$), nous avons :

$$g_{//} = \frac{2}{3} \left(1 + \frac{4k}{9\lambda} \right), \quad g_{\perp} = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{2k}{9\lambda} \right). \quad (\text{A0-28})$$

Les états $|X_3\rangle$ et $|X_6\rangle$ qui constituent encore le doublet fondamental sont très proches maintenant des deux états associés à la configuration $J=1/2$ dont le facteur de Landé vaut $2/3$. Ce facteur, isotrope dans la limite où k est nul, présente une légère modulation en fonction de la direction d'application du champ lorsque l'on tient compte de l'anisotropie uniaxiale. On remarque que les deux dernières expressions sont identiques à celles qui ont été obtenues dans la même limite, lorsque k est positif.

Considérons maintenant les valeurs négatives de λ , qui favorisent un arrangement ferromagnétique de L et S . Quelle que soit la valeur du rapport λ/k , nous obtenons :

$$g_{//} = 4, \quad g_{\perp} = 0. \quad (\text{A0-29})$$

Le doublet fondamental est associé aux états $|X_1\rangle$ et $|X_4\rangle$, c'est-à-dire $|1, \uparrow\rangle$ et $|-1, \downarrow\rangle$: les deux moments magnétiques s'ajoutent et sont retenus

suisant l'un ou l'autre des deux sens de l'axe Oz par le terme d'anisotropie, conférant une valeur nulle à g_{\perp} .

Il est clair que les valeurs parfois élevées de $g_{//}$ ou g_{\perp} sont liées au fait que l'on introduit dans tous les cas un spin fictif 1/2 pour décrire le doublet fondamental, alors que le moment associé peut atteindre $2\mu_B$.

Si on s'intéresse maintenant au couplage d'échange entre deux ions du type que nous venons d'examiner, on doit noter que l'échange est fondamentalement une interaction spin-spin, mais que la constante de couplage dépend de la disposition des orbitales mises en jeu. L'hamiltonien correspondant, pour les spins s et s' de deux électrons, portés par les orbitales de moments cinétiques ℓ et ℓ' , sur deux sites voisins, peut s'écrire par exemple :

$$\mathcal{H}^{\text{éch.}} = (t_0 + t_1(\ell^z)^2)(t_0 + t_1(\ell'^z)^2) s \cdot s' \quad . \quad (\text{A0-30})$$

Il se trouve que, pour ℓ égal à 1, les représentatives de $(\ell^z)^2$ et $(\ell'^z)^2$ sont sphériques dans les bases réduites qui interviennent dans cette étude, de sorte que les termes $t_1(\ell^z)^2$ et $t_1(\ell'^z)^2$ n'introduisent pas d'anisotropie dans la constante de couplage. En revanche, la représentative du produit scalaire $s \cdot s'$, exprimée au moyen des composantes \tilde{s} et \tilde{s}' des spins fictifs, a une nature anisotrope ; dans tous les cas, à l'exception de la situation $\{k < 0, \lambda < 0\}$, nous avons :

$$\text{Rep.}(s \cdot s') \approx \text{Rep.} \left((c^2 - s^2)^2 \tilde{s}^z \tilde{s}'^z + c^4 \tilde{s}^+ \tilde{s}'^- \right) \quad . \quad (\text{A0-31})$$

Dans ces conditions, la constante d'échange doit être considérée comme

un tenseur, diagonal dans les axes que nous avons choisis, et caractérisé par deux termes $J_{//}$ et J_{\perp} :

$$J_{//} = J (c^2 - s^2)^2 \quad , \quad J_{\perp} = J c^4 \quad . \quad (\text{A0-32})$$

Dans ces expressions, nous avons posé :

$$J = (t_0 + t_1 \langle (\ell^z)^2 \rangle) (t_0 + t_1 \langle (\ell'^z)^2 \rangle) \quad , \quad (\text{A0-33})$$

où $\langle (\ell^z)^2 \rangle$ représente l'élément diagonal de la représentative de $(\ell^z)^2$ dans la base réduite. En reprenant les divers cas de figure que nous avons examinés du point de vue du tenseur de Landé, nous avons, au second ordre près (en λ/k ou k/λ selon les circonstances) :

$$k > 0 \quad \lambda \approx 0 \quad J_{//} = J \left(1 - \frac{8\lambda^2}{k^2} \right) \quad , \quad J_{\perp} = J \left(1 - \frac{4\lambda^2}{k^2} \right) \quad , \quad (\text{A0-34})$$

$$k > 0 \quad \lambda \gg k \quad J_{//} = \frac{J}{9} \left(1 - \frac{16k}{9\lambda} \right) \quad , \quad J_{\perp} = \frac{4J}{9} \left(1 - \frac{4k}{9\lambda} \right) \quad , \quad (\text{A0-35})$$

$$k > 0 \quad \lambda \ll -k \quad J_{//} = \frac{J}{9} \left(1 - \frac{16k}{9\lambda} \right) \quad , \quad J_{\perp} = \frac{J}{9} \left(1 + \frac{8k}{9\lambda} \right) \quad , \quad (\text{A0-36})$$

$$k < 0 \quad \lambda \approx 0 \quad , \quad \lambda > 0 \quad J_{//} = J \left(1 - \frac{8\lambda^2}{k^2} \right) \quad , \quad J_{\perp} = J \left(\frac{2\lambda^2}{k^2} \right)^2 \quad , \quad (\text{A0-37})$$

$$k < 0 \quad \lambda \gg |k| \quad J_{//} = \frac{J}{9} \left(1 - \frac{16k}{9\lambda} \right) \quad , \quad J_{\perp} = \frac{4J}{9} \left(1 - \frac{4k}{9\lambda} \right) \quad . \quad (\text{A0-38})$$

Pour $\{k < 0, \lambda < 0\}$, nous avons simplement :

$$J_{//} = J \quad , \quad J_{\perp} = 0 \quad . \quad (\text{A0-39})$$

En comparant ces deux ensembles de résultats, il apparaît qu'il n'existe pas de lien aisément prévisible entre l'anisotropie du facteur de Landé et l'anisotropie de l'échange. Ainsi, pour $k > 0$ et $|\lambda| \ll k$, les tenseurs

(g) et (J) sont pratiquement isotropes. Pour $k > 0$ et $\lambda \gg k$, le tenseur (g) est isotrope au premier ordre près tandis que le tenseur (J) est très anisotrope. La situation est exactement inverse pour $k > 0$ et $\lambda \ll -k$. Pour $k < 0$ et λ faiblement positif, les tenseurs (g) et (J) sont très anisotropes avec g_{\perp} (respectivement J_{\perp}) négligeable devant g_{\parallel} (respectivement J_{\parallel}). Pour $k < 0$ et $\lambda \gg -k$, le tenseur (g) est presque isotrope et le tenseur (J) très anisotrope. Enfin, lorsque k et λ sont tous deux négatifs, les tenseurs (g) et (J) ont des composantes normales négligeables.

En définitive, nous observons que deux spins peuvent présenter un couplage de Heisenberg et des tenseurs de Landé anisotropes ou encore un couplage très anisotrope et des tenseurs de Landé isotropes. Il se produit même dans un des cas étudiés que le couplage est de type z-z alors que le moment magnétique n'a jamais de composante suivant l'axe Oz ($k < 0$, λ faiblement positif).

Dans un cas plus complexe, en particulier si le nombre quantique orbital était supérieur à l'unité, d'autres contributions à l'anisotropie de l'échange seraient mises en jeu du fait que la représentative de $(\ell^z)^2$ ne serait plus sphérique dans le doublet fondamental.

Annexe 1

**LONGUEUR DE CORRELATION POUR UNE CHAÎNE
HOMOGENE, INFINIE, PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z**

Considérons une chaîne finie comportant $N+1$ spins de nombre quantique $s : s_0, s_1, \dots, s_{N-1}, s_N$. Nous supposons qu'il existe un couplage z-z d'amplitude J entre premiers voisins et qu'il n'y a pas de champ appliqué. Nous remarquons que, dans ce cas, la matrice (\mathcal{T}) est hermitique. En reprenant les conventions du paragraphe I-2.1, nous avons :

$$\mathbf{Z}_N = (\mathcal{T})^N \mathbf{Z}_0 . \quad (\text{A1-1})$$

Nous nous intéressons plus particulièrement à la corrélation :

$$\langle \mu_i \mu_j \rangle = \frac{1}{s} \langle m_i m_j \rangle , \quad (0 < i < j < N) , \quad (\text{A1-2})$$

où m_k représente la composante z du spin s_k . Nous pouvons écrire :

$$\langle \mu_i \mu_j \rangle = \frac{1}{s} \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}} , \quad (\text{A1-3})$$

avec :

$$\mathcal{A} = \sum_{m_0} \dots \sum_{m_i} \dots \sum_{m_j} \dots \sum_{m_N} m_i m_j (\mathcal{T})_{m_N m_j}^{N-j} (\mathcal{T})_{m_j m_i}^{j-i} (\mathcal{T})_{m_i m_0}^i \mathbf{Z}_0^{m_0} , \quad (\text{A1-4})$$

et où \mathcal{B} est obtenu en remplaçant dans \mathcal{A} le produit $m_i m_j$ par 1 (\mathcal{B} est simplement la fonction de partition). Posons :

$$(\mathcal{T}) = (\mathcal{S})(\mathcal{D})(\mathcal{S})^{-1} , \quad (\text{A1-5})$$

où la matrice (\mathcal{D}) est obtenue en diagonalisant (\mathcal{T}) de telle sorte que les valeurs propres $v_1, v_2, \dots, v_{2s+1}$ soient écrites dans l'ordre des modules

décroissants. L'expression (A1-4) peut alors s'écrire :

$$\mathcal{A} = \sum_{m_0} \dots \sum_{m_i} \dots \sum_{m_j} \dots \sum_{m_N} \sum_{\ell} \sum_{\ell'} \sum_{\ell''} m_i m_j (\mathcal{S})_{m_N \ell} v_{\ell}^{N-j} (\mathcal{S})_{\ell m_j}^{-1} \\ \times (\mathcal{S})_{m_j \ell'} v_{\ell'}^{j-i} (\mathcal{S})_{\ell' m_i}^{-1} (\mathcal{S})_{m_i \ell''} v_{\ell''}^{i+N} (\mathcal{S})_{\ell'' m_0}^{-1} \mathbf{Z}_0^{m_0} . \quad (\text{A1-6})$$

Nous supposons que, i et j restant finis, la chaîne s'allonge indéfiniment de sorte que $N-j$ et i tendent vers l'infini en même temps que N . Dans ces conditions, pour ℓ' et ℓ'' différents de 1, $(v_{\ell}/v_1)^{N-j}$ et $(v_{\ell''}/v_1)^i$ tendent vers 0, de sorte que nous pouvons remplacer \mathcal{A} par :

$$\tilde{\mathcal{A}} = \sum_{m_0} \dots \sum_{m_i} \dots \sum_{m_j} \dots \sum_{m_N} \sum_{\ell} m_i m_j (\mathcal{S})_{m_N 1} (\mathcal{S})_{1 m_j}^{-1} (\mathcal{S})_{m_j \ell} \\ \times v_{\ell}^{j-i} (\mathcal{S})_{\ell m_i}^{-1} (\mathcal{S})_{m_i 1} (\mathcal{S})_{1 m_0}^{-1} \mathbf{Z}_0^{m_0} , \quad (\text{A1-7})$$

$\tilde{\mathcal{B}}$ étant à son tour déduit de $\tilde{\mathcal{A}}$, comme \mathcal{B} de \mathcal{A} .

Nous pouvons poser :

$$F_{m_j \ell} = \sum_{m_{j+1}} \dots \sum_{m_N} (\mathcal{S})_{m_N 1} (\mathcal{S})_{1 m_j}^{-1} (\mathcal{S})_{m_j \ell} , \quad (\text{A1-8})$$

$$G_{\ell m_i} = \sum_{m_0} \dots \sum_{m_{i-1}} (\mathcal{S})_{\ell m_i}^{-1} (\mathcal{S})_{m_i 1} (\mathcal{S})_{1 m_0}^{-1} \mathbf{Z}_0^{m_0} . \quad (\text{A1-9})$$

Nous notons de plus que, pour $j-i$ suffisamment grand, nous pouvons ne considérer que les deux plus grandes valeurs propres v_1 et v_2 dans les sommations sur ℓ intervenant dans $\tilde{\mathcal{A}}$ et dans $\tilde{\mathcal{B}}$. Nous obtenons alors :

$$\langle m_i m_j \rangle = \frac{\sum_{m_i} \sum_{m_j} m_i m_j \left(F_{m_j 1} G_{1 m_i} + \left(\frac{v_2}{v_1} \right)^{j-i} F_{m_j 2} G_{2 m_i} + \dots \right)}{\sum_{m_i} \sum_{m_j} \left(F_{m_j 1} G_{1 m_i} + \left(\frac{v_2}{v_1} \right)^{j-i} F_{m_j 2} G_{2 m_i} + \dots \right)} . \quad (\text{A1-10})$$

Nous remarquons alors que nous avons :

$$\sum_m m (\mathcal{S})_{1 m} (\mathcal{S})_{m 1}^{-1} = 0 \quad . \quad (\text{A1-11})$$

En effet, appelons m le vecteur de l'espace des Z dont toutes les composantes sont nulles sauf la composante d'indice m , prise égale à 1. Soit e_1 le vecteur associé à la valeur propre v_1 . Ce vecteur a pour composante courante $(\mathcal{S})_{1 m}$ dans la base orthonormée des m . En raison de la symétrie associée au changement de z en $-z$, il vient :

$$(\mathcal{S})_{1 m} = (\mathcal{S})_{1 -m} \quad . \quad (\text{A1-12})$$

De même, puisque la matrice (\mathcal{T}) est hermitique et, par conséquent, les matrices (\mathcal{S}) unitaires :

$$(\mathcal{S})_{1 m}^{-1} = (\mathcal{S})_{1 -m}^{-1} \quad . \quad (\text{A1-13})$$

D'où découle immédiatement la relation (A1-11) et, par conséquent, la nullité de la contribution en $m_i m_j F_{m_j 1} G_{1 m_i}$ dans le numérateur de la corrélation $\langle m_i m_j \rangle$. En définitive, lorsque $j-i$ est suffisamment grand, nous pouvons écrire :

$$|\langle m_i m_j \rangle| \sim |u|^{j-i} \quad , \quad u = \frac{v_2}{v_1} \quad . \quad (\text{A1-14})$$

En utilisant la définition (I-50) de la longueur de corrélation et en remarquant que le rapport u est toujours inférieur à l'unité, nous avons simplement :

$$\xi^2 = \frac{1}{2} \frac{|u| (1 + |u|)}{(1 - |u|)^2} \quad . \quad (\text{A1-15})$$

Dans la limite des basses températures, le rapport $|u|$ tend vers 1 et la longueur de corrélation se comporte comme :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{1 - |u|} \quad . \quad (\text{A1-16})$$

La nature exacte de la divergence de la longueur de corrélation ξ à basse température suppose donc la connaissance exacte (ou le comportement limite lorsque T tend vers 0) des deux valeurs propres de plus grand module v_1 et v_2 de la matrice (\mathcal{T}).

Annexe 2

**SUSCEPTIBILITE D'UNE CHAINE HOMOGENE, INFINIE,
PRESENTANT UN COUPLAGE DE HEISENBERG ET UNE
DISTRIBUTION CATIONIQUE A CARACTERE ALEATOIRE**

Nous avons vu dans le paragraphe II-2 que la susceptibilité initiale, ramenée à un site, s'écrit pour une telle chaîne :

$$\chi = \frac{\beta}{3} \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \sum_{\eta=\pm 1} \overline{g_{\lambda(0,\varepsilon)} g_{\lambda(i,\eta)} \langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle} , \quad (\text{A2-1})$$

où la barre coiffant l'expression sous le signe somme signifie que l'on prend la moyenne sur toutes les configurations permises affectées de leurs probabilités respectives. Cette moyenne peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\overline{g_{\lambda(0,\varepsilon)} g_{\lambda(i,\eta)} \langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle} = \sum_{\lambda,\mu} p_{\varepsilon,\lambda} p_{\eta,\mu} \overline{\langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle_{\lambda\mu}} g_{\lambda} g_{\mu} , \quad (\text{A2-2})$$

où $\overline{\langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle_{\lambda\mu}}$ représente la valeur moyenne de la corrélation $\langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle$, lorsque les sites $(0,\varepsilon)$ et (i,η) sont occupés respectivement par un cation λ et un cation μ , tandis que les sites intermédiaires sont occupés de façon aléatoire.

Nous définissons l'ensemble des matrices carrées $(C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)})$, de dimension $\Lambda \times \Lambda$, et de terme courant :

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)})_{\lambda\mu} = \overline{\langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle_{\lambda\mu}} , \quad (\text{A2-3})$$

ainsi que les matrices-colonne à Λ éléments, (G_{ε}) et (G_{η}) , de termes cou-

rants $g_\lambda p_{\varepsilon,\lambda}$ et $g_\mu p_{\eta,\mu}$. Compte tenu de ces définitions, la relation (A2-2) s'écrit :

$$\overline{g_{\lambda(0,\varepsilon)} g_{\lambda(i,\eta)} \langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle} = (G_\varepsilon)^T (C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)}) (G_\eta) , \quad (\text{A2-4})$$

où T en exposant représente la transposition matricielle. Nous ayons donc pour la susceptibilité initiale χ :

$$\chi = \frac{\beta}{3} \sum_{\varepsilon\eta} (G_\varepsilon)^T \sum_{i=-\infty}^{+\infty} (C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)}) (G_\eta) . \quad (\text{A2-5})$$

Pour déterminer la matrice $(C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)})$, nous tenons compte que, dans le cas d'une chaîne isotrope de spins classiques, la corrélation entre deux spins peut être décomposée en un produit de corrélations faisant intervenir les spins intermédiaires (I-45). Cela nous permet d'écrire ici :

$$\langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle = \langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)-1} \rangle \langle \mathbf{S}_{(i,\eta)-1} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle , \quad (\text{A2-6})$$

où $(i,\eta)-1$ représente symboliquement le site se trouvant immédiatement à gauche du site (i,η) . Ainsi, nous avons, si (i,η) est supérieur à $(0,\varepsilon)$:

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)})_{\lambda\mu} = \sum_{\nu} (C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)-1})_{\lambda\nu} p_{-\eta,\nu} \langle \mathbf{S}_{(i,\eta)-1} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle_{\nu\mu} , \quad (\text{A2-7})$$

où nous avons tenu compte que η change de signe de site en site. Par ailleurs, la barre de moyenne a été supprimée sur la dernière corrélation qui ne présente aucun aléa de distribution.

La corrélation $\langle \mathbf{S}_{(i,\eta)-1} \cdot \mathbf{S}_{(i,\eta)} \rangle_{\nu\mu}$ est indépendante de i ; mais elle dépend de η car, selon le signe de ce paramètre, elle renvoie à deux spins d'une même cellule, ou à deux spins voisins sur des cellules adjacentes et les valeurs des interactions d'échange mises en jeu sont a priori différentes. Il est alors pratique de définir la matrice diagonale (Π_η) d'élément courant :

$$(\Pi_{\eta})_{\lambda\mu} = \delta(\lambda,\mu) p_{-\eta,\lambda} . \quad (\text{A2-8})$$

Nous définissons aussi la matrice carrée (Γ_{η}) par son élément courant :

$$(\Gamma_{\eta})_{\lambda\mu} = \langle S_{(i,\eta)-1} \cdot S_{(i,\eta)} \rangle_{\lambda\mu} , \quad (\text{A2-9})$$

de sorte que la matrice (\mathcal{T}_{η}) s'écrit :

$$(\mathcal{T}_{\eta}) = (\Pi_{\eta})(\Gamma_{\eta}) . \quad (\text{A2-10})$$

Remarque :

En général, la matrice $(\mathcal{T}_{\eta})(\mathcal{T}_{-\eta})$ n'est pas hermitique. Nous pouvons montrer par ailleurs que, à température finie, sa valeur propre dominante a un module inférieur à l'unité. Soit u un vecteur quelconque à Λ coordonnées. Nous nous intéressons au vecteur u' qui s'en déduit par action de $(\mathcal{T}_{\eta})(\mathcal{T}_{-\eta})$. Plus précisément, nous cherchons un majorant de la somme Ξ des modules des coordonnées de u . Nous avons :

$$\Xi = \sum_{\lambda=1}^{\Lambda} |u'_{\lambda}| = \sum_{\lambda=1}^{\Lambda} |(\mathcal{T}_{\eta})(\mathcal{T}_{-\eta})u|_{\lambda} .$$

Compte tenu de la définition de (\mathcal{T}_{η}) , il vient :

$$\Xi = \left| \sum_{\lambda=1}^{\Lambda} \sum_{\mu=1}^{\Lambda} \sum_{\nu=1}^{\Lambda} (\Pi_{\eta})_{\lambda\lambda} (\Gamma_{\eta})_{\lambda\mu} (\Pi_{-\eta})_{\mu\mu} (\Gamma_{-\eta})_{\mu\nu} u_{\nu} \right| .$$

Nous remarquons que les éléments des matrices (Γ) sont des corrélations entre premiers voisins. Soit C_m la plus grande de ces corrélations en valeur absolue. Nous pouvons écrire :

$$\Xi \leq C_m^2 \sum_{\lambda,\mu,\nu} p_{-\eta,\lambda} p_{\eta,\mu} |u_{\nu}| .$$

En tenant compte des définitions de $p_{-\eta,\lambda}$ et $p_{\eta,\mu}$, nous avons immédiatement :

$$\Xi \leq C_m^2 \sum_{\nu} |u_{\nu}| .$$

Ainsi, dans la transformation envisagée, la somme des valeurs absolues des composantes d'un vecteur est réduite dans un rapport inférieur ou égal à C_m^2 . En appliquant ce résultat au vecteur propre associé à la valeur propre dominante du produit $(\mathcal{T}_{\eta})(\mathcal{T}_{-\eta})$, nous montrons immédiatement que cette valeur propre dominante est majorée en valeur absolue par C_m^2 . Elle est donc inférieure à 1.

La relation (A2-7) s'écrit simplement :

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)})_{\lambda\mu} = ((C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)} - 1)(\mathcal{T}_{\eta}))_{\lambda\mu} , \quad (\text{A2-11})$$

ce qui correspond à l'écriture matricielle :

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)}) = (C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)} - 1)(\mathcal{T}_{\eta}) . \quad (\text{A2-12})$$

Nous pouvons encore écrire, si $(i, \eta) \geq (i, \varepsilon) + 2$:

$$(C_{(0, \varepsilon), (i, \eta)}) = (C_{(0, \varepsilon), (i-1, \eta)}) (\mathcal{F}_{-\eta}) (\mathcal{F}_{\eta}) . \quad (\text{A2-13})$$

En fin de récurrence, nous aboutissons à la matrice $(C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)})$ dont nous devons préciser la signification. Nous notons tout d'abord que c'est une matrice diagonale. Nous remarquons ensuite que nous avons formellement :

$$(C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)+1}) = (C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)}) (\mathcal{F}_{-\varepsilon}) , \quad (\text{A2-14})$$

avec, compte tenu de (A2-10) et du fait que les corrélations sont indépendantes de i :

$$(\mathcal{F}_{-\varepsilon})_{\lambda\mu} = p_{\varepsilon, \lambda} \langle S_{(0, -\varepsilon)} - 1 \cdot S_{(0, -\varepsilon)} \rangle_{\lambda\mu} . \quad (\text{A2-15})$$

D'après la relation (A2-3) :

$$(C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)+1})_{\lambda\mu} = \langle S_{(0, \varepsilon)} \cdot S_{(0, \varepsilon)+1} \rangle_{\lambda\mu} , \quad (\text{A2-16})$$

(ici encore la barre de moyenne est inutile). Nous remarquons par ailleurs que le changement de $(0, -\varepsilon)$ en $(0, \varepsilon) + 1$ laisse invariante la corrélation $\langle S_{(0, -\varepsilon)} - 1 \cdot S_{(0, -\varepsilon)} \rangle$ de sorte que nous pouvons écrire :

$$\langle S_{(0, -\varepsilon)} - 1 \cdot S_{(0, -\varepsilon)} \rangle_{\lambda\mu} = \langle S_{(0, \varepsilon)} \cdot S_{(0, \varepsilon)+1} \rangle_{\lambda\mu} . \quad (\text{A2-17})$$

La relation (A2-15) prend donc la forme suivante :

$$(\mathcal{F}_{-\varepsilon})_{\lambda\mu} = p_{\varepsilon, \lambda} \langle S_{(0, \varepsilon)} \cdot S_{(0, \varepsilon)+1} \rangle_{\lambda\mu} . \quad (\text{A2-18})$$

Compte tenu des relations (A2-4 et 18), nous avons :

$$(C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)+1})_{\lambda\mu} = (C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)})_{\lambda\mu} p_{\varepsilon, \lambda} \langle S_{(0, \varepsilon)} \cdot S_{(0, \varepsilon)+1} \rangle_{\lambda\mu} . \quad (\text{A2-19})$$

De (A2-16 et 19), nous déduisons immédiatement l'élément courant de la matrice $(C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)})$:

$$(C_{(0, \varepsilon), (0, \varepsilon)})_{\lambda\mu} = \delta(\lambda, \mu) p_{\varepsilon, \lambda}^{-1} . \quad (\text{A2-20})$$

La méthode de calcul des éléments de matrice $(C_{(0, \varepsilon), (i, \eta)})_{\lambda\mu}$ dépend des valeurs de ε et η et du signe de i . Nous la présentons ici en détail :

$\varepsilon\eta = 1$:

$i \geq 0$:

Si i est supérieur à 0, d'après (A2-12) :

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\varepsilon)}) = (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) (\mathcal{T}_{-\varepsilon}) (\mathcal{T}_{\varepsilon})^i . \quad (\text{A2-21})$$

Nous remarquons que cette relation peut être étendue au cas $i=0$.

$i < 0$:

Nous posons : $j = -i$, ($j > 0$). Nous avons alors :

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\varepsilon)})_{\lambda\mu} = (C_{(0,\varepsilon),(-j,\varepsilon)})_{\lambda\mu} . \quad (\text{A2-22})$$

D'après (A2-3), il vient :

$$(C_{(0,\varepsilon),(-j,\varepsilon)})_{\lambda\mu} = \overline{\langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(-j,\varepsilon)} \rangle_{\lambda\mu}} , \quad (\text{A2-23})$$

ou encore :

$$(C_{(0,\varepsilon),(-j,\varepsilon)})_{\lambda\mu} = \overline{\langle \mathbf{S}_{(-j,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \rangle_{\mu\lambda}} , \quad (\text{A2-24})$$

et compte tenu de la symétrie de translation (des sites) :

$$(C_{(0,\varepsilon),(-j,\varepsilon)})_{\lambda\mu} = \overline{\langle \mathbf{S}_{(0,\varepsilon)} \cdot \mathbf{S}_{(j,\varepsilon)} \rangle_{\mu\lambda}} . \quad (\text{A2-25})$$

Nous pouvons donc écrire sous forme matricielle :

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\varepsilon)}) = (C_{(0,\varepsilon),(-i,\varepsilon)})^T , \quad (\text{A2-26})$$

de sorte qu'en définitive :

$$(C_{(0,\varepsilon),(i,\varepsilon)}) = ((\mathcal{T}_{\varepsilon})^T (\mathcal{T}_{-\varepsilon})^T)^{|i|} (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) . \quad (\text{A2-27})$$

Nous définissons, d'une façon générale, la matrice :

$$(S_{\varepsilon\eta}) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} (C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)}) , \quad (\text{A2-28})$$

qui peut donc s'écrire ici :

$$(S_{\varepsilon\varepsilon}) = (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) + \sum_{i=1}^{+\infty} \left\{ (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) ((\mathcal{T}_{-\varepsilon}) (\mathcal{T}_{\varepsilon}))^i + ((\mathcal{T}_{\varepsilon})^T (\mathcal{T}_{-\varepsilon})^T)^i (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) \right\} . \quad (\text{A2-29})$$

Compte tenu de la remarque, la somme sur i est convergente et nous avons :

$$\begin{aligned} (S_+) &= (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) \\ &+ (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) (\mathcal{T}_{-\varepsilon})(\mathcal{T}_{\varepsilon}) \{(\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_{-\varepsilon})(\mathcal{T}_{\varepsilon})\}^{-1} \\ &+ (\mathcal{T}_{\varepsilon})^T (\mathcal{T}_{-\varepsilon})^T \{(\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_{\varepsilon})^T (\mathcal{T}_{-\varepsilon})^T\}^{-1} (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}), \end{aligned} \quad (A2-30)$$

ou encore, après réarrangement :

$$\begin{aligned} (S_+) &= \frac{1}{2} \left\{ [(C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) \{(\mathcal{J}) + (\mathcal{T}_{-\varepsilon})(\mathcal{T}_{\varepsilon})\} \{(\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_{-\varepsilon})(\mathcal{T}_{\varepsilon})\}^{-1}] \right. \\ &\quad \left. + \text{Transposée} \right\}. \end{aligned} \quad (A2-31)$$

$\varepsilon = +1, \eta = -1$:

$i > 0$:

(A2-13) s'écrit :

$$(C_{(0,1),(0,-1)}) = (C_{(0,1),(i-1,-1)}) (\mathcal{T}_1)(\mathcal{T}_{-1}), \quad (A2-32)$$

ou encore, compte tenu de la structure de la chaîne (fig. II-1) :

$$(C_{(0,1),(0,-1)}) = (C_{(0,1),(1,-1)}) ((\mathcal{T}_1)(\mathcal{T}_{-1}))^{i-1}. \quad (A2-33)$$

$i \leq 0$:

Pour $i < 0$, nous notons tout d'abord que :

$$(C_{(0,1),(i,-1)}) = (C_{(0,-1),(i,-1)})^T. \quad (A2-34)$$

Nous procédons ensuite comme dans le cas ($\varepsilon\eta = 1, i < 0$) et nous obtenons :

$$(C_{(0,1),(i,-1)}) = ((\mathcal{T}_1)^T (\mathcal{T}_{-1})^T)^{|i|} (\mathcal{T}_1)^T (C_{(0,-1),(0,-1)}). \quad (A2-35)$$

Cette relation peut à son tour être étendue au cas où $|i| = 0$.

En sommant sur toutes les valeurs de i , nous trouvons :

$$\begin{aligned} (S_{+-}) &= (C_{(0,1),(0,1)}) (\mathcal{T}_{-1}) \{(\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_1)^T (\mathcal{T}_{-1})^T\}^{-1} \\ &+ [(C_{(0,-1),(0,-1)}) (\mathcal{T}_1) \{(\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_{-1})(\mathcal{T}_1)\}^{-1}]^T. \end{aligned} \quad (A2-36)$$

$\varepsilon = -1, \eta = +1$:

Nous remarquons que, nous passons du calcul de la somme (S_{+}) à celui de la somme (S_{-}), en inversant l'ordre des vecteurs spin au sein de chaque corrélation ainsi que l'ordre des sommations. Le premier changement se traduit par la transposition de toutes les matrices ($C_{(0,\varepsilon),(i,\eta)}$) ; le deuxième est sans effet. Nous avons donc :

$$(S_{-}) = (S_{+})^T . \quad (\text{A2-37})$$

En utilisant les matrices ($S_{\varepsilon\eta}$) que nous venons de calculer, l'expression (A2-5) de la susceptibilité s'écrit :

$$\chi = \frac{\beta}{3} \sum_{\varepsilon,\eta} (G_{\varepsilon})^T (S_{\varepsilon\eta}) (G_{\eta}) . \quad (\text{A2-38})$$

Nous remarquons que :

$$(G_{\varepsilon})^T (C_{(0,\varepsilon),(0,\varepsilon)}) = (g)^T , \quad (\text{A2-39})$$

où (g) est la matrice-ligne, d'élément courant g_{λ} . Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \chi = \frac{\beta}{3} \left\{ (g)^T \left[\frac{1}{2} \{ (\mathcal{J}) + 2(\mathcal{T}_1) + (\mathcal{T}_{-1})(\mathcal{T}_1) \} \{ (\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_{-1})(\mathcal{T}_1) \}^{-1} (G_1) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2} \{ (\mathcal{J}) + 2(\mathcal{T}_{-1}) + (\mathcal{T}_1)(\mathcal{T}_{-1}) \} \{ (\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_1)(\mathcal{T}_{-1}) \}^{-1} (G_{-1}) \right] \right. \\ \left. + \text{Transposée} \right\} , \quad (\text{A2-40}) \end{aligned}$$

ou encore, puisque l'expression à transposer est en fait un réel :

$$\begin{aligned} \chi = \frac{\beta}{3} \left\{ (g)^T \left[\{ (\mathcal{J}) + 2(\mathcal{T}_1) + (\mathcal{T}_{-1})(\mathcal{T}_1) \} \{ (\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_{-1})(\mathcal{T}_1) \}^{-1} (G_1) \right. \right. \\ \left. \left. + \{ (\mathcal{J}) + 2(\mathcal{T}_{-1}) + (\mathcal{T}_1)(\mathcal{T}_{-1}) \} \{ (\mathcal{J}) - (\mathcal{T}_1)(\mathcal{T}_{-1}) \}^{-1} (G_{-1}) \right] \right\} . \quad (\text{A2-41}) \end{aligned}$$

Annexe 3

**FONCTION DE PARTITION ET CORRELATIONS EN
CHAMP NUL, POUR UNE CHAÎNE ALEATOIRE ALTERNEE,
CLASSIQUE-QUANTIQUE, DE LONGUEUR FINIE,
PRESENTANT UN COUPLAGE DE HEISENBERG**

La fonction de partition en champ nul $Z_{N+1}(0)$ de cette chaîne qui débute à S_0 et se termine à S_{N+1} , s'écrit :

$$Z_{N+1}(0) = \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} \int dS_1 \text{Tr}_{s_1} \dots \int dS_i \text{Tr}_{s_i} \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} \\ \times \int dS_{N+1} \exp(-\beta \mathcal{H}^{\text{éch.}}) , \quad (\text{A3-1})$$

où $\mathcal{H}^{\text{éch.}}$ est donné par (I-3) et (II-12) et où $\int dS_i$ a la même signification que dans le modèle de Fisher (I-1). Le symbole Tr_{s_i} représente la somme sur tous les états d'une base complète de s_i .

Compte tenu de la commutativité des opérateurs $H_i^{\text{éch.}}$, nous avons :

$$\exp(-\beta \mathcal{H}^{\text{éch.}}) = \prod_{i=0}^N \exp(-\beta H_i^{\text{éch.}}) , \quad (\text{A3-2})$$

ce qui permet d'écrire :

$$Z_{N+1}(0) = \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} (\exp(-\beta H_0^{\text{éch.}})) \dots \int dS_i \text{Tr}_{s_i} (\exp(-\beta H_i^{\text{éch.}})) \dots \\ \times \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} (\exp(-\beta H_N^{\text{éch.}})) \int dS_{N+1} . \quad (\text{A3-3})$$

Nous sommes donc ramenés au calcul des traces élémentaires ; nous pouvons écrire :

$$\text{Tr}_{s_i} (\exp(-\beta H_i^{\text{éch.}})) = \text{Tr}_{s_i} (\exp(-\beta J_i \mathcal{S}_i \cdot s_i)) , \quad (\text{A3-4})$$

où le vecteur \mathcal{S}_i est donné par :

$$\mathcal{S}_i = (1 + \alpha_i) S_i + (1 - \alpha_i) S_{i+1} . \quad (\text{A3-5})$$

Si $\Theta_{i,i+1}$ représente l'angle entre les vecteurs S_i et S_{i+1} (§I-1-1), nous avons :

$$\mathcal{S}_i = \sqrt{2(1 + \alpha_i^2)} \sqrt{1 + \eta_i \cos \Theta_{i,i+1}} , \quad (\text{A3-6})$$

où nous avons posé :

$$\eta_i = \frac{1 - \alpha_i^2}{1 + \alpha_i^2} . \quad (\text{A3-7})$$

En prenant le support de \mathcal{S}_i comme axe de quantification, la trace courante s'écrit alors :

$$\text{Tr}_{s_i} (\exp(-\beta H_i^{\text{éch.}})) = \sum_{\sigma=s_i}^{+s_i} \exp(\sigma \lambda_i \sqrt{1 + \eta_i \cos \Theta_{i,i+1}}) , \quad (\text{A3-8})$$

où :

$$\lambda_i = -\beta J_i \sqrt{2(1 + \alpha_i^2)} . \quad (\text{A3-9})$$

Comme cette trace ne dépend que de l'angle formé par les vecteurs S_i et S_{i+1} , son développement en harmoniques sphériques (Ay-71) prend la forme simplifiée :

$$\text{Tr}_{s_i} (\exp(-\beta H_i^{\text{éch.}})) = \sum_{\ell_i} \sum_{m_i=-\ell_i}^{+\ell_i} A_{\ell_i}(\lambda_i, \eta_i, s_i) Y_{\ell_i}^{m_i}(S_i) Y_{\ell_i}^{-m_i}(S_{i+1}) , \quad (\text{A3-10})$$

où les coefficients A_{ℓ} sont donnés par :

$$A_{\ell}(\lambda_i, \eta_i, s_i) = 2\pi \sum_{\sigma=-s_i}^{+s_i} \int_{-1}^{+1} \exp(\sigma \lambda_i \sqrt{1 + \eta_i x}) \mathcal{P}_{\ell}(x) dx \quad . \quad (\text{A3-11})$$

Avec ces conventions, la fonction de partition s'écrit :

$$\begin{aligned} Z_{N+1}(0) &= \sum_{\ell_0, m_0} \dots \sum_{\ell_i, m_i} \dots \sum_{\ell_N, m_N} A_{\ell_0}(\nu_0) \dots A_{\ell_i}(\nu_i) \dots A_{\ell_N}(\nu_N) \\ &\times \int dS_0 Y_{\ell_0}^{m_0}(S_0) \int dS_1 Y_{\ell_0}^{-m_0}(S_1) Y_{\ell_1}^{m_1}(S_1) \dots \int dS_i Y_{\ell_{i-1}}^{-m_{i-1}}(S_i) Y_{\ell_i}^{m_i}(S_i) \dots \\ &\times \dots \int dS_N Y_{\ell_{N-1}}^{-m_{N-1}}(S_N) Y_{\ell_N}^{m_N}(S_N) \int dS_{N+1} Y_{\ell_N}^{-m_N}(S_{N+1}) \quad , \quad (\text{A3-12}) \end{aligned}$$

où l'indice ν_i remplace l'ensemble (λ_i, η_i, s_i) .

L'utilisation des propriétés des fonctions sphériques, dans les mêmes conditions que dans le paragraphe I-1-1, permet de réduire l'expression (A3-12) à :

$$Z_{N+1}(0) = 4\pi \prod_{i=0}^N A_0(\nu_i) \quad , \quad (\text{A3-13})$$

avec, d'après (A3-11) :

$$A_0(\nu_i) = \frac{4\pi}{\lambda_i^2 \eta_i} \sum_{\sigma=-s_i}^{+s_i} \sum_{\epsilon=\pm 1} \frac{\epsilon}{\sigma^2} (\nu_{i,\sigma,\epsilon} - 1) \exp(\nu_{i,\sigma,\epsilon}) \quad , \quad (\text{A3-14})$$

où nous avons posé :

$$\nu_{i,\sigma,\epsilon} = \sigma \lambda_i \sqrt{1 + \epsilon \eta_i} \quad . \quad (\text{A3-15})$$

Nous allons maintenant évaluer les corrélations $\langle S_i \cdot S_j \rangle$, $\langle S_i \cdot s_j \rangle$, $\langle s_i \cdot S_j \rangle$ et $\langle s_i \cdot s_j \rangle$ correspondant à l'hamiltonien d'échange défini plus haut. Le couplage de Heisenberg laissant l'espace des spins isotrope, nous avons :

$$\langle S_i \cdot S_j \rangle = 3 \langle S_i^z S_j^z \rangle \quad , \quad (\text{A3-16})$$

et des relations analogues pour $\langle S_i \cdot s_j \rangle$, $\langle s_i \cdot S_j \rangle$ et $\langle s_i \cdot s_j \rangle$. En posant :

$$U_i^0 = 1, \quad U_i^1 = S_i^z, \quad U_i^2 = s_i^z \quad (\text{A3-17})$$

et :

$$\begin{aligned} U_{ij N+1}^{\alpha\alpha'} = & \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} \int dS_1 \text{Tr}_{s_1} \dots \int dS_{i-1} \text{Tr}_{s_{i-1}} \int dS_i \text{Tr}_{s_i} (U_i^\alpha) \int dS_{i+1} \text{Tr}_{s_{i+1}} \\ & \times \dots \int dS_{j-1} \text{Tr}_{s_{j-1}} \int dS_j \text{Tr}_{s_j} (U_j^{\alpha'}) \int dS_{j+1} \text{Tr}_{s_{j+1}} \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} \\ & \times \int dS_{N+1} \exp(-\beta \mathcal{H}^{\text{éch.}}) \quad , \end{aligned} \quad (\text{A3-18})$$

où nous considérons que chaque opérateur Tr_{s_i} porte sur toute la partie du second membre située à sa droite.

Les corrélations entre les composantes z des spins s'écrivent alors :

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ij N+1}^{11}}{U_{ij N+1}^{00}} \quad , \quad (\text{A3-19})$$

$$\langle S_i^z s_j^z \rangle = \frac{U_{ij N+1}^{12}}{U_{ij N+1}^{00}} \quad , \quad (\text{A3-20})$$

$$\langle s_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ij N+1}^{21}}{U_{ij N+1}^{00}} \quad , \quad (\text{A3-21})$$

$$\langle s_i^z s_j^z \rangle = \frac{U_{ij N+1}^{22}}{U_{ij N+1}^{00}} \quad . \quad (\text{A3-22})$$

Nous notons que $U_{ij N+1}^{00}$ représente la fonction de partition de la chaîne, en champ nul, calculée plus haut. En utilisant l'expression (A3-18) ainsi que la propriété de commutation des opérateurs $H_i^{\text{éch.}}$, la quantité $U_{ij N+1}^{11}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
U_{ij N+1}^{11} = & \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} (\exp(-\beta H_0^{\text{éch.}})) \int dS_1 \text{Tr}_{s_1} (\exp(-\beta H_1^{\text{éch.}})) \dots \\
& \times \dots \int dS_{i-1} \text{Tr}_{s_{i-1}} (\exp(-\beta H_{i-1}^{\text{éch.}})) \int dS_i S_i^z \text{Tr}_{s_i} (\exp(-\beta H_i^{\text{éch.}})) \\
& \times \int dS_{i+1} \text{Tr}_{s_{i+1}} (\exp(-\beta H_{i+1}^{\text{éch.}})) \dots \int dS_{j-1} \text{Tr}_{s_{j-1}} (\exp(-\beta H_{j-1}^{\text{éch.}})) \\
& \times \int dS_j S_j^z \text{Tr}_{s_j} (\exp(-\beta H_j^{\text{éch.}})) \int dS_{j+1} \text{Tr}_{s_{j+1}} (\exp(-\beta H_{j+1}^{\text{éch.}})) \dots \\
& \times \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} (\exp(-\beta H_N^{\text{éch.}})) \int dS_{N+1} . \tag{A3-23}
\end{aligned}$$

En tenant compte de (I-29) et en suivant la méthode exposée au paragraphe I-1-1, nous obtenons :

$$U_{ij N+1}^{11} = \frac{4\pi}{3} \left(\prod_{k_1=0}^{i-1} A_0(\nu_{k_1}) \right) \left(\prod_{k_2=i}^{j-1} A_1(\nu_{k_2}) \right) \left(\prod_{k_3=j}^N A_0(\nu_{k_3}) \right) , \tag{A3-24}$$

où, d'après (A3-11), $A_1(\nu_i)$ est donné par :

$$\begin{aligned}
A_1(\nu_i) = & \frac{4\pi}{(\lambda_i^2 \eta_i)^2} \sum_{\sigma=-s_i}^{+s_i} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \frac{\varepsilon}{\sigma} \left(v_{i,\sigma,\varepsilon}^3 - 3v_{i,\sigma,\varepsilon}^2 \right. \\
& \left. + (6 - (\sigma \lambda_i)^2) (v_{i,\sigma,\varepsilon} - 1) \right) \exp(v_{i,\sigma,\varepsilon}) . \tag{A3-25}
\end{aligned}$$

De sorte qu'avec les relations (A3-19 et 24) et en posant :

$$P_k = \frac{A_1(\nu_k)}{A_0(\nu_k)} , \tag{A3-26}$$

il vient :

$$\langle S_i \cdot S_j \rangle = \prod_{k=i}^{j-1} P_k . \tag{A3-27}$$

Nous pouvons remarquer ici que P_i n'est pas autre chose que la corrélation $\langle S_i \cdot S_{i+1} \rangle$.

Remarque 1:

La signification du symbole \prod ne pose pas de problèmes pour $j \gg i+2$. Pour $j=i+2$, le produit ne comporte qu'un seul terme P_{j-1} ($=P_{i+1}$). Pour $j=i+1$, le symbole perd en principe toute signification. En fait, nous sommes en présence d'une quantité traduisant la corrélation entre deux spins classiques seconds voisins (séparés par un seul spin quantique). L'examen détaillé de cette situation montre que l'on doit en fait, dans ce cas, attribuer au produit la valeur unité. Cette convention sera applicable chaque fois qu'un produit de ce type interviendra dans une formule (par exemple: (A3-42 et 43)).

Le calcul de la corrélation $\langle S_i \cdot s_j \rangle$ nécessite l'évaluation de l'expression :

$$\begin{aligned}
 U_{ij}^{12} = & \int dS_0 \operatorname{Tr}_{s_0} (\exp(-\beta H_0^{\text{éch.}})) \int dS_1 \operatorname{Tr}_{s_1} (\exp(-\beta H_1^{\text{éch.}})) \dots \\
 & \times \dots \int dS_{i-1} \operatorname{Tr}_{s_{i-1}} (\exp(-\beta H_{i-1}^{\text{éch.}})) \int dS_i S_i^z \operatorname{Tr}_{s_i} (\exp(-\beta H_i^{\text{éch.}})) \\
 & \times \int dS_{i+1} \operatorname{Tr}_{s_{i+1}} (\exp(-\beta H_{i+1}^{\text{éch.}})) \dots \int dS_{j-1} \operatorname{Tr}_{s_{j-1}} (\exp(-\beta H_{j-1}^{\text{éch.}})) \\
 & \times \int dS_j \operatorname{Tr}_{s_j} (s_j^z \exp(-\beta H_j^{\text{éch.}})) \int dS_{j+1} \operatorname{Tr}_{s_{j+1}} (\exp(-\beta H_{j+1}^{\text{éch.}})) \dots \\
 & \times \dots \int dS_N \operatorname{Tr}_{s_N} (\exp(-\beta H_N^{\text{éch.}})) \int dS_{N+1} \dots \quad (A3-28)
 \end{aligned}$$

A ce stade, il faut exprimer la nouvelle trace :

$$\mathcal{F}_j = \operatorname{Tr}_{s_j} (s_j^z \exp(-\beta H_j^{\text{éch.}})) , \quad (A3-29)$$

soit, en utilisant (A3-6) et en introduisant le nouveau repère orthonormé (i'_j, j'_j, k'_j) dans lequel k'_j est orienté suivant la direction de \mathcal{S}_j :

$$\mathcal{F}_j = \operatorname{Tr}_{s_j} \left(k'_j \cdot (k'_j \tilde{s}_j^z + i'_j \tilde{s}_j^x + j'_j \tilde{s}_j^y) \exp(-\beta J_j \mathcal{S}_j \tilde{s}_j^z) \right) , \quad (A3-30)$$

où $\tilde{s}_j^x, \tilde{s}_j^y, \tilde{s}_j^z$ sont les composantes de s_j suivant i'_j, j'_j, k'_j . Dans ces conditions, les opérateurs \tilde{s}_j^x et \tilde{s}_j^y n'ont pas d'éléments diagonaux. \mathcal{T}_j se réduit donc à :

$$\mathcal{T}_j = \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{k}'_j \operatorname{Tr}_{s_j} \left(\tilde{s}_j^z \exp(-\beta J_j \mathcal{S}_j \tilde{s}_j^z) \right), \quad (\text{A3-31})$$

avec :

$$\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{k}'_j = \frac{(1 + \alpha_j) S_j^z + (1 - \alpha_j) S_{j+1}^z}{\sqrt{2(1 + \alpha_j^2 + (1 - \alpha_j^2) \cos \Theta_{j,j+1})}}. \quad (\text{A3-32})$$

Par conséquent, en utilisant les relations (I-29), (A3-7 et 9), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_j = & -\beta J_j \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left\{ (1 + \alpha_j) Y_1^0(S_j) + (1 - \alpha_j) Y_1^0(S_{j+1}) \right\} \\ & \times \sum_{\sigma=-s_j}^{+s_j} \sigma \frac{\exp(\sigma \lambda_j \sqrt{1 + \eta_j \cos \Theta_{j,j+1}})}{\lambda_j \sqrt{1 + \eta_j \cos \Theta_{j,j+1}}}. \quad (\text{A3-33}) \end{aligned}$$

Dans cette expression, la somme sur σ ne dépend que de l'angle $\Theta_{j,j+1}$ que forment entre eux les vecteurs S_j et S_{j+1} . Nous pouvons donc la développer à son tour en une somme infinie de produits de deux fonctions sphériques :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_j = & -\beta J_j \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left\{ (1 + \alpha_j) Y_1^0(S_j) + (1 - \alpha_j) Y_1^0(S_{j+1}) \right\} \\ & \times \sum_{\ell_j} \sum_{m_j=-\ell_j}^{+\ell_j} B_{\ell_j}(\nu_j) Y_{\ell_j}^{m_j}(S_j) Y_{\ell_j}^{-m_j}(S_{j+1}), \quad (\text{A3-34}) \end{aligned}$$

avec :

$$B_\ell(\nu_j) = 2\pi \sum_{\sigma=-s_j}^{+s_j} \sigma^2 \int_{-1}^{+1} \frac{\exp(\sigma \lambda_j \sqrt{1 + \eta_j x})}{\sigma \lambda_j \sqrt{1 + \eta_j x}} \mathcal{P}_\ell(x) dx \quad . \quad (\text{A3-35})$$

En utilisant encore la même méthode, nous obtenons :

$$U_{ij N+1}^{12} = \left(\prod_{k_1=0}^{i-1} A_0(\nu_{k_1}) \right) \left(\prod_{k_2=i}^{j-1} A_1(\nu_{k_2}) \right) \times \left(-\frac{4\pi}{3} \beta J_j \{ (1 + \alpha_j) B_0(\nu_j) + (1 - \alpha_j) B_1(\nu_j) \} \right) \left(\prod_{k_3=j+1}^N A_0(\nu_{k_3}) \right) \quad (\text{A3-36})$$

où, d'après (A3-35) :

$$B_0(\nu_j) = \frac{4\pi}{\lambda_j^2 \eta_j} \sum_{\sigma=-s_j}^{+s_j} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \varepsilon \exp(\nu_{j,\sigma,\varepsilon}) \quad , \quad (\text{A3-37})$$

$$B_1(\nu_j) = \frac{4\pi}{(\lambda_j^2 \eta_j)^2} \sum_{\sigma=-s_j}^{+s_j} \sum_{\varepsilon=\pm 1} \frac{\varepsilon}{\sigma^2} \left(\nu_{j,\sigma,\varepsilon}^2 - 2\nu_{j,\sigma,\varepsilon} + 2 - (\sigma \lambda_j)^2 \right) \exp(\nu_{j,\sigma,\varepsilon}) \quad , \quad (\text{A3-38})$$

de sorte qu'en posant :

$$Q_{j,\varepsilon} = -\beta J_j \frac{(1 + \varepsilon \alpha_j) B_0(\nu_j) + (1 - \varepsilon \alpha_j) B_1(\nu_j)}{A_0(\nu_j)} \quad , \quad (\text{A3-39})$$

il vient :

$$U_{ij N+1}^{12} = \left(\prod_{k_1=0}^{i-1} A_0(\nu_{k_1}) \right) \left(\prod_{k_2=i}^{j-1} A_1(\nu_{k_2}) \right) Q_{j,1} \left(\prod_{k_3=j+1}^N A_0(\nu_{k_3}) \right) \quad . \quad (\text{A3-40})$$

Compte tenu des relations (A3-20 et 26), nous avons :

$$\langle S_{i \cdot s_j} \rangle = \left(\prod_{k=i}^{j-1} P_k \right) Q_{j,1} \quad . \quad (\text{A3-41})$$

Un cheminement analogue nous permet de calculer $\langle s_i \cdot S_j \rangle$ et $\langle s_i \cdot s_j \rangle$:

$$\langle s_i \cdot S_j \rangle = Q_{i,-1} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right), \quad (\text{A3-42})$$

$$\langle s_i \cdot s_j \rangle = Q_{i,-1} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right) Q_{j,1}. \quad (\text{A3-43})$$

Remarque 2 :

Tous ces résultats peuvent être étendus au cas où certains spins quantiques (éventuellement la totalité) sont assez grands pour être traités comme des spins classiques.

Annexe 4

**SUSCEPTIBILITE INITIALE POUR UNE CHAINE ALTERNEE
CLASSIQUE-QUANTIQUE, INFINIE, PRESENTANT UN COUPLAGE
DE HEISENBERG A CARACTERE ALEATOIRE**

La susceptibilité χ s'écrit :

$$\chi = \frac{\beta}{3} (X_1 + X_2 + X_3 + X_4) , \quad (\text{A4-1})$$

avec :

$$X_1 = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left(G_i^2 + g_i^2 s_i(s_i + 1) \right) , \quad (\text{A4-2})$$

$$X_2 = 2 \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \left(G_i P_i \left\{ \prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right\} G_j \right) , \quad (\text{A4-3})$$

$$X_3 = 2 \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \left(g_i Q_{i,-1} \left\{ \prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right\} g_j Q_{j,1} \right) , \quad (\text{A4-4})$$

$$X_4 = 2 \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left(G_i g_i Q_{i,1} + \sum_{j>i} \left(g_i Q_{i,-1} \left\{ \prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right\} G_j \right. \right. \\ \left. \left. + G_i P_i \left\{ \prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right\} g_j Q_{j,1} \right) \right) . \quad (\text{A4-5})$$

Soit F_i une quantité aléatoire dont la valeur dépend des paramètres associés à la cellule i . Nous définissons la valeur moyenne \overline{F} de F_i , sur la distribution, par :

$$\overline{F} = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N F_i . \quad (\text{A4-6})$$

Dans ces conditions, X_1 s'écrit simplement :

$$X_1 = \overline{G^2 + g^2 s(s+1)} . \quad (\text{A4-7})$$

Comme nous avons exclu toute corrélation entre des paramètres relatifs à des indices distincts, nous avons :

$$\overline{\prod_{k=i+1}^{j-1} P_k} = \overline{P}^{j-i-1} , \quad (\text{A4-8})$$

qui reste valable même pour $j = i+1$, si l'on tient compte de la remarque 1 de l'annexe 3. Les quantités X_2 à X_4 sont de la forme :

$$Y = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N x_i \sum_{j>i} \left(y_j \prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right) . \quad (\text{A4-9})$$

Pour $j-i$ fixé, lorsque nous décrivons toutes les valeurs de i , le produit sur k prend des valeurs différentes décorréliées des valeurs de x_i et y_i . Nous pouvons donc le remplacer par sa valeur moyenne \overline{P} à la puissance $j-i-1$. Nous avons donc :

$$Y = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N x_i \sum_{j>i} y_j \overline{P}^{j-i-1} . \quad (\text{A4-10})$$

En raison de l'indépendance des paramètres, x_i puis y_i peuvent être à leur tour remplacés par des valeurs moyennes de sorte que :

$$Y = \frac{\overline{x} \overline{y}}{1 - \overline{P}} , \quad (\text{A4-11})$$

où nous avons tenu compte des propriétés de la série géométrique et du fait que, sauf au zéro absolu, P , qui est une corrélation entre vecteurs unitaires, a toujours un module inférieur à 1. Dans ces conditions, nous avons :

$$X_2 = 2 \frac{\overline{GP} \overline{G}}{1 - \overline{P}}, \quad (\text{A4-12})$$

$$X_3 = 2 \frac{\overline{gQ_{-1}} \overline{gQ_1}}{1 - \overline{P}}, \quad (\text{A4-13})$$

et :

$$X_4 = 2 \left(\overline{gGQ_1} + \frac{\overline{gQ_{-1}} \overline{G} + \overline{GP} \overline{gQ_1}}{1 - \overline{P}} \right). \quad (\text{A4-14})$$

En définitive, nous avons après réarrangement :

$$\chi = \frac{\beta}{3} \left\{ \overline{G^2} + \overline{g^2} s(s+1) + 2 \frac{\overline{GP} \overline{G} + \overline{gQ_{-1}} \overline{gQ_1} + \overline{gGQ_1} - \overline{P} \overline{gGQ_1} + \overline{gQ_{-1}} \overline{G} + \overline{GP} \overline{gQ_1}}{1 - \overline{P}} \right\}. \quad (\text{A4-15})$$

Remarque :

Cette dernière expression est formellement conservée lorsque l'on traite classiquement tout ou partie des spins dits quantiques.

Annexe 5

**COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE D'UNE CHAINE
REGULIERE ALTERNEE CLASSIQUE-QUANTIQUE, INFINIE,
PRESENTANT UN COUPLAGE DE HEISENBERG**

En appelant :

$$r = \frac{G}{gs} , \quad (\text{A5-1})$$

le rapport des moments portés par les deux types de spin, l'expression (II-23) de la susceptibilité prend la forme :

$$\chi = \frac{\beta(gs)^2}{3} \left(r^2 + \frac{s+1}{s} + 2 \frac{r^2 P + r \frac{Q_1 + Q_{-1}}{s} + \frac{Q_1 Q_{-1}}{s^2}}{1 - P} \right) , \quad (\text{A5-2})$$

Nous nous intéressons au comportement de P et Q_ε ($\varepsilon = \pm 1$), dans la limite des basses températures. Leurs expressions (A3-26 et 39) font intervenir les coefficients A_ℓ et B_ℓ (avec $\ell = 0, 1$), comportant eux-mêmes (A3-11 et 35) des exponentielles d'argument :

$$v_{\sigma, \varepsilon} = \sigma \lambda \sqrt{1 + \varepsilon \eta} , \quad \varepsilon = \pm 1 , \quad \sigma \in [-s, +s] . \quad (\text{A5-3})$$

$0 < \alpha < 1$: les interactions consécutives sont de même signe

Compte tenu des définitions (A3-7 et 9) de η et λ , la valeur maximale de cet argument s'écrit :

$$u = 2\beta |J|s . \quad (\text{A5-4})$$

Dans la suite de cette annexe, nous ne retiendrons, dans les divers

développements, que les exponentielles de l'argument u . L'argument immédiatement inférieur diffère de celui-ci par la quantité $-2\beta|J|$. L'approximation faite suppose donc que la température soit très inférieure à $|J|$. Lorsque, ultérieurement, nous explorerons le domaine des grandes valeurs de s , nous serons amenés à bloquer la valeur du produit J_s (noté \mathcal{J}), ce qui aura pour conséquence de réduire l'amplitude de J et, partant, le domaine de validité des expressions obtenues dans ce cadre (une annexe spéciale, notée A6, sera précisément consacrée au cas où s devient classique). Nous avons :

$$A_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{8\pi}{1 - \alpha^2} \frac{\exp(u)}{u^2} (u - 1) \quad , \quad (\text{A5-5})$$

et :

$$A_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{8\pi}{(1 - \alpha^2)^2} \frac{\exp(u)}{u^4} [(1 - \alpha^2) u^3 - (5 - \alpha^2) u^2 + 12(u - 1)] \quad . \quad (\text{A5-6})$$

Compte tenu de la définition (A3-26) de P , nous avons :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 1 - \frac{4}{1 - \alpha^2} \frac{1}{u} \left(1 - \frac{2}{u} + \frac{1}{u^2} \right) \quad , \quad (\text{A5-7})$$

ce qui permet d'écrire :

$$\frac{1}{1 - P} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} (1 - \alpha^2) \left(1 + \frac{2}{u} + \frac{3}{u^2} \right) \frac{u}{4} \quad , \quad (\text{A5-8})$$

et :

$$\frac{P}{1 - P} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} (1 - \alpha^2) \left(1 - \frac{1 + \alpha^2}{1 - \alpha^2} \frac{2}{u} + \frac{3}{u^2} \right) \frac{u}{4} \quad . \quad (\text{A5-9})$$

Nous avons d'autre part :

$$B_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{8\pi s^2}{1 - \alpha^2} \frac{\exp(u)}{u^2} \quad , \quad (\text{A5-10})$$

et :

$$B_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{8\pi s^2}{(1 - \alpha^2)^2} \frac{\exp(u)}{u^4} [(1 - \alpha^2) u^2 - 4(u - 1)] \quad (\text{A5-11})$$

Compte tenu de la définition (A3-39) de Q_ϵ , nous pouvons écrire :

$$\frac{Q_\epsilon}{s} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\frac{J}{|J|} \left(1 - \frac{1 - \epsilon\alpha}{1 + \epsilon\alpha} \frac{1}{u} + \frac{1}{u^2} \right), \quad (\text{A5-12})$$

de sorte que, avec l'aide de (A5-8), il vient après réarrangement des termes :

$$\frac{Q_1 + Q_{-1}}{s(1 - P)} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\frac{J}{|J|} (1 - \alpha^2) \left(1 - \frac{3\alpha^2 - 1}{1 - \alpha^2} \frac{1}{u} \left(1 + \frac{2}{u} \right) \right) \frac{u}{2}, \quad (\text{A5-13})$$

et :

$$\frac{Q_1 Q_{-1}}{s^2(1 - P)} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} (1 - \alpha^2) \left(1 - \frac{4\alpha^2}{1 - \alpha^2} \frac{1}{u} - \frac{5\alpha^2 - 1}{1 - \alpha^2} \frac{2}{u^2} \right) \frac{u}{4}. \quad (\text{A5-14})$$

La susceptibilité χ s'écrit dans ces conditions :

$$\begin{aligned} \chi(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} & \frac{\beta^2 (gs)^2}{3} |J|s (1 - \alpha^2) \left(r - \frac{J}{|J|} \right)^2 \\ & + \frac{\beta (gs)^2}{3} \left(-(\alpha r)^2 + \frac{J}{|J|} r (3\alpha^2 - 1) - 2\alpha^2 + \frac{s+1}{s} \right) \\ & + \frac{(gs)^2}{12|J|s} \left(3r^2 (1 - \alpha^2) + 4r \frac{J}{|J|} (3\alpha^2 - 1) - 2(5\alpha^2 - 1) \right). \quad (\text{A5-15}) \end{aligned}$$

$J > 0$: tous les couplages sont alors antiferromagnétiques

* $r \neq 1$: les moments d'une même cellule ont des amplitudes différentes

Dans le cas général, le comportement dominant (de la susceptibilité) est donné par :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta^2 (gs)^2}{3} J_s (1 - \alpha^2) (r - 1)^2 \quad (\text{A5-16})$$

La susceptibilité diverge en T^{-2} et le produit χT en T^{-1} (fig.A5-1). Nous généralisons ainsi le résultat obtenu par Seiden (Se-83) lorsqu'il a traité le cas particulier $s=1/2$, $\alpha=0$ (pas d'alternance dans l'échange).

* $r=1$: les moments ont même amplitude.

Le premier terme du développement (A5-15) disparaît ; le terme dominant devient :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta (gs)^2}{3s} + \frac{(gs)^2 (1-\alpha^2)}{12Js} . \quad (\text{A5-17})$$

Le produit χT tend vers une limite finie lorsque T tend vers 0, diverge lorsque r n'est pas rigoureusement égal à 1 (fig.A5-2).

$J < 0$: tous les couplages sont alors ferromagnétiques

Dans le cas général, le comportement dominant (de la susceptibilité) est donné par :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta^2 (gs)^2}{3} |J|s (1-\alpha^2) (r+1)^2 . \quad (\text{A5-18})$$

et la susceptibilité diverge en T^{-2} (fig.A5-1) quelle que soit la valeur des moments sur les deux sites voisins et la nature (alternée ou non) des interactions d'échange.

$\alpha > 1$: si J est positif, chaque spin quantique est couplé ferromagnétiquement avec le spin classique qui le suit et antiferromagnétiquement avec celui qui le précède, et inversement si J est négatif.

Les états de plus basse énergie associés à ces deux situations sont représentés sur la figure II-7. Pour l'étude du comportement de la sus-

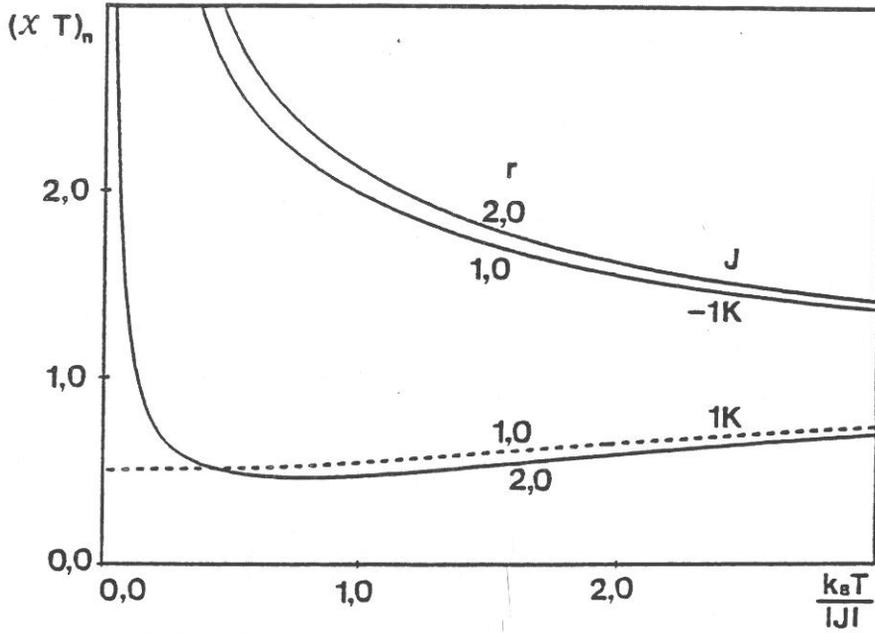


Fig.A5-1 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage de Heisenberg, pour diverses valeurs de r et J ($g=2$, $\alpha=0,5$).

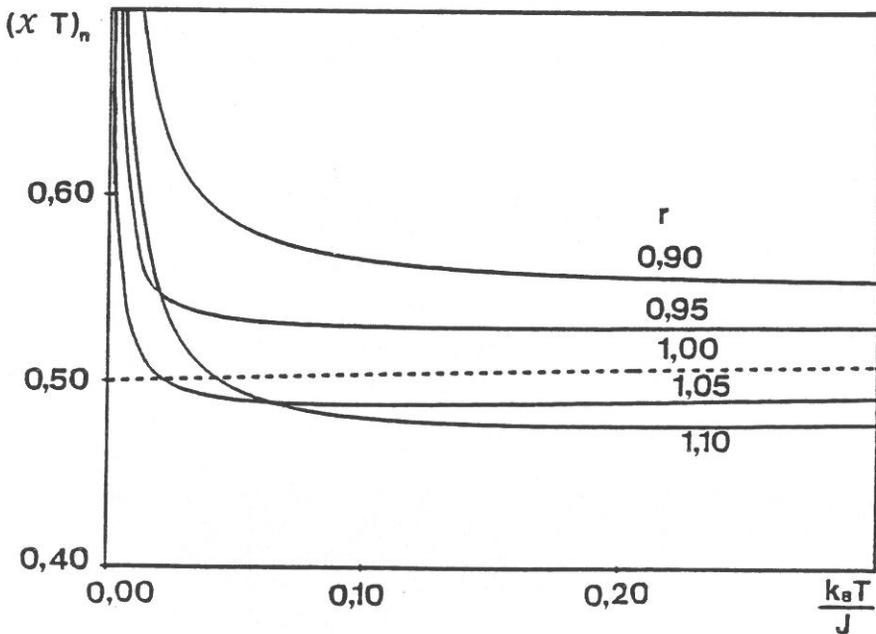


Fig.A5-2 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage de Heisenberg, pour diverses valeurs de r ($J > 0$, $g=2$, $\alpha=0,5$).

ceptibilité à basse température, nous procédons comme précédemment.

Ici, l'exposant dominant dans A_ℓ et B_ℓ , s'écrit :

$$w = \alpha u \quad , \quad (\text{A5-19})$$

de sorte que :

$$A_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{8\pi\alpha^2}{\alpha^2 - 1} \frac{\exp(w)}{w^2} (w - 1) \quad , \quad (\text{A5-20})$$

et :

$$A_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{8\pi\alpha^2}{(\alpha^2 - 1)^2} \frac{\exp(w)}{w^4} [(\alpha^2 - 1)w^3 - (5\alpha^2 - 1)w^2 + 12\alpha^2(w - 1)] \quad . \quad (\text{A5-21})$$

La remarque faite dans le cas $0 < \alpha < 1$ concernant la limite des grandes valeurs de s reste valable. Compte tenu de la définition (A3-26) de P , nous avons :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \left(1 - \frac{4\alpha^2}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{w} \right) \quad , \quad (\text{A5-22})$$

ce qui permet d'écrire :

$$\frac{1}{1 - P} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2\alpha^2}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{w} \right) \quad , \quad (\text{A5-23})$$

et :

$$\frac{P}{1 - P} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2\alpha^2}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{w} \right) \quad . \quad (\text{A5-24})$$

Nous avons d'autre part :

$$B_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{8\pi(\alpha s)^2}{\alpha^2 - 1} \frac{\exp(w)}{w^2} \quad , \quad (\text{A5-25})$$

et :

$$B_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{8\pi(\alpha s)^2}{(\alpha^2 - 1)^2} \frac{\exp(w)}{w^4} [(\alpha^2 - 1)w^2 - 4\alpha^2(w - 1)] \quad (A5-26)$$

Compte tenu de la définition (A3-39) de Q_ϵ , nous avons :

$$\frac{Q_\epsilon}{s} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \epsilon \frac{J}{|J|} \left(1 + \frac{1 - \epsilon \alpha}{1 + \epsilon \alpha} \frac{1}{w} \right), \quad (A5-27)$$

de sorte que, avec (A5-23) :

$$\frac{Q_1 + Q_{-1}}{s(1 - P)} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{J}{|J|} \frac{2\alpha}{\alpha^2 - 1} \left(1 + \frac{2\alpha^2}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{w} \right) \frac{1}{w}, \quad (A5-28)$$

et :

$$\frac{Q_1 Q_{-1}}{s^2(1 - P)} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{w} \right). \quad (A5-29)$$

La susceptibilité χ s'écrit dans ces conditions :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta(gs)^2}{3s} + \frac{(gs)^2 \left(\alpha r - \frac{J}{|J|} \right)^2}{3\alpha(\alpha^2 - 1) |J| s}. \quad (A5-30)$$

La susceptibilité suit donc une loi de Curie dans la limite des basses températures, quelle que soit la nature de l'interaction J : le produit χT tend vers une limite finie. Contrairement au cas où toutes les interactions sont antiferromagnétiques, le rôle de r n'est pas ici prépondérant (fig.A5-3 et 4). Tout au plus, pouvons-nous remarquer que la pente initiale de χT en fonction de T s'annule sans changer de signe pour $r=1/\alpha$ (fig.A5-5).

$\alpha=1$: la chaîne est dimérisée

D'après la relation (A3-7), nous constatons que η est nul ; la relation (A3-11) s'écrit alors :

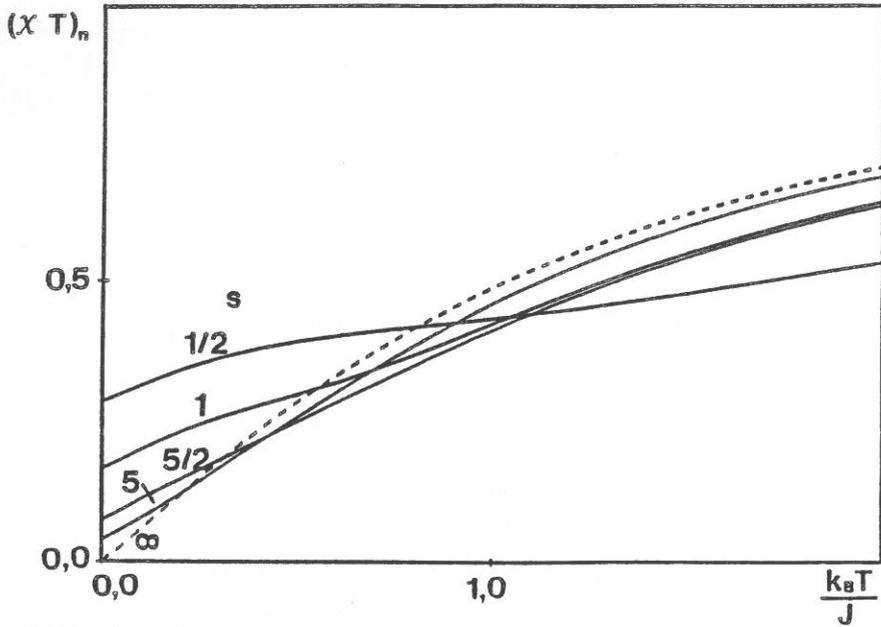


Fig.A5-3 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne (S,s) présentant un couplage de Heisenberg, pour diverses valeurs de s ($J > 0$, $g_s = 1$, $\alpha = 1,5$, $r = 2$; tireté : limite classique de s').

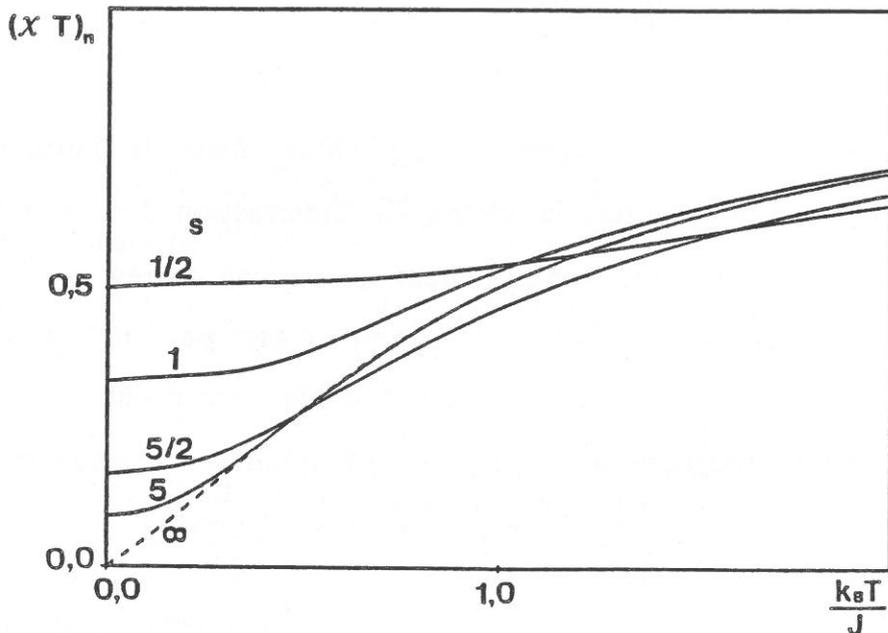


Fig.A5-4 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne (S,s) présentant un couplage de Heisenberg, pour diverses valeurs de s ($J > 0$, $g_s = 1$, $\alpha = 1,5$, $r = 1$; tireté : limite classique de s').

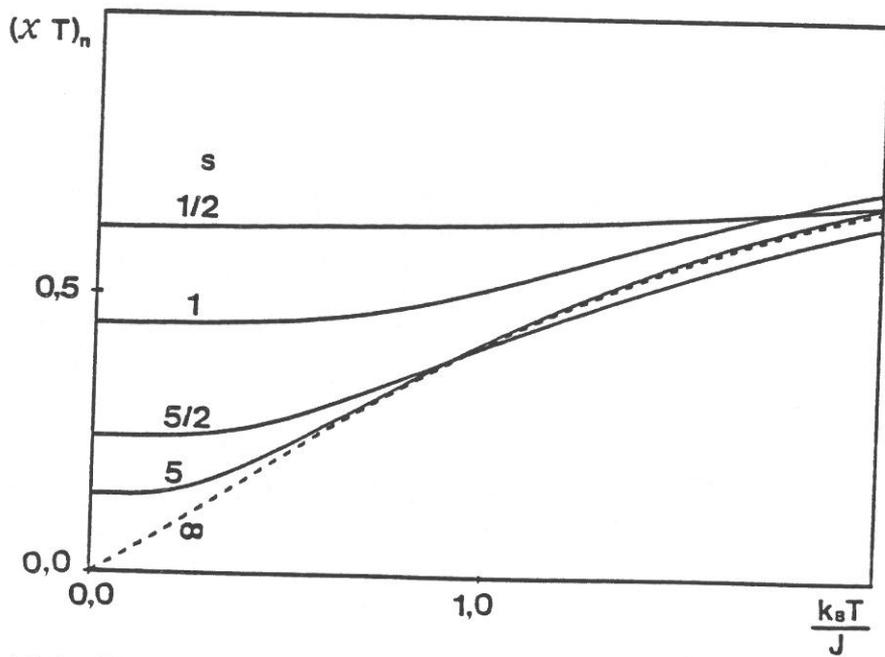


Fig.A5-5 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne (S,s) présentant un couplage de Heisenberg, pour diverses valeurs de s ($J > 0$, $g_s = 1$, $\alpha = 2$, $r = 0,5$; tireté : limite classique de s').

$$A_\ell(\nu) = 2\pi \sum_{\sigma=-s}^{+s} \exp(\sigma \lambda) \int_{-1}^{+1} \mathcal{P}_\ell(x) dx . \quad (\text{A5-31})$$

Nous en déduisons :

$$A_0(\nu) = 4\pi \sum_{\sigma=-s}^{+s} \exp(\sigma \lambda) , \quad (\text{A5-32})$$

et :

$$A_1(\nu) = 0 . \quad (\text{A5-33})$$

Compte tenu de ces relations et de la définition de P, il vient :

$$P = 0 . \quad (\text{A5-34})$$

De même, la relation (A3-35) se réduit à :

$$B_\ell(\nu) = 2\pi \sum_{\sigma=-s}^{+s} \sigma^2 \frac{\exp(\sigma \lambda)}{\sigma \lambda} \int_{-1}^{+1} \mathcal{P}_\ell(x) dx . \quad (\text{A5-35})$$

Nous en déduisons :

$$B_0(\nu) = 4\pi \sum_{\sigma=-s}^{+s} \sigma^2 \frac{\exp(\sigma \lambda)}{\sigma \lambda} , \quad (\text{A5-36})$$

et :

$$B_1(\nu) = 0 ; \quad (\text{A5-37})$$

de sorte que, d'après (A3-39), nous pouvons écrire ici :

$$\frac{Q_\epsilon}{s} = -\beta J s (1 + \epsilon \alpha) \frac{B_0}{s^2 A_0} . \quad (\text{A5-38})$$

En posant :

$$Q = -2\beta J \frac{B_0}{A_0} , \quad (\text{A5-39})$$

il vient :

$$Q_1 + Q_{-1} = Q , \quad Q_1 Q_{-1} = 0 . \quad (\text{A5-40})$$

Dans la limite des basses températures, nous avons :

$$A_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 4\pi \exp(u) , \quad B_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 4\pi s^2 \frac{\exp(u)}{u} , \quad (\text{A5-41})$$

où u est donné par la relation (A5-4). Nous en déduisons :

$$\frac{Q_1 + Q_{-1}}{s(1 - P)} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\frac{J}{|J|} , \quad (\text{A5-42})$$

si bien que la susceptibilité χ s'écrit :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta(g_s)^2}{3} \left(r^2 + \frac{s+1}{s} - 2r \frac{J}{|J|} \right) . \quad (\text{A5-43})$$

Le produit χT tend donc vers une limite finie aux basses températures ; comme dans le cas $\alpha > 1$, r ne joue aucun rôle prépondérant (fig.A5-6 et 7), sauf lorsque le spin quantique devient classique (ceci fera l'objet d'un examen particulier dans l'annexe 6).

En utilisant la définition (I-50) de la longueur de corrélation, nous avons, à basse température :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{1 - |P|} . \quad (\text{A5-44})$$

Compte tenu de la relation (A5-8), nous avons, lorsque α est plus petit que 1 (mais positif) :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \frac{|J|s}{2} (1 - \alpha^2) . \quad (\text{A5-45})$$

La longueur de corrélation diverge donc comme T^{-1} , de même que dans le cas où α est supérieur à 1 :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\alpha^2 - 1}{2\alpha} \beta |J|s . \quad (\text{A5-46})$$

Dans le cas où α est égal à 1, en utilisant les relations (A5-34 et 44), on constate aisément que la longueur de corrélation ne diverge plus.

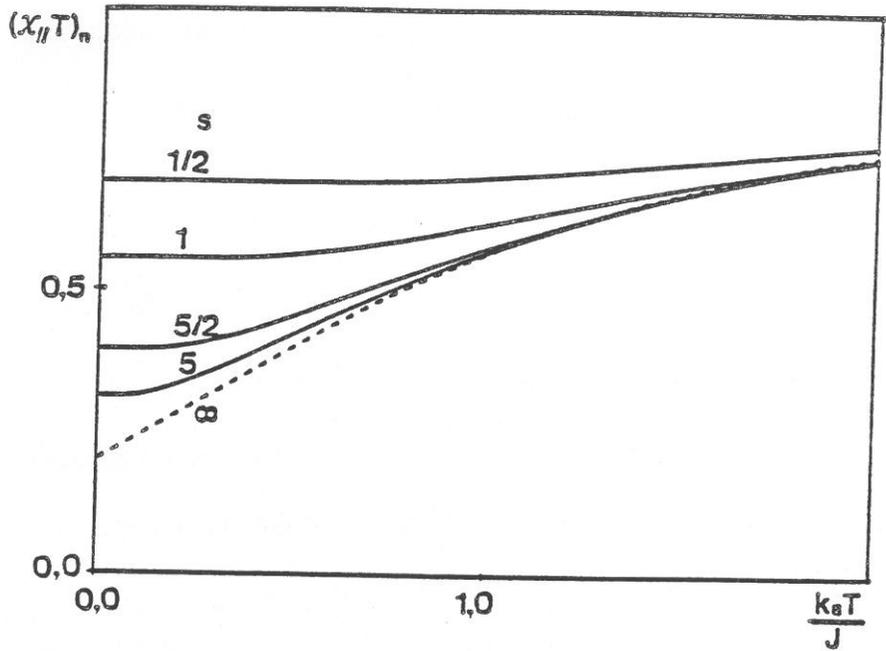


Fig.A5-6 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne (S,s) présentant un couplage de Heisenberg, pour diverses valeurs de s ($J > 0$, $g_s=1$, $\alpha=1$, $r=0,5$; tireté : limite classique de s').

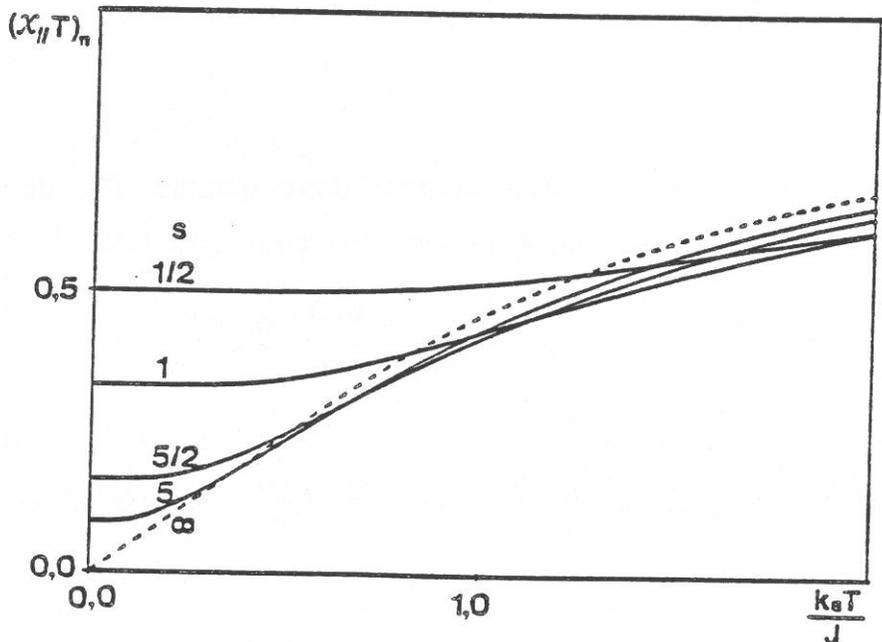


Fig.A5-7 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne (S,s) présentant un couplage de Heisenberg, pour diverses valeurs de s ($J > 0$, $g_s=1$, $\alpha=1$, $r=1$; tireté : limite classique de s').

Annexe 6

**CHAINE REGULIERE ALTERNEE CLASSIQUE, INFINIE,
PRESENTANT UN COUPLAGE DE HEISENBERG**

Il s'agit ici d'explorer la limite $\{ s \rightarrow +\infty \}$ des comportements étudiés dans l'annexe 5. Les résultats de cette annexe ne sont valables que dans le domaine $T/|J| \ll 1/s$. De ce fait, ils ne sont exploitables que dans la limite où le spin quantique devient classique, et cela, en raison du caractère continu que prend le spectre d'énergie de chacun des spins s_i dans son environnement S_i, S_{i+1} . Pour traiter la limite classique, nous procédons de la façon suivante : dans toutes les expressions des annexes 3 et 4, nous faisons apparaître le rapport σ/s chaque fois qu'intervient σ , ce qui permet de regrouper J, g et s sous forme de produits J_s et g_s que nous devons traiter comme des constantes, pour que l'extrapolation vers s infini ait un sens physique. Ces constantes seront appelées respectivement \mathcal{J} et \mathcal{G} . Les grandeurs utiles font intervenir les rapports $A_1/A_0, B_0/(s^2 A_0)$ et $B_1/(s^2 A_0)$ de sorte que les résultats ne sont pas modifiés si nous remplaçons chaque terme K_i ($K=A, B ; i=0,1$) par :

$$K_i^* = \frac{K_i}{2s + 1}. \quad (\text{A6-1})$$

Le calcul des K_i^* fait intervenir alors des expressions de la forme :

$$K_i^* = \frac{1}{2s + 1} \sum_{\sigma=-s}^{+s} f_i \left(\frac{\sigma}{s} \right), \quad (\text{A6-2})$$

qui se transforment tout naturellement en :

$$K_1^* = \int_{-1}^{+1} f(x) dx \quad , \quad (\text{A6-3})$$

lorsque s tend vers l'infini. Les calculs qui suivent, reprennent dans cette limite, et avec ces conventions, les analyses effectuées dans les annexes 3, 4 et 5.

Dans ces conditions, l'expression (A5-2) de la susceptibilité devient :

$$\chi = \frac{\beta g^2}{3} \left(r^2 + 1 + 2 \frac{r^2 P^* + r(Q_1^* + Q_{-1}^*) + Q_1^* Q_{-1}^*}{1 - P^*} \right) \quad , \quad (\text{A6-4})$$

et, compte tenu de (A3-14, 25, 37 et 38), les coefficients A_0^* , A_1^* , B_0^* et B_1^* s'écrivent lorsque α est différent de 1 :

$$A_0^* = \frac{2\pi}{(\beta g)^2 (1 - \alpha^2)} \sum_{\epsilon=\pm 1} \epsilon \Lambda_\epsilon \int_{-\Lambda_\epsilon}^{+\Lambda_\epsilon} (x - 1) \frac{\exp(x)}{x^2} dx \quad , \quad (\text{A6-5})$$

$$A_1^* = \frac{\pi}{[(\beta g)^2 (1 - \alpha^2)]^2} \sum_{\epsilon=\pm 1} \epsilon \Lambda_\epsilon^3 \int_{-\Lambda_\epsilon}^{+\Lambda_\epsilon} \left(x^3 - 3x^2 + \left(6 - \frac{x^2}{1 + \epsilon\eta} \right) (x - 1) \right) x \frac{\exp(x)}{x^4} dx \quad , \quad (\text{A6-6})$$

$$B_0^* = \frac{2\pi}{(\beta g)^2 (1 - \alpha^2)} \sum_{\epsilon=\pm 1} \frac{\epsilon}{\Lambda_\epsilon} \int_{-\Lambda_\epsilon}^{+\Lambda_\epsilon} \exp(x) dx \quad , \quad (\text{A6-7})$$

et :

$$B_1^* = \frac{\pi}{[(\beta g)^2 (1 - \alpha^2)]^2} \sum_{\epsilon=\pm 1} \epsilon \Lambda_\epsilon \int_{-\Lambda_\epsilon}^{+\Lambda_\epsilon} \left(x^2 - 2x + 2 - \frac{x^2}{1 + \epsilon\eta} \right) \frac{\exp(x)}{x^2} dx \quad , \quad (\text{A6-8})$$

où η est défini par la relation (A3-7) et où nous avons posé :

$$\Lambda_{\varepsilon} = -\beta\mathcal{J} \sqrt{2(1 + \alpha^2)(1 + \varepsilon\eta)} . \quad (\text{A6-9})$$

Nous en déduisons :

$$A_0^* = \frac{4\pi}{(\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2)} (\text{ch}(2\beta\mathcal{J}) - \text{ch}(2\alpha\beta\mathcal{J})) , \quad (\text{A6-10})$$

$$A_1^* = \frac{4\pi}{[(\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2)]^2} ([1 + (\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2)] \text{ch}(2\beta\mathcal{J}) - 2\beta\mathcal{J} \text{sh}(2\beta\mathcal{J}) \\ + [-1 + (\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2)] \text{ch}(2\alpha\beta\mathcal{J}) + 2\alpha\beta\mathcal{J} \text{sh}(2\alpha\beta\mathcal{J})) , \quad (\text{A6-11})$$

$$B_0^* = \frac{4\pi}{(\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2)} \left(\frac{\text{sh}(2\beta\mathcal{J})}{2\beta\mathcal{J}} - \frac{\text{sh}(2\alpha\beta\mathcal{J})}{2\alpha\beta\mathcal{J}} \right) . \quad (\text{A6-12})$$

et :

$$B_1^* = \frac{4\pi}{[(\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2)]^2} \left(-\text{ch}(2\beta\mathcal{J}) + (\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2) \frac{\text{sh}(2\beta\mathcal{J})}{2\beta\mathcal{J}} \right. \\ \left. + \text{ch}(2\alpha\beta\mathcal{J}) + (\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2) \frac{\text{sh}(2\alpha\beta\mathcal{J})}{2\alpha\beta\mathcal{J}} \right) . \quad (\text{A6-13})$$

L'étude qui suit est consacrée à l'étude du comportement de la susceptibilité χ à basse température et nécessite que nous distinguions trois cas selon le classement de α (> 0) par rapport à l'unité.

$0 < \alpha < 1$: les interactions consécutives sont de même signe

Nous avons :

$$A_0^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{2\pi \exp(2\beta|\mathcal{J}|)}{(\beta\mathcal{J})^2(1 - \alpha^2)} , \quad (\text{A6-14})$$

$$A_1^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A_0^*}{(\beta \mathcal{J})^2 (1 - \alpha^2)} ((\beta \mathcal{J})^2 (1 - \alpha^2) - 2\beta |\mathcal{J}| + 1) , \quad (\text{A6-15})$$

$$B_0^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A_0^*}{2\beta |\mathcal{J}|} , \quad (\text{A6-16})$$

et :

$$B_1^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A_0^*}{2\beta |\mathcal{J}|} \left(1 - \frac{2}{\beta |\mathcal{J}| (1 - \alpha^2)} \right) . \quad (\text{A6-17})$$

Compte tenu de la définition (A3-26) de P, nous avons :

$$P^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 1 - \frac{2}{\beta |\mathcal{J}| (1 - \alpha^2)} \left(1 - \frac{1}{2\beta |\mathcal{J}|} \right) , \quad (\text{A6-18})$$

ce qui permet d'écrire :

$$\frac{1}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta |\mathcal{J}|}{2} (1 - \alpha^2) \left(1 + \frac{1}{2\beta |\mathcal{J}|} + \frac{1}{(2\beta \mathcal{J})^2} \right) , \quad (\text{A6-19})$$

et :

$$\frac{P^*}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta |\mathcal{J}|}{2} (1 - \alpha^2) \left(1 - \frac{3 + \alpha^2}{1 - \alpha^2} \frac{1}{2\beta |\mathcal{J}|} + \frac{1}{(2\beta \mathcal{J})^2} \right) . \quad (\text{A6-20})$$

Nous avons d'autre part, en utilisant la définition (A3-39) de Q_ϵ , les relations (A6-16,17 et 19) et en réarrangeant les termes :

$$\frac{Q_1^* + Q_{-1}^*}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{\mathcal{J}}{|\mathcal{J}|} \beta |\mathcal{J}| (1 - \alpha^2) \left(1 - \frac{1 + \alpha^2}{1 - \alpha^2} \frac{1}{2\beta |\mathcal{J}|} - \frac{1 + \alpha^2}{1 - \alpha^2} \frac{1}{(2\beta \mathcal{J})^2} \right) , \quad (\text{A6-21})$$

et :

$$\frac{Q_1^* Q_{-1}^*}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta |\mathcal{J}|}{2} (1 - \alpha^2) \left(1 - \frac{3 + \alpha^2}{1 - \alpha^2} \frac{1}{2\beta |\mathcal{J}|} - \frac{3 + \alpha^2}{1 - \alpha^2} \frac{1}{(2\beta \mathcal{J})^2} \right) . \quad (\text{A6-22})$$

La susceptibilité χ s'écrit dans ces conditions :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta^2 \mathcal{G}^2}{3} |\mathcal{J}| (1 - \alpha^2) \left(r - \frac{\mathcal{J}}{|\mathcal{J}|} \right)^2 - \frac{\beta \mathcal{G}^2}{6} (1 + \alpha^2) \left(r - \frac{\mathcal{J}}{|\mathcal{J}|} \right)^2 + \frac{1}{12|\mathcal{J}|} \left(r^2 (1 - \alpha^2) + 2r \frac{\mathcal{J}}{|\mathcal{J}|} (1 + \alpha^2) - (3 + \alpha^2) \right) . \quad (\text{A6-23})$$

$\mathcal{J} > 0$: tous les couplages sont antiferromagnétiques

* $r \neq 1$: les moments d'une même cellule ont des amplitudes différentes

Le terme dominant de la susceptibilité est :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta^2 \mathcal{G}^2}{3} \mathcal{J} (1 - \alpha^2) (r - 1)^2 . \quad (\text{A6-24})$$

La susceptibilité diverge en T^{-2} ; cette expression est formellement identique à celle (A5-16) obtenue, dans la même situation, pour la chaîne régulière alternée classique-quantique, \mathcal{G} et $|\mathcal{J}|$ représentant le passage à la limite classique de g_s et $|J_s|$.

* $r = 1$: les moments ont même amplitude

Les deux premiers termes de l'expression (A6-23) sont nuls. Le produit χT s'annule donc au zéro absolu : ce fait est en accord avec l'extrapolation, dans la limite s infini, de l'expression (A5-17). Toutefois, la pente initiale est ici nulle, contrairement à ce que l'on observe lorsque s est quantique.

$\mathcal{J} < 0$: tous les couplages sont ferromagnétiques

Le terme dominant de la susceptibilité est :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta^2 \mathcal{J}^2}{3} |\mathcal{J}| (1 - \alpha^2) (\tau + 1)^2 . \quad (\text{A6-25})$$

Nous l'obtiendrions directement en prenant la limite pour s infini de (A5-18). La loi de divergence est encore en T^{-2} (avec un coefficient naturellement plus fort que pour $\mathcal{J} > 0$). Le fait de ne pas avoir de couplage direct entre spins quantiques gomme les importantes différences de comportement que l'on observe, lorsque ce n'était pas le cas, entre les situations à couplage ferromagnétique et celles à couplage antiferromagnétique.

$\alpha > 1$: chaque spin classique est couplé ferromagnétiquement avec le voisin qui le suit et antiferromagnétiquement avec celui qui le précède, ou inversement suivant le signe de \mathcal{J}

Nous avons :

$$A_0^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{2\pi \exp(2\alpha\beta|\mathcal{J}|)}{(\beta\mathcal{J})^2 (\alpha^2 - 1)} , \quad (\text{A6-26})$$

$$A_1^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A_0^*}{(\beta\mathcal{J})^2 (\alpha^2 - 1)} (- (\beta\mathcal{J})^2 (\alpha^2 - 1) + 2\alpha\beta|\mathcal{J}| - 1) , \quad (\text{A6-27})$$

$$B_0^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A_0^*}{2\alpha\beta|\mathcal{J}|} , \quad (\text{A6-28})$$

et :

$$B_1^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A_0^*}{2\alpha\beta|\mathcal{J}|} \left(1 - \frac{2\alpha}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{\beta|\mathcal{J}|} \right) . \quad (\text{A6-29})$$

Compte tenu de la définition (A3-26) de P , nous avons :

$$P^* \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \left(1 - \frac{2\alpha}{\beta|\mathcal{J}|(\alpha^2 - 1)} \right) , \quad (\text{A6-30})$$

ce qui permet d'écrire :

$$\frac{1}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\alpha}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{\beta |J|} \right), \quad (\text{A6-31})$$

et :

$$\frac{P^*}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\alpha}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{\beta |J|} \right). \quad (\text{A6-32})$$

En utilisant la définition (A3-39) de Q_ϵ , les relations (A6-28, 29 et 31) et en réarrangeant les termes, nous avons :

$$\frac{Q_1^* + Q_{-1}^*}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{1}{\beta |J| (\alpha^2 - 1)}, \quad (\text{A6-33})$$

et :

$$\frac{Q_1^* Q_{-1}^*}{1 - P^*} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\alpha}{\alpha^2 - 1} \frac{1}{\beta |J|} \right). \quad (\text{A6-34})$$

Dans ces conditions, la susceptibilité s'écrit :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{J^2}{3 |J| (\alpha^2 - 1)} \left(\alpha r^2 - 2 \frac{J}{|J|} r + \alpha \right). \quad (\text{A6-35})$$

Le terme en T^{-1} présent dans (A5-30) a donc disparu, comme l'indique l'extrapolation vers s infini. Quand au terme indépendant de T , il diffère de son homologue lorsque s est quantique, comme cela a été observé dans le cas $\{0 < \alpha < 1, J > 0\}$.

$\alpha=1$: la chaîne est dimérisée

Nous avons ici :

$$A_0^* = 8\pi \frac{\text{sh}(2\beta J)}{2\beta J}, \quad (\text{A6-36})$$

$$B_0^* = \frac{8\pi}{(2\beta J)^2} \left(\text{ch}(2\beta J) - \frac{\text{sh}(2\beta J)}{2\beta J} \right), \quad (\text{A6-37})$$

et :

$$A_1^* = 0 \quad , \quad B_1^* = 0 \quad . \quad (\text{A6-38})$$

Les expressions (A6-37 et 38) permettent d'écrire :

$$P^* = 0 \quad , \quad Q_\epsilon^* = -\beta \mathcal{J} (1 + \epsilon) \frac{B_0^*}{A_0^*} \quad . \quad (\text{A6-39})$$

Dans la limite des basses températures, nous avons :

$$Q_1^* + Q_{-1}^* \xrightarrow{T \rightarrow 0} -\frac{\mathcal{J}}{|\mathcal{J}|} \quad , \quad Q_1^* Q_{-1}^* \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0 \quad . \quad (\text{A6-40})$$

La susceptibilité s'écrit dans ces conditions :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta \mathcal{J}^2}{3} \left(r - \frac{\mathcal{J}}{|\mathcal{J}|} \right)^2 \quad , \quad (\text{A6-41})$$

en accord avec la limite classique de l'expression (A5-43), mais ici la valeur particulière $r=1$ rend la susceptibilité χ nulle.

En ce qui concerne la longueur de corrélation ξ , les expressions (A5-44 et 45) demeurent ici, à condition de remplacer $|\mathcal{J}|$ par \mathcal{J} : elle diverge donc, à basse température comme T^{-1} , généralisant ainsi à une chaîne alternée classique, le résultat obtenu par Fisher (Fi-64) pour une chaîne régulière.

Remarque :

Dans le cas où les spins classiques ont pour dimension 2, il est assez facile de démontrer que la longueur de corrélation diverge aussi, à basse température, comme T^{-1} . Cette technique est détaillée à la fin de l'annexe 11 (bien que la nature du couplage soit différente, le calcul se fait dans le même esprit).

Annexe 7

**COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE D'UNE CHAINE
ALEATOIRE CLASSIQUE-QUANTIQUE, INFINIE,
PRESENTANT UN COUPLAGE DE HEISENBERG**

En utilisant la notation (II-30), nous avons :

$$k_c = k \cos \phi \quad , \quad k_s = k \sin \phi \quad , \quad (A7-1)$$

avec :

$$k = \beta j \quad . \quad (A7-2)$$

D'après la définition (A3-9) de λ et compte tenu des définitions ci-dessus, nous avons :

$$\lambda = -uk\sqrt{2} \quad , \quad (A7-3)$$

où u représente le signe de $\cos \phi$. Il en résulte que les arguments qui interviennent dans les exponentielles des coefficients A_ℓ et B_ℓ s'écrivent :

$$v_1 = -2u\sigma |k_c| \quad , \quad v_{-1} = -2u\sigma |k_s| \quad , \quad (A7-4)$$

Nous posons enfin :

$$S_\gamma = \text{sh}(2sk_\gamma) \quad , \quad C_\gamma = \text{ch}(2sk_\gamma) \quad , \quad (A7-5)$$

γ pouvant représenter les lettres c ou s intervenant dans (A7-1). Nous allons évaluer les coefficients A_ℓ et B_ℓ en remarquant qu'à basse température la sommation sur σ est dominée par l'une des deux valeurs $+s$ ou $-s$. Compte tenu de (A3-14 et 25) et (A7-1 à 5), nous avons lorsque T tend vers 0 :

$$A_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{16\pi}{(2sk)^2 \cos 2\phi} (2s(k_c S_c - k_s S_s) - (C_c - C_s)) , \quad (A7-6)$$

et :

$$A_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{16\pi}{(2sk)^2 \cos 2\phi} \left(2s(k_c S_c + k_s S_s) - 3(C_c + C_s) \right. \\ \left. + \frac{2}{(2sk)^2 \cos 2\phi} (6(2sk_c S_c - 2sk_s S_s) - ((2sk)^2 + 6)(C_c - C_s)) \right) . \quad (A7-7)$$

De même, en tenant compte de (A3-37 et 38) et (A7-1 à 5), nous avons dans la même limite :

$$B_0 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{16\pi s^2}{(2sk)^2 \cos 2\phi} (C_c - C_s) , \quad (A7-8)$$

et :

$$B_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{16\pi s^2}{(2sk)^2 \cos 2\phi} \left(C_c + C_s + \frac{4}{(2sk)^2 \cos 2\phi} (C_c - C_s \right. \\ \left. - 2s(k_c S_c - k_s S_s)) \right) . \quad (A7-9)$$

Lorsque T tend vers 0, k devient très grand; $|k_c|$ et $|k_s|$ ont une différence $|\beta_j| (|\cos\phi| - |\sin\phi|)$ très grande devant l'unité, sauf pour $\phi = \pm \frac{\pi}{4}$, c'est-à-dire lorsque J_1 et J_2 sont proches de 0. Il en résulte que, d'une part, $|S_c|$ et $|C_c|$ sont très proches l'un de l'autre (de même $|S_s|$ et $|C_s|$) et, d'autre part, l'une de ces deux paires l'emporte largement sur l'autre : $|S_c|$ et $|C_c|$ l'emportent sur $|S_s|$ et $|C_s|$ dans les régions I et III et inversement $|S_s|$ et $|C_s|$ l'emportent sur $|S_c|$ et $|C_c|$ dans les régions II et IV (sauf dans un

voisinage des axes J_+ et J_- dont l'étendue décroît en même temps que T). Deux cas de figures peuvent se présenter : dans le cas (a), J_+ et J_- prennent indépendamment l'un de l'autre des valeurs positives ou négatives ; dans le cas (b), J_+ et J_- sont distribués aléatoirement mais ont le même signe au sein d'une même cellule élémentaire. Dans le cas (a), la distribution du paramètre d'échange occupe les quatre quadrants du plan (J_+, J_-) alors que dans le cas (b) seuls les quadrants I ou III sont occupés.

Nous montrons facilement que, si T tend vers 0, \bar{P} tend vers 1 dans les régions I et III et vers -1 dans les régions II et IV. Si nous appelons p_I , p_{II} , p_{III} ou p_{IV} les probabilités respectives pour que la paire courante (J_+, J_-) tombe dans les régions I, II, III ou IV, nous avons :

$$\bar{P} \xrightarrow{T \rightarrow 0} p_I + p_{III} - (p_{II} + p_{IV}) , \quad (A7-10)$$

de sorte que (les probabilités étant normées) :

$$1 - \bar{P} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 2(p_{II} + p_{IV}) . \quad (A7-11)$$

A l'aide de la définition (A3-39) de Q_ε , nous obtenons de la même façon :

$$\bar{Q}_\varepsilon \xrightarrow{T \rightarrow 0} -\frac{1}{2} (p_I - p_{III} + \varepsilon(p_{II} - p_{IV})) . \quad (A7-12)$$

Dans le cas (a), $(1 - \bar{P})^{-1}$ ne diverge pas à basse température. Dans ces conditions, la susceptibilité χ (A4-15) s'écrit :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta(g_s)^2}{3} \left(r^2 + \frac{s+1}{s} + (p_{II} + p_{IV})^{-1} \left(r^2 (p_I - p_{II} + p_{III} - p_{IV}) - \frac{r}{s} (p_I - p_{III}) + \frac{1}{4s^2} [(p_I - p_{III})^2 - (p_{II} - p_{IV})^2] \right) \right). \quad (A7-13)$$

La susceptibilité suit donc une pseudo loi de Curie, avec une constante dépendant seulement de la distribution des paires (J_+, J_-) parmi les quatre quadrants.

Dans le cas (b), p_{II} et p_{IV} sont nulles et $(1 - \bar{P})^{-1}$ diverge à basse température ; nous allons donc examiner en détail cette divergence. En utilisant la définition (A3-26) de P , il vient, en faisant un développement au premier ordre en $1/k_c$:

$$\bar{P} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 1 - \frac{4C_c \cos^2 \phi}{2sk_c S_c \cos 2\phi}, \quad (A7-14)$$

de sorte que, en utilisant les relations (A7-1 à 5) :

$$\frac{1}{1 - \bar{P}} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta}{\left(\frac{1}{|J_+|} + \frac{1}{|J_-|} \right) \frac{1}{s}}. \quad (A7-15)$$

En utilisant (A7-6, 8 et 9), et en remarquant que $\cos \phi$ est positif dans la région I et négatif dans la région III, nous montrons de même que :

$$\bar{Q}_c \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} \pm s. \quad (A7-16)$$

Dans ces conditions, la susceptibilité initiale χ s'écrit :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta^2 (gs)^2}{3} \frac{(r \pm 1)^2}{\left(\frac{1}{|J_+|} + \frac{1}{|J_-|} \right) \frac{1}{s}} + \frac{\beta (gs)^2}{3} \left(r^2 + \frac{s+1}{s} \right) . \quad (\text{A7-17})$$

Le signe \pm rend compte de la nature (ferromagnétique ou antiferromagnétique) du couplage entre premiers voisins.

* $r \neq 1$: les moments d'une même cellule n'ont pas la même amplitude

Le terme dominant de la susceptibilité se réduit à :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta^2 (gs)^2}{3} \frac{(r \pm 1)^2}{\left(\frac{1}{|J_+|} + \frac{1}{|J_-|} \right) \frac{1}{s}} . \quad (\text{A7-18})$$

La loi de divergence est en T^{-2} , quelle que soit la nature du couplage.

* $r=1$: les moments ont la même amplitude

Si les couplages entre premiers voisins sont antiferromagnétiques, nous observons un phénomène de compensation et l'expression (A7-17) se réduit à :

$$\chi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta (gs)^2}{3} \left(2 + \frac{1}{s} \right) . \quad (\text{A7-19})$$

La loi de divergence est maintenant en T^{-1} . Nous retrouvons les comportements qui viennent d'être discutés sur les courbes de la figure A7-1, où nous avons représenté l'évolution du produit χT en fonction de T .

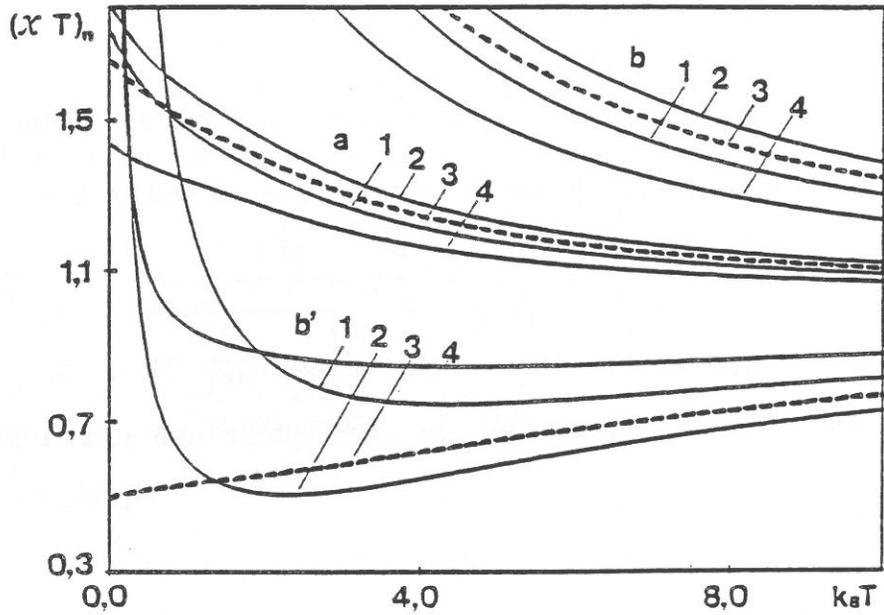


Fig.A7-1 : Variation thermique du produit $(\chi T)_n$ d'une chaîne $(S, 1/2)$ présentant un couplage de Heisenberg à caractère aléatoire ($G=1$, 1 : $g=0,5$, 2 : $g=1,0$: 3 : $g=2,0$, 4 : $g=4,0$; cas a : $-7 \leq J_+$, $J_- \leq 3$; cas b : $-11 \leq J_+$, $J_- \leq -1$; cas b' : $1 \leq J_+$, $J_- \leq 11$) ; la courbe en tireté correspond au cas $r=1$).

Annexe 8

**FONCTION DE PARTITION EN CHAMP NUL
ET SUSCEPTIBILITE INITIALE POUR UNE CHAINE
ALEATOIRE ISOTROPE COMPORTANT DES SEQUENCES
ALTERNEES DE SPINS CLASSIQUES ET DE
SOUS-SYSTEMES QUANTIQUES**

La fonction de partition $Z_N(B)$ s'écrit pour une telle chaîne :

$$Z_N(B) = \int dS_0 U_0 \int dS_1 V_0 U_1 \dots \int dS_i V_{i-1} U_i \dots \int dS_N V_{N-1} U_N \quad , \quad (A8-1)$$

où $\int dS_i$ a la même signification que dans le modèle de Fisher (I-1) et où

nous avons posé :

$$U_i = \exp(\beta G_i S_i^z B) \quad , \quad (A8-2)$$

$$V_i = \text{Tr}(\exp(-\beta H(\psi_i, S_i, S_{i+1}, B))) \quad . \quad (A8-3)$$

L'énergie s'écrit pour le système ψ_i (compte tenu des orientations de S_i et S_{i+1} , séparés par l'angle Θ_i) et pour le $u^{\text{ième}}$ niveau :

$$E_{i,u}(B) = E_{i,u}(0) + (\nabla_B E_{i,u}(B))_{B=0} \cdot B + \frac{1}{2} \sum_{\delta, \delta'} \left(\frac{\partial^2 E_{i,u}(B)}{\partial B_\delta \partial B_{\delta'}} \right)_{B=0} B_\delta B_{\delta'} + \dots \quad , \quad (A8-4)$$

où δ et δ' renvoient aux directions principales du système, définies par les vecteurs unitaires $e_{i,u}^\delta$ ($\delta=1,2$ ou 3). Les valeurs propres $E_{i,u}(B)$ sont en

réalité fonction de $\cos\Theta_i$; pour simplifier les notations, cet aspect n'est pas indiqué explicitement. Soit $E_{i,u}^g$ l'amplitude du gradient en champ nul et $e_{i,u}^g$ le vecteur unitaire associé. Nous avons :

$$(\nabla_B E_{i,u}(B))_{B=0} = E_{i,u}^g e_{i,u}^g . \quad (\text{A8-5})$$

En raison de l'isotropie du problème, $e_{i,u}^g$ est dans le plan formé par les vecteurs S_i et S_{i+1} . D'autre part, le tenseur $\left(\frac{\partial^2 E_{i,u}(B)}{\partial B_\delta \partial B_{\delta'}} \right)_{B=0}$ est réel, symétrique.

Il existe donc une base orthonormée qui le diagonalise (base propre). Les mêmes propriétés d'isotropie permettent d'attribuer à cette base les caractéristiques suivantes : (i) deux des vecteurs (disons $e_{i,u}^1$ et $e_{i,u}^2$) sont situés dans le plan défini par S_i et S_{i+1} (dans certaines circonstances, ils sont orientés suivant les bissectrices des axes qui portent ces deux vecteurs ; c'est le cas notamment lorsque S_i et S_{i+1} jouent des rôles symétriques par rapport à l'ensemble du système ψ_i) ; (ii) le troisième vecteur $e_{i,u}^3$ est orthogonal à ce même plan et sera obtenu en effectuant le produit vectoriel $e_{i,u}^1 \wedge e_{i,u}^2$. Dans cette base, le troisième terme de l'expression (A8-4) se réduit à :

$$\frac{1}{2} \sum_{\delta, \delta'} \left(\frac{\partial^2 E_{i,u}(B)}{\partial B_\delta \partial B_{\delta'}} \right)_{B=0} B_\delta B_{\delta'} = \frac{B^2}{2} \sum_{\delta=1}^3 (C_{i,u}^\delta)^2 E_{i,u}^\delta , \quad (\text{A8-6})$$

où $E_{i,u}^\delta$ et $C_{i,u}^\delta$ sont la valeur propre et le cosinus directeur du champ associés à la direction définie par $e_{i,u}^\delta$. Compte tenu des remarques précédentes , nous pouvons écrire pour le vecteur directeur du gradient et pour les deux premiers vecteurs de la base propre :

$$e_{i,u}^{\delta} = f_{i,u}^{\delta}(\Theta_i) S_i + g_{i,u}^{\delta}(\Theta_i) S_{i+1} , \quad (\delta=1,2 \text{ ou } g) , \quad (\text{A8-7})$$

ce qui permet d'écrire les cosinus directeurs correspondants sous la forme :

$$C_{i,u}^{\delta} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(f_{i,u}^{\delta}(\Theta_i) Y_1^0(S_i) + g_{i,u}^{\delta}(\Theta_i) Y_1^0(S_{i+1}) \right) , \quad (\delta=1,2 \text{ ou } g) . \quad (\text{A8-8})$$

Les fonctions $f_{i,u}^{\delta}(\Theta_i)$ et $g_{i,u}^{\delta}(\Theta_i)$ ne peuvent être déterminées que lorsque l'on connaît la nature précise du système ψ_i et de ses couplages avec les spins voisins. Compte tenu des relations (A8-4 à 6), nous pouvons écrire, en champ faible :

$$\exp(-\beta E_{i,u}(B)) \underset{B \rightarrow 0}{\sim} \exp(-\beta E_{i,u}(0)) \left[1 - \beta B C_{i,u}^g E_{i,u}^g + \frac{B^2}{2} \left(\beta^2 (C_{i,u}^g E_{i,u}^g)^2 - \beta \sum_{\delta=1}^3 (C_{i,u}^{\delta})^2 E_{i,u}^{\delta} \right) \right] . \quad (\text{A8-9})$$

Les propriétés des fonctions sphériques permettent d'écrire pour trois des cosinus directeurs :

$$\begin{aligned} (C_{i,u}^{\delta})^2 = (f_{i,u}^{\delta})^2 & \left(\sqrt{\frac{4\pi}{9}} Y_0^0(S_i) + \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_2^0(S_i) \right) + \frac{8\pi}{3} f_{i,u}^{\delta} g_{i,u}^{\delta} Y_1^0(S_i) Y_1^0(S_{i+1}) \\ & + (g_{i,u}^{\delta})^2 \left(\sqrt{\frac{4\pi}{9}} Y_0^0(S_{i+1}) + \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_2^0(S_{i+1}) \right) . \quad (\text{A8-10}) \end{aligned}$$

Pour simplifier l'écriture, l'argument Θ_i a été omis dans les fonctions $f_{i,u}^{\delta}$ et $g_{i,u}^{\delta}$.

En définitive, la quantité V_i et ses dérivées par rapport au champ peuvent s'écrire dans la limite $B=0$:

$$V_i(0) = \sum_u \exp(-\beta E_{i,u}(0)) , \quad (\text{A8-11})$$

$$\dot{V}_i(0) = -\beta \sum_u C_{i,u}^g E_{i,u}^g \exp(-\beta E_{i,u}(0)) , \quad (\text{A8-12})$$

et :

$$\ddot{V}_i(0) = -\beta \ddot{V}_{i,1}(0) + \beta^2 \ddot{V}_{i,2}(0) , \quad (\text{A8-13})$$

avec :

$$\ddot{V}_{i,1}(0) = \sum_u \sum_{\delta=1}^3 \left(C_{i,u}^\delta \right)^2 E_{i,u}^\delta \exp(-\beta E_{i,u}(0)) , \quad (\text{A8-14})$$

$$\ddot{V}_{i,2}(0) = \sum_u \left(C_{i,u}^g E_{i,u}^g \right)^2 \exp(-\beta E_{i,u}(0)) . \quad (\text{A8-15})$$

Par ailleurs (II-40), la susceptibilité peut s'écrire :

$$\chi = X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6 + X_7 , \quad (\text{A8-16})$$

avec :

$$X_1 = \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \{U_i\}_{B=0} , \quad (\text{A8-17})$$

$$X_2 = \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \{V_i\}_{B=0} , \quad (\text{A8-18})$$

$$X_3 = \frac{2}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \{U_i, U_j\}_{B=0} , \quad (\text{A8-19})$$

$$X_4 = \frac{2}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \{V_i, V_j\}_{B=0} , \quad (\text{A8-20})$$

$$X_5 = \frac{2}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \{U_i, V_j\}_{B=0} , \quad (\text{A8-21})$$

$$X_6 = \frac{2}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \{V_i, U_j\}_{B=0} , \quad (\text{A8-22})$$

et :

$$X_7 = \frac{2}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \{U_i, V_i\}_{B=0} ; \quad (\text{A8-23})$$

les quantités $\{W_i^{(\nu_i)}, W_j^{(\nu_j)}\}_{B=0}$ ont été définies dans le paragraphe II-4 ; de plus, nous avons (d'après §I-1) :

$$U_i(0) = \sqrt{4\pi} Y_0^0(S_i) \quad , \quad (\text{A8-24})$$

$$U_i'(0) = \beta G_i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0(S_i) \quad , \quad (\text{A8-25})$$

et :

$$U_i''(0) = (\beta G_i)^2 \left(\sqrt{\frac{4\pi}{9}} Y_0^0(S_i) + \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_2^0(S_i) \right) \quad . \quad (\text{A8-26})$$

La quantité $V_i(0)$ ne dépend que de l'angle Θ_i . Dans les cas pratiques, l'hamiltonien propre au système ψ_i et les couplages de ce système avec S_i et S_{i+1} sont tels que cette fonction ne présente pas d'anomalies. Nous pouvons donc la développer sous la forme :

$$V_i(0) = \sum_{\ell_i} V_{i,\ell_i}(0) \sum_{m_i=-\ell_i}^{+\ell_i} Y_{\ell_i}^{m_i}(S_i) Y_{\ell_i}^{-m_i}(S_{i+1}) \quad . \quad (\text{A8-27})$$

Le même raisonnement peut être tenu pour les termes qui apparaissent en facteur des cosinus directeurs $C_{i,u}^\delta$ dans $V_i'(0)$, et de leurs carrés dans $V_i''(0)$, de sorte que nous pouvons écrire également, compte tenu des relations (A8-8 et 12) :

$$V_i'(0) = -\beta \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{\ell_i} \left(F_{i,\ell_i}^g Y_1^0(S_i) + G_{i,\ell_i}^g Y_1^0(S_{i+1}) \right) \\ \times \sum_{m_i=-\ell_i}^{+\ell_i} Y_{\ell_i}^{m_i}(S_i) Y_{\ell_i}^{-m_i}(S_{i+1}) \quad , \quad (\text{A8-28})$$

et :

$$\begin{aligned}
V_i''(0) = & \sum_{\ell_i} \left[\left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_1 Y_0^0(S_i) + \left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_2 Y_0^0(S_{i+1}) \right. \\
& + \left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_3 Y_2^0(S_i) + \left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_4 Y_2^0(S_{i+1}) \\
& \left. + \left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_5 Y_1^0(S_i) Y_1^0(S_{i+1}) \right] \sum_{m_i=-\ell_i}^{+\ell_i} Y_{\ell_i}^{m_i}(S_i) Y_{\ell_i}^{-m_i}(S_{i+1}) \quad (A8-29)
\end{aligned}$$

La signification des quantités F_{i,ℓ_i}^g et G_{i,ℓ_i}^g et $\left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_k$ ($k=1$ à 5) découle immédiatement de l'examen des expressions (A8-8) et (A8-10 à 15). Compte tenu de la relation (A8-13), chacun des termes $\left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_k$ ($k=1$ à 5) peut se mettre sous la forme :

$$\left(V_{i,\ell_i}''(0) \right)_k = -\beta \left(V_{i,\ell_i,1}''(0) \right)_k + \beta^2 \left(V_{i,\ell_i,2}''(0) \right)_k, \quad (k=1 \text{ à } 5) \quad (A8-30)$$

Si nous revenons à la définition des quantités $\{W_i^{(\nu_i)}, W_j^{(\nu_j)}\}_{B=0}$ et si nous tenons compte des propriétés des harmoniques sphériques (orthonormalité et décomposition d'un produit en une somme), nous obtenons :

$$\{U_i''\}_{B=0} = \frac{\beta G_1^2}{3}, \quad (A8-31)$$

et :

$$\begin{aligned}
\{V_i''\}_{B=0} = & \frac{1}{4\pi V_{i,0}(0)} \left[- \left(\sqrt{4\pi} \left\{ \left(V_{i,0,1}''(0) \right)_1 + \left(V_{i,0,1}''(0) \right)_2 \right\} + \left(V_{i,1,1}''(0) \right)_5 \right) \right. \\
& \left. + \beta \left(\sqrt{4\pi} \left\{ \left(V_{i,0,2}''(0) \right)_1 + \left(V_{i,0,2}''(0) \right)_2 \right\} + \left(V_{i,1,2}''(0) \right)_5 \right) \right] \quad (A8-32)
\end{aligned}$$

Nous notons que, dans l'expression de $\{V_i''\}_{B=0}$, seuls les coefficients d'ordre $\ell=0,1$ interviennent dans le développement en fonctions sphériques. Cette remarque restera valable pour les autres quantités, ce qui

simplifiera considérablement les calculs. Nous pouvons remarquer que $\{\ddot{V}_i\}_{B=0}$ peut encore s'écrire :

$$\{\ddot{V}_i\}_{B=0} = \chi_i^{VV} + \beta \frac{M_i^2}{3} , \quad (\text{A8-33})$$

avec :

$$\chi_i^{VV} = -\frac{1}{3} \frac{\int_{-1}^{+1} dx \sum_u \left(\nabla_B^2 E_{i,u}(B) \right)_{B=0} \exp(-\beta E_{i,u}(0))}{\int_{-1}^{+1} dx \sum_u \exp(-\beta E_{i,u}(0))} , \quad (\text{A8-34})$$

et :

$$M_i^2 = \frac{\int_{-1}^{+1} dx \sum_u \left([\nabla_B E_{i,u}(B)]^2 \right)_{B=0} \exp(-\beta E_{i,u}(0))}{\int_{-1}^{+1} dx \sum_u \exp(-\beta E_{i,u}(0))} . \quad (\text{A8-35})$$

Dans ces deux expressions, la variable x désigne le cosinus de l'angle Θ_i dont dépendent les valeurs propres $E_{i,u}(B)$. L'examen de (A8-35) montre que la quantité M_i^2 est la valeur moyenne thermodynamique du carré du moment magnétique total porté par le système ψ_i et soumis par l'intermédiaire des spins voisins S_i et S_{i+1} à l'action fluctuante de l'ensemble de la chaîne. Le second terme χ_i^{VV} représente la moyenne thermodynamique, définie dans les mêmes conditions, de la susceptibilité de Van Vleck.

En procédant comme nous l'avons fait pour $\{\ddot{U}_i\}_{B=0}$ et $\{\ddot{V}_i\}_{B=0}$, nous obtenons :

$$\{U_i, U_j\}_{B=0} = \frac{\beta}{3} G_i P_i \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right) G_j, \quad (\text{A8-36})$$

$$\{V_i, V_j\}_{B=0} = \frac{\beta}{3} Q_{i,-1} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right) Q_{j,1}, \quad j > i, \quad (\text{A8-37})$$

$$\{U_i, V_j\}_{B=0} = \frac{\beta}{3} G_i P_i \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right) Q_{j,1}, \quad j > i, \quad (\text{A8-38})$$

$$\{V_i, U_j\}_{B=0} = \frac{\beta}{3} Q_{i,-1} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} P_k \right) G_j, \quad j > i, \quad (\text{A8-39})$$

et :

$$\{U_i, V_i\}_{B=0} = \frac{\beta}{3} G_i Q_{i,1}, \quad (\text{A8-40})$$

où nous avons posé :

$$P_i = \frac{V_{i,1}(0)}{V_{i,0}(0)}, \quad (\text{A8-41})$$

et :

$$Q_{i,\varepsilon} = - \frac{G_{i, \frac{1+\varepsilon}{2}}^g + F_{i, \frac{1-\varepsilon}{2}}^g}{V_{i,0}(0)}. \quad (\text{A8-42})$$

En définitive, en se basant sur l'hypothèse que les paramètres associés à deux cellules distinctes ne sont pas corrélés, et en reprenant la définition de la valeur moyenne \overline{A} d'une quantité A_i (A4-6) associée à chaque cellule, le procédé mis en place dans l'annexe 4 conduit aux expressions :

$$X_1 = \frac{\beta}{3} \overline{G^2}, \quad (\text{A8-43})$$

$$X_2 = \overline{\chi^{VV}} + \frac{\beta}{3} \overline{M^2}, \quad (\text{A8-44})$$

$$X_3 = \frac{\beta}{3} \frac{\overline{GP} \overline{G}}{1 - \overline{P}}, \quad (\text{A8-45})$$

$$X_4 = \frac{\beta}{3} \frac{\overline{Q_{-1}} \overline{Q_1}}{1 - \overline{P}}, \quad (\text{A8-46})$$

$$X_5 = \frac{\beta}{3} \frac{\overline{GP} \overline{Q_1}}{1 - \overline{P}}, \quad (\text{A8-47})$$

$$X_6 = \frac{\beta}{3} \frac{\overline{Q_{-1}} \overline{G}}{1 - \overline{P}}, \quad (\text{A8-48})$$

et :

$$X_7 = \frac{\beta}{3} \overline{GQ_1}. \quad (\text{A8-49})$$

Dans ces conditions, la susceptibilité en champ nul prend la forme suivante :

$$\chi = \overline{\chi^{VV}} + \frac{\beta}{3} \left\{ \overline{G^2} + \overline{M^2} + 2 \frac{\overline{GP} \overline{G} + \overline{Q_{-1}} \overline{Q_1} + \overline{GQ_1} - \overline{P} \overline{GQ_1} + \overline{Q_{-1}} \overline{G} + \overline{GP} \overline{Q_1}}{1 - \overline{P}} \right\}. \quad (\text{A8-50})$$

Annexe 9

**CHAINE REGULIERE (s',1/2) PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z.
ETABLISSEMENT DES EXPRESSIONS DE L'AIMANTATION ET DE
LA SUSCEPTIBILITE PARALLELES, ET DE LA LONGUEUR DE
CORRELATION**

La fonction de partition d'une telle chaîne (fig.III-1) se calcule en utilisant la méthode exposée dans le paragraphe I-2 (méthode KWK). Nous pouvons écrire :

$$Z_N(B) = \sum_{m_N=-\sigma}^{+\sigma} Z_N^{m_N}(B) \quad , \quad \sigma = \frac{1}{2} \quad , \quad (A9-1)$$

où nous avons :

$$Z_N^{m_N}(B) = \sum_{m_0} \dots \sum_{m_{N-1}} \dots \sum_{m'_0} \dots \sum_{m'_{N-1}} \exp \left(-\beta \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} \left[H_i^{\text{éch.}} + H_i^{\text{mag.}}(m_i, m'_i) \right] + H_N^{\text{mag.}}(m_N, 0) \right\} \right) . \quad (A9-2)$$

Compte tenu des définitions (III-2 et 3) de $H_i^{\text{éch.}}$ et $H_i^{\text{mag.}}(m_i, m'_i)$ et de la commutativité de ces opérateurs, nous avons :

$$\begin{aligned} Z_N^{m_N}(B) = & \sum_{m_{N-1}} \dots \sum_{m_0} \dots \sum_{m_{N-2}} \dots \sum_{m'_0} \dots \sum_{m'_{N-2}} \exp \left(-\beta \left\{ \sum_{i=0}^{N-2} \left[H_i^{\text{éch.}} + H_i^{\text{mag.}}(m_i, m'_i) \right] \right\} \right) \times \\ & \times \exp \left(-\beta H_{N-1}^{\text{mag.}}(m_{N-1}, 0) \right) \exp \left(-\beta H_N^{\text{mag.}}(m_N, 0) \right) \\ & \times \sum_{m'_{N-1}} \exp \left(-\beta \left\{ H_{N-1}^{\text{éch.}} + H_{N-1}^{\text{mag.}}(0, m'_{N-1}) \right\} \right) . \quad (A9-3) \end{aligned}$$

L'élément courant de la matrice de transfert (\mathcal{T}) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{T})_{m_N m_{N-1}} &= \exp\left(-\beta H_N^{\text{mag.}}(m_N, 0)\right) \\
 &\times \sum_{m'_{N-1}} \exp\left(-\beta \left\{H_{N-1}^{\text{éch.}} + H_{N-1}^{\text{mag.}}(0, m'_{N-1})\right\}\right) . \quad (\text{A9-4})
 \end{aligned}$$

Les configurations définies par la donnée de m_{N-1} et m_N doivent être des états propres de l'hamiltonien figurant dans chacun des éléments de la matrice (\mathcal{T}) . Tout calcul effectué, il vient :

$$(\mathcal{T})_{m_N m_{N-1}} = \exp(\beta g m_N B) \frac{\text{sh}\left(\frac{\beta}{2} (2s'+1) \left[J(m_{N-1} + m_N) - \frac{gr}{2s'} B \right]\right)}{\text{sh}\left(\frac{\beta}{2} \left[J(m_{N-1} + m_N) - \frac{gr}{2s'} B \right]\right)} , \quad (\text{A9-5})$$

où r représente le rapport des moments magnétiques présents dans la cellule élémentaire :

$$r = \frac{2g's'}{g} . \quad (\text{A9-6})$$

En se plaçant dans la limite des chaînes de très grande longueur, la fonction de partition rapportée à une cellule, est donnée par la valeur propre $v_1(B)$ de plus grand module de la matrice (\mathcal{T}) . En posant les conventions :

$$x = \frac{\beta}{2} J , \quad y = \frac{\beta}{2} \frac{gr}{2s'} , \quad \tilde{S} = 2s'+1 , \quad (\text{A9-7})$$

$$\Pi(x) = \frac{\text{sh}(\tilde{S}[yB - x])}{\text{sh}(yB - x)} \frac{\text{sh}(\tilde{S}[yB + x])}{\text{sh}(yB + x)} , \quad (\text{A9-8})$$

$$S = \sum_{\epsilon=\pm 1} \exp\left(\epsilon \beta \frac{g}{2} B\right) \frac{\text{sh}(\tilde{S}[yB - \epsilon x])}{\text{sh}(yB - \epsilon x)} , \quad (\text{A9-9})$$

$$P = \Pi(x) - \Pi(0) , \quad (\text{A9-10})$$

et :

$$R = \sqrt{S^2 - 4P} , \quad (\text{A9-11})$$

nous avons simplement :

$$v_1(B) = \frac{1}{2} (S + R) . \quad (A9-12)$$

En appelant F , F' et F'' les dérivées successives de la quantité F par rapport au champ B et $F(0)$, $F'(0)$ et $F''(0)$ leur valeur en champ nul, nous avons, à partir des relations (I-66 et 67) :

$$\mathcal{M}_{//} = \frac{1}{\beta (S + R)} \left(S' + \frac{SS' - 2P'}{R} \right) , \quad (A9-13)$$

tous calculs effectués, S' et P' étant donnés par :

$$S' = \sum_{\varepsilon=\pm 1} \varepsilon \exp\left(\varepsilon\beta\frac{g}{2}B\right) \frac{\text{sh}(\tilde{S}[yB - \varepsilon x])}{\text{sh}(yB - \varepsilon x)} \\ \times \left[\beta\frac{g}{2} + \varepsilon y \left\{ \tilde{S} \coth(\tilde{S}[yB - \varepsilon x]) - \coth(yB - \varepsilon x) \right\} \right] , \quad (A9-14)$$

$$P' = y \left(\Pi(x) \sum_{\varepsilon=\pm 1} \left[\tilde{S} \coth(\tilde{S}[yB - \varepsilon x]) - \coth(yB - \varepsilon x) \right] \right. \\ \left. - 2 \Pi(0) \left[\tilde{S} \coth(\tilde{S}yB) - \coth(yB) \right] \right) , \quad (A9-15)$$

et :

$$\chi_{//} = \frac{1}{\beta R(0)} \left(S''(0) - \frac{2P''(0)}{S(0) + R(0)} \right) , \quad (A9-16)$$

avec :

$$S''(0) = 2 \frac{\text{sh}(\tilde{S}x)}{\text{sh}(x)} \left(\left[\beta - y \left\{ \tilde{S} \coth(\tilde{S}x) - \coth(x) \right\} \right]^2 \right. \\ \left. + y^2 \left[\tilde{S}^2 \left\{ 1 - \coth^2(\tilde{S}x) \right\} - \left\{ 1 - \coth^2(x) \right\} \right] \right) , \quad (A9-17)$$

$$P''(0) = 2 y^2 \left[\left(\frac{\text{sh}(\tilde{S}x)}{\text{sh}(x)} \right)^2 \left(\tilde{S}^2 \{1 - \coth^2(\tilde{S}x)\} - \{1 - \coth^2(x)\} \right) - \tilde{S}^2 \frac{\tilde{S}^2 - 1}{3} \right] . \quad (\text{A9-18})$$

En ce qui concerne la longueur de corrélation, nous pouvons reprendre la démarche de l'annexe 1. Nous partons de la relation (A1-2) et nous admettons que les grandeurs qu'elle contient font référence aux spins 1/2 de la présente chaîne. La suite du traitement est inchangée et conduit, pour des valeurs de $j-i$ suffisamment grandes, à l'expression :

$$| \langle m_i m_j \rangle | \sim \left| \frac{v_2}{v_1} \right|^{j-i} , \quad (\text{A9-19})$$

où v_1 et v_2 renvoient respectivement à la plus grande et à la plus petite (en valeurs absolues) des valeurs propres de la matrice (\mathcal{T}). Nous avons donc :

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{S - R}{S + R} , \quad (\text{A9-20})$$

et si cette quantité est assez proche de 1, la longueur de corrélation vaut :

$$\xi \sim \frac{S}{2R} . \quad (\text{A9-21})$$

Annexe 10

**COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE DE LA SUSCEPTIBILITE
ET DE L'AIMANTATION PARALLELES D'UNE CHAINE REGULIERE
(s',1/2) PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z**

Le comportement à basse température du produit $\chi_{//}T$ est directement lié à celui des quantités $S''(0)/(\beta^2 R(0))$ et $P''(0)/(\beta^2 R(0)(S(0)+R(0)))$. D'après (A9-7, 9 et 11), si le champ est nul, nous avons lorsque T tend vers 0 :

$$S(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2 \exp(\beta |J| s') , \quad (\text{A10-1})$$

$$R(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2(2s'+1) . \quad (\text{A10-2})$$

En introduisant ces expressions dans (A9-16) et en prenant pour g la valeur 2 (de sorte que l'amplitude du moment du spin 1/2 soit égale à 1), il vient :

$$\frac{S''(0)}{\beta^2 R(0)} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2s'+1} \left[\frac{S(0)}{2} \left(1 - \frac{J}{|J|} r + \frac{J}{|J|} \frac{r}{s'} \exp(-\beta |J|) \right)^2 + \left(\frac{r}{s'} \right)^2 \exp(\beta |J|(s'-1)) \right] , \quad (\text{A10-3})$$

où r est le rapport des moments donné par (A9-6). Dans les mêmes conditions, nous avons également :

$$\frac{2P''(0)}{\beta^2 R(0) (S(0) + R(0))} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2s'+1} \left(\frac{r}{s'} \right)^2 \exp(\beta |J|(s'-1)) . \quad (\text{A10-4})$$

En définitive, le comportement limite du produit $\chi_{//}T$, à basse température, est donné par :

$$\chi_{//}T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2s'+1} \left(1 - \frac{|J|}{J} r + \frac{|J|}{J} \frac{r}{s'} \exp(-\beta|J|) \right)^2 \exp(\beta|J|s') . \quad (\text{A10-5})$$

Ce comportement est essentiellement lié au signe de l'interaction J et au classement du rapport r vis-à-vis de l'unité.

$J > 0$: les interactions sont antiferromagnétiques

* $r \neq 1$: les moments d'une même cellule ont des amplitudes différentes

$$\chi_{//}T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{(1-r)^2}{2s'+1} \exp(\beta J s') . \quad (\text{A10-6})$$

Le produit $\chi_{//}T$ présente une divergence exponentielle à basse température.

* $r=1$: les moments ont même amplitude

$$\chi_{//}T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(2s'+1)s'^2} \exp(\beta J (s'-2)) . \quad (\text{A10-7})$$

Nous en déduisons :

$$\chi_{//}T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 0 , \quad s' < 2 , \quad (\text{A10-8})$$

$$\chi_{//}T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{1}{(2s'+1)s'^2} , \quad s' = 2 , \quad (\text{A10-9})$$

et :

$$\chi_{//}T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} +\infty , \quad s' > 2 . \quad (\text{A10-10})$$

Ces divers comportements sont illustrés sur les figures A10-1

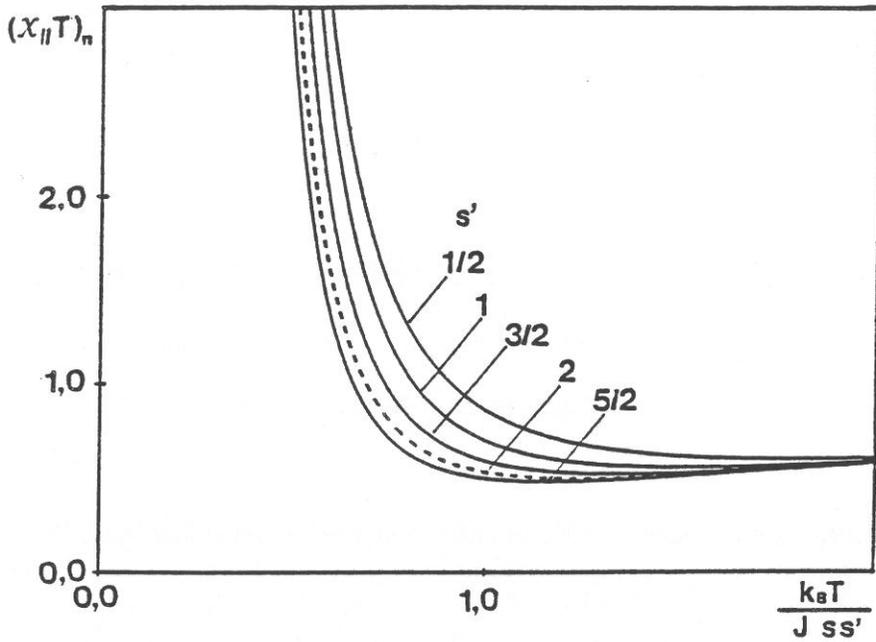


Fig.A10-1 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne $(s', 1/2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de s' ($J > 0$, $g=2$, $r=2$).

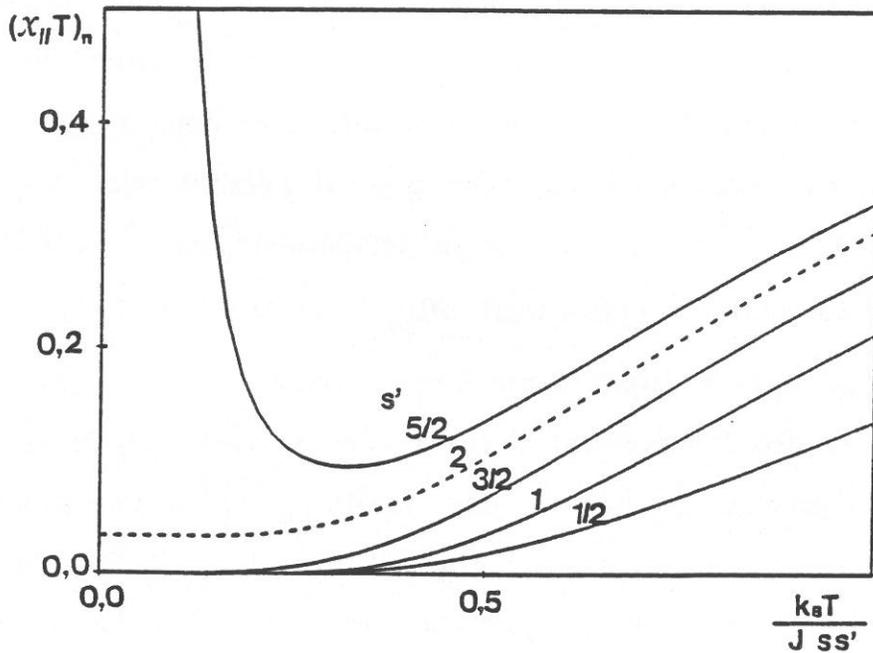


Fig.A10-2 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne $(s', 1/2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de s' ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

et 2.

$J < 0$: les interactions sont ferromagnétiques

$$\chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{(1+r)^2}{2s'+1} \exp(\beta |J|s') \quad . \quad (\text{A10-11})$$

Le classement de r par rapport à l'unité n'est pas déterminant. Nous observons à nouveau une divergence exponentielle avec, à r égal, un coefficient de divergence plus fort ici que dans le cas $\{J > 0, r \neq 1\}$.

Il apparaît que, pour $J > 0$ et $r=1$, la susceptibilité diverge au zéro absolu, lorsque s' est supérieur ou égal à 2, alors que l'état fondamental de la chaîne est associé à un moment nul. Dans le but d'éclaircir ce point, nous étudions maintenant le comportement de l'aimantation $\mathcal{M}_{//}$ en fonction du champ appliqué, dans cette région critique.

Pour s' égal à 1/2, 1 et 3/2, dans la limite des champs faibles (fig. A10-3-4-5), l'aimantation décroît linéairement en fonction du champ suivant une pente qui diminue avec la température. Pour s' égal à 2, le comportement est analogue mais, d'une part, il s'établit pour des valeurs du champ d'autant plus basses que la température est plus faible, et, d'autre part, les courbes représentant $\mathcal{M}_{//} T$ en fonction de B possèdent la même pente initiale (fig.A10-6). Pour s' supérieur à 2, l'aimantation commence à croître linéairement avec le champ, avec une pente initiale d'autant plus grande, et jusqu'à une valeur du champ d'autant plus faible, que la température est plus basse (fig.A10-7). Au-delà, l'aimantation est à peu près indépendante du champ, comme si on avait atteint une saturation ; la hauteur du plateau décroît rapidement en fonction de T .

En ce qui concerne la longueur de corrélation, lorsque T tend vers 0,

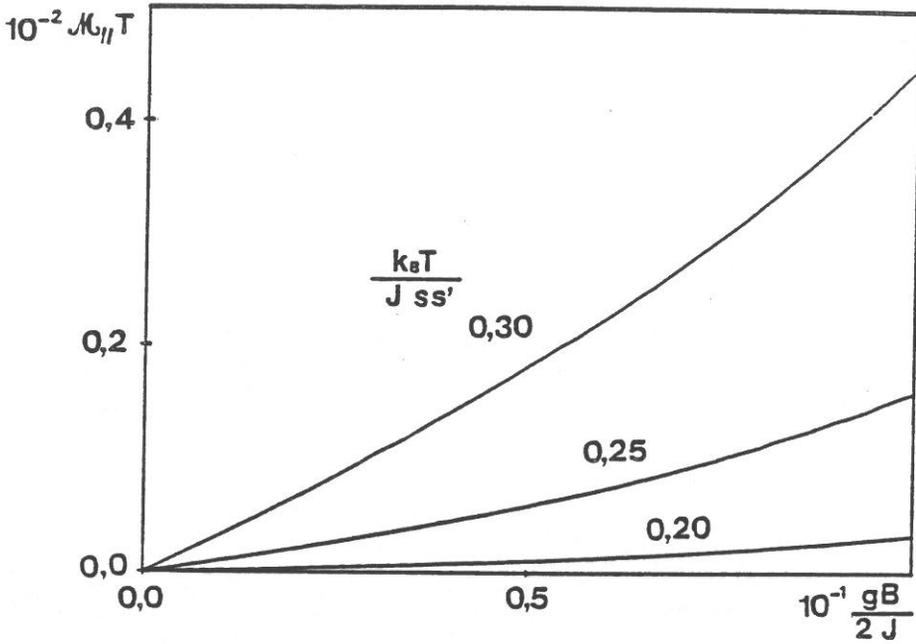


Fig.A10-3 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (1/2,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs du rapport $k_B T/Jss'$ ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

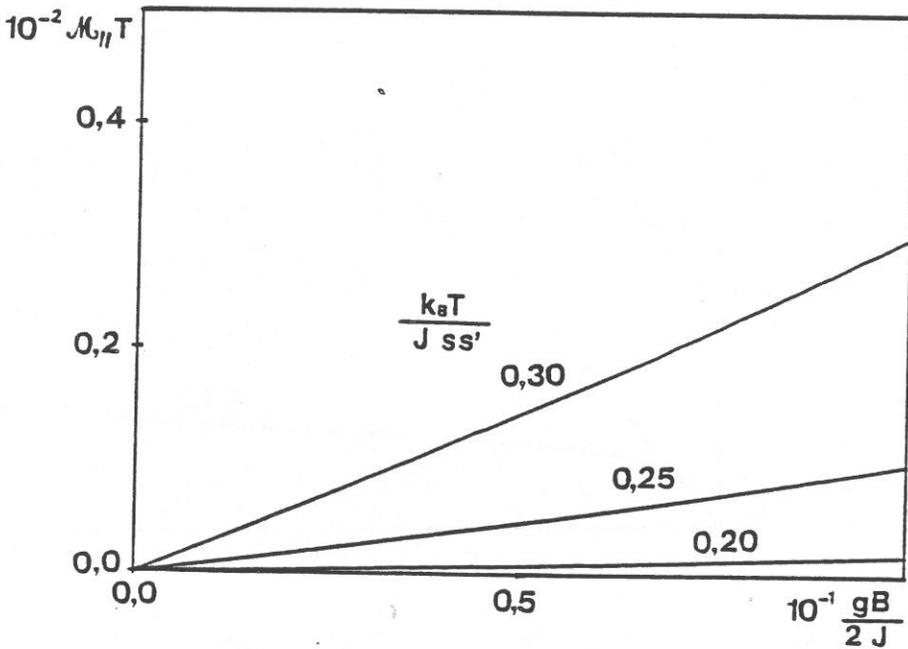


Fig.A10-4 : Variation du produit $\mathcal{M}_{//} T$ d'une chaîne (1,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs du rapport $k_B T/Jss'$ ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

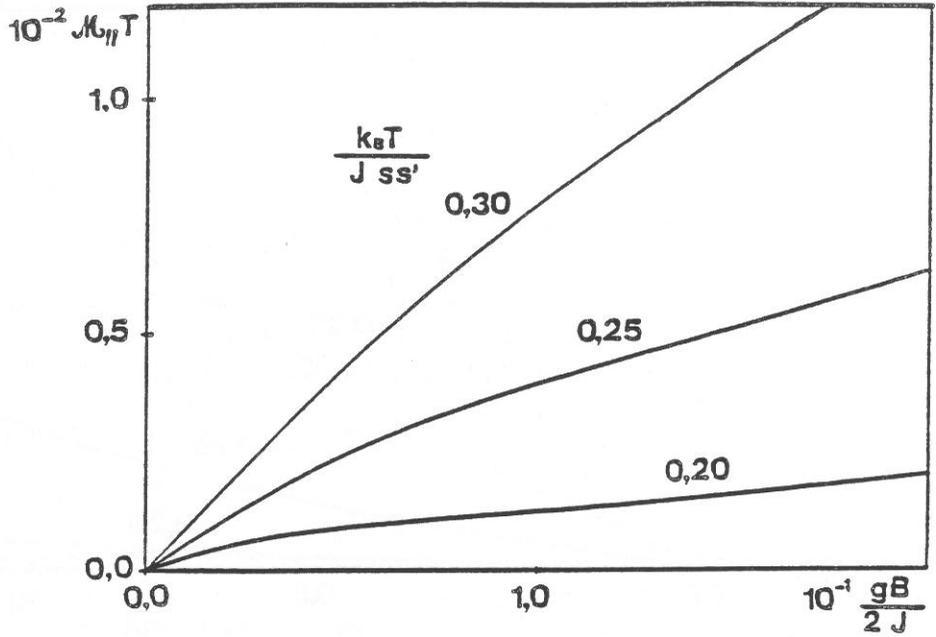


Fig.A10-5 : Variation du produit $\mathcal{M}_{//} T$ d'une chaîne (3/2,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs du rapport $k_B T/Jss'$ ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

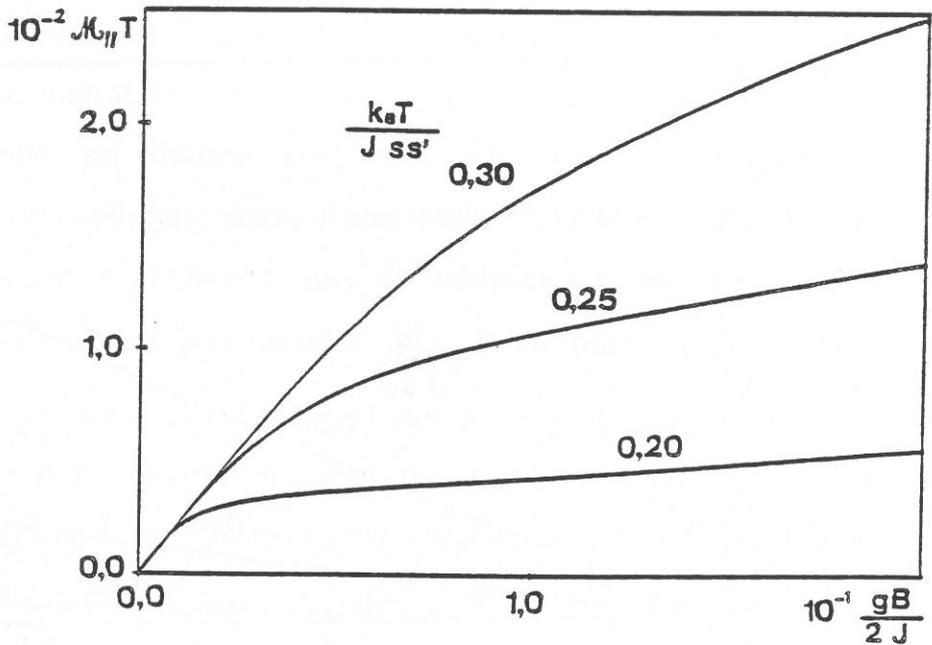


Fig.A10-6 : Variation du produit $\mathcal{M}_{//} T$ d'une chaîne (2,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs du rapport $k_B T/Jss'$ ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

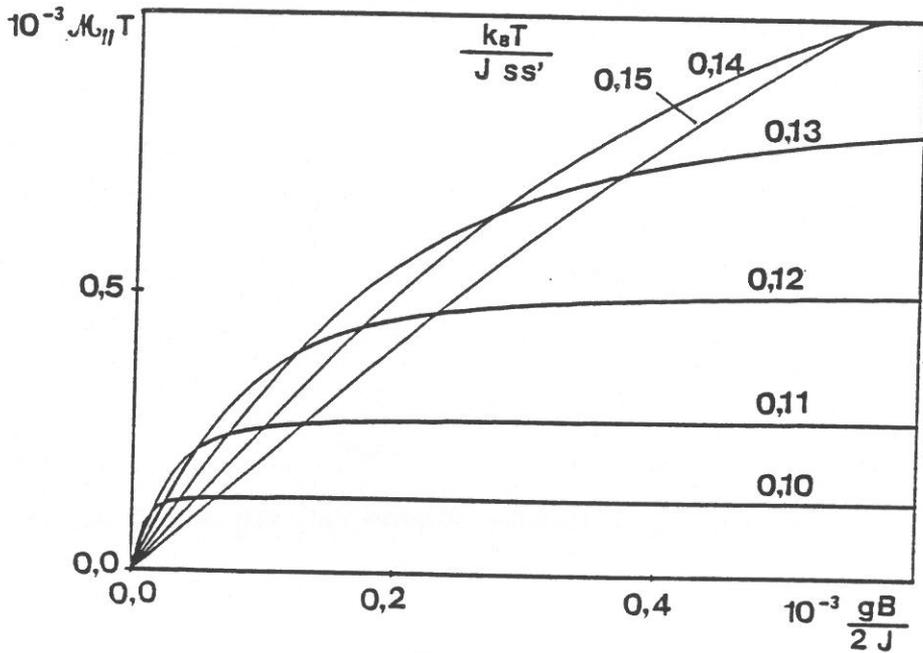


Fig.A10-7 : Variation du produit $\mathcal{M}_{//} T$ d'une chaîne $(5/2, 1/2)$ présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs du rapport $k_B T / J s s'$ ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

compte tenu des expressions (A9-9, 11 et 21), nous avons :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2(2s'+1)} \exp(\beta |J|s') . \quad (\text{A 10-12})$$

ξ présente donc une divergence exponentielle à basse température.

Annexe 11

**CHAINE REGULIERE (s',s) PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z.
ETABLISSEMENT DE L'EXPRESSION DE LA MATRICE DE
TRANSFERT (\mathcal{T}). COMPORTEMENT DE LA SUSCEPTIBILITE
PARALLELE ET DE LA LONGUEUR DE CORRELATION A BASSE
TEMPERATURE. CAS DE LA CHAINE CLASSIQUE**

La fonction de partition d'une telle chaîne (fig.III-1) se calcule en utilisant la méthode KWK décrite dans le paragraphe I-2. Nous avons :

$$Z_N(B) = \sum_{m_N=-s}^{+s} Z_N^{m_N}(B) \quad , \quad s > 1/2 \quad , \quad (A11-1)$$

où $Z_N^{m_N}(B)$ est donné par l'expression (A9-2).

Tout calcul effectué, l'élément courant de la matrice de transfert (\mathcal{T}) s'écrit :

$$(\mathcal{T})_{m_N m_{N-1}} = \exp(\beta g m_N B) \frac{\text{sh}\left(\frac{\beta}{2} (2s'+1) \left[J(m_{N-1} + m_N) - \frac{g s r}{s'} B \right] \right)}{\text{sh}\left(\frac{\beta}{2} \left[J(m_{N-1} + m_N) - \frac{g s r}{s'} B \right] \right)} \quad , \quad (A11-2)$$

où r représente le rapport des moments magnétiques présents dans la cellule élémentaire :

$$r = \frac{g's'}{gs} \quad . \quad (A11-3)$$

En se plaçant dans la limite des chaînes de très grande longueur, la fonction de partition, rapportée à une cellule, est donnée par la valeur propre $v_1(B)$ de plus grand module de la matrice (\mathcal{T}) qui, ici, est de dimension $(2s+1) \times (2s+1)$. Pour s supérieur à 1, il n'existe pas d'expressions littérales pour les valeurs propres et il faut faire appel à une

résolution numérique.

L'aimantation et la susceptibilité parallèles sont données par les expressions (I-66 et 67), obtenues également par dérivation numérique pour s supérieur à 1 (dans le cas où le spin s est égal à 1, nous pouvons obtenir des expressions littérales en nous basant sur la résolution de Cardan, mais celles-ci sont très lourdes). Pour un champ B très faible, $\mathcal{M}_{//}$ est donné par le produit $\chi_{//}B$. C'est donc l'étude de la susceptibilité parallèle à basse température qui est prépondérante. Nous l'avons réalisée pour les chaînes $(s',1)$, $(s',3/2)$, $(s',2)$ et $(s',5/2)$, dans le cas où le rapport des moments r est égal à 1 (phénomène de compensation). Les comportements sont illustrés par les figures A11-1, 2, 3 et 4. En comparant les courbes de ces figures, nous constatons qu'à basse température, pour $J > 0$ et $r=1$:

$s < 2$:

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0, \quad s' < 2, \quad (\text{A11-4})$$

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} C, \quad s' = 2, \quad (\text{A11-5})$$

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} +\infty, \quad s' > 2, \quad (\text{A11-6})$$

$s = 2$:

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} C', \quad s' < 2, \quad (\text{A11-7})$$

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0, \quad s' = 2, \quad (\text{A11-8})$$

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} +\infty, \quad s' > 2, \quad (\text{A11-9})$$

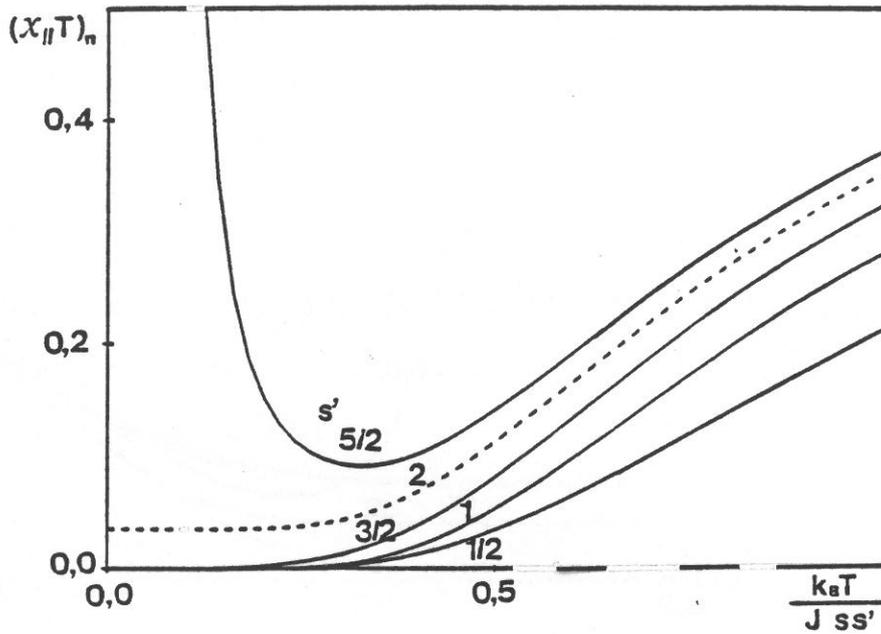


Fig.A11-1 : Variation thermique du produit $(X_{//}T)_n$ d'une chaîne $(s',1)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de s' ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

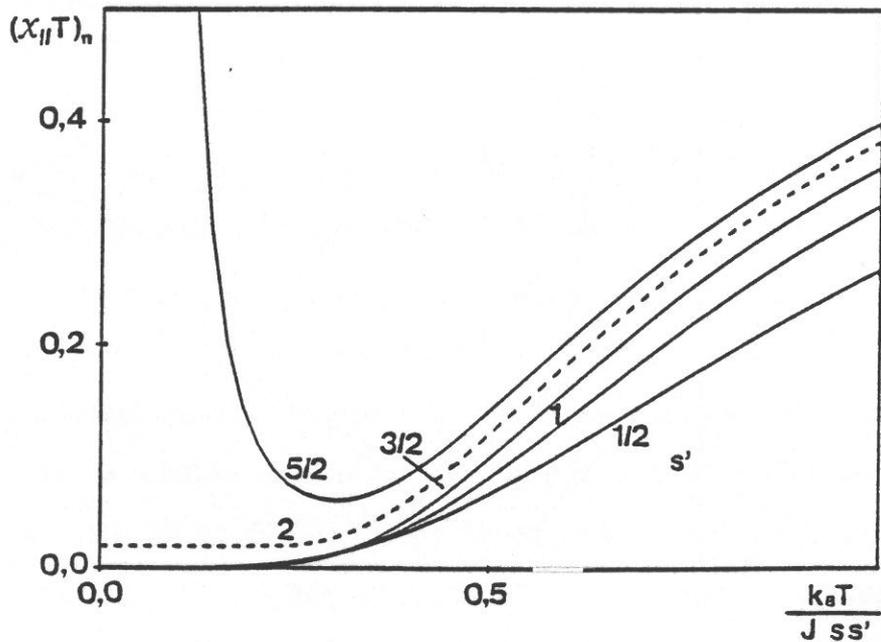


Fig.A11-2 : Variation thermique du produit $(X_{//}T)_n$ d'une chaîne $(s',3/2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de s' ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

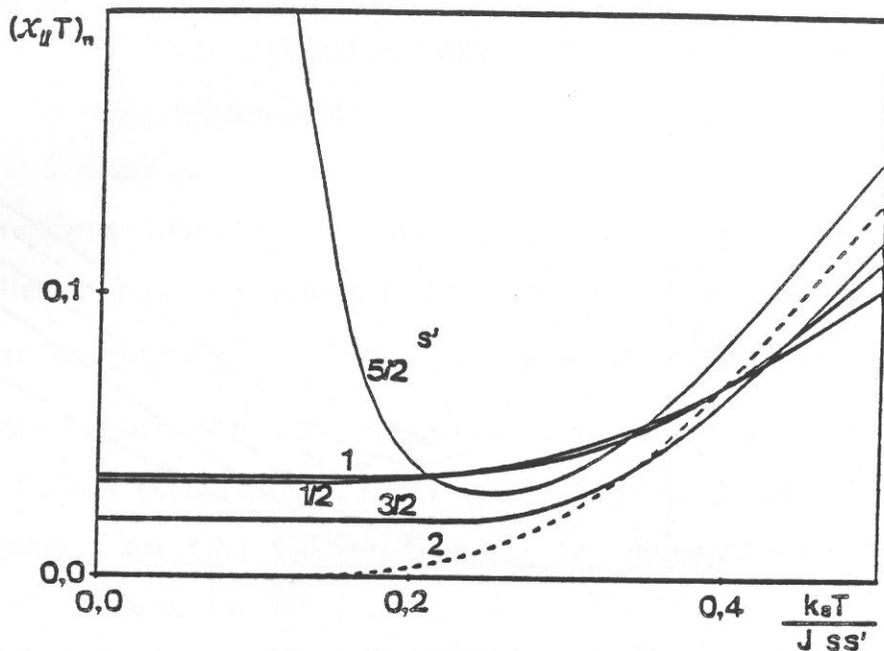


Fig.A11-3 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne $(s', 2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de s' ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

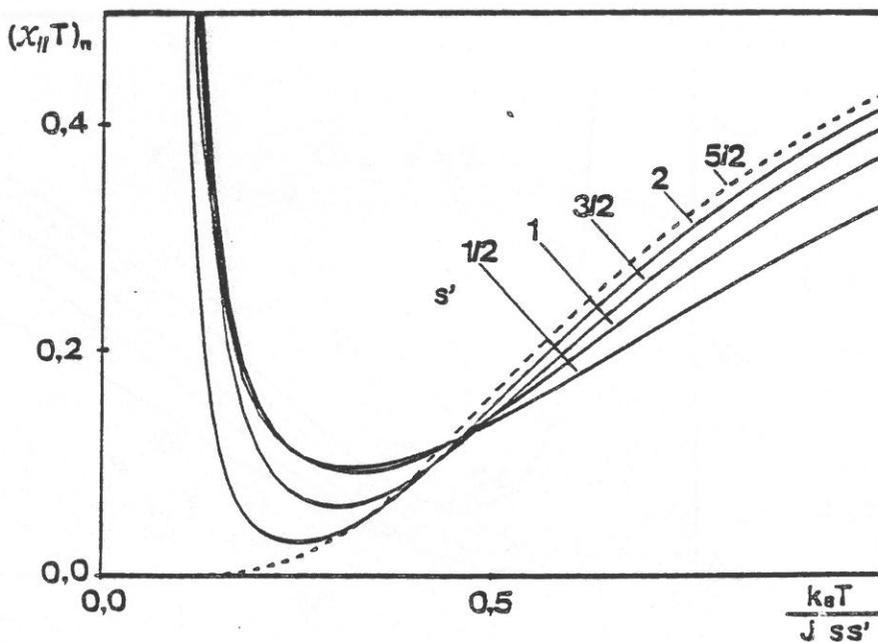


Fig.A11-4 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne $(s', 5/2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de s' ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

$s > 2$:

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0, \quad s' = 5/2, \quad (\text{A11-10})$$

$$\chi_{//}^T \xrightarrow{T \rightarrow 0} +\infty, \quad s' = 5/2. \quad (\text{A11-11})$$

En ce qui concerne la longueur de corrélation ξ , nous pouvons reprendre la même démarche que dans l'annexe 1 ; elle est donnée par la relation (A1-15) où le rapport u vaut :

$$u = \frac{v_2(0)}{v_1(0)} ; \quad (\text{A11-12})$$

$v_1(0)$ et $v_2(0)$ représentent respectivement la valeur propre en champ nul de plus grand module et celle qui lui succède dans la liste des valeurs propres classées par module décroissant. A basse température, le rapport lui tend vers 1, de sorte que la longueur de corrélation est donnée par la relation (A1-16).

Lorsque les nombres quantiques s et s' deviennent de plus en plus grands, nous avons au minimum à rechercher les deux valeurs propres de plus grand module de la matrice (\mathcal{T}) dont la taille devient elle aussi de plus en plus grande. Lorsqu'ils tendent vers l'infini (passage à la limite classique - voir à ce sujet l'introduction de l'annexe 6), cette recherche devient insoluble. En réalité, il semble possible de traiter le problème de la chaîne classique à couplage $z-z$ à l'aide des fonctions sphéroïdales (Ro-59 et Fl-78). Dans le cas qui nous préoccupe, nous ne nous intéressons qu'au comportement de la longueur de corrélation à basse température. Comme dans le cas de la chaîne classique régulière alternée à couplage de Heisenberg, nous avons (que d , la dimensionalité des spins classiques soit égale à 2 ou à 3) :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta |J| . \quad (\text{A11-13})$$

La longueur de corrélation diverge donc à basse température comme T^{-1} .

Pour démontrer ce résultat, nous partons de la définition (I-50) de la longueur de corrélation, ce qui nous amène, tout naturellement, à évaluer à basse température, la corrélation :

$$\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle = \frac{\int_{-1}^{+1} x dx \int_{-1}^{+1} y \exp(\lambda xy) dy}{\int_{-1}^{+1} dx \int_{-1}^{+1} \exp(\lambda xy) dy} , \quad d=3 ,$$

$$\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle = \frac{\int_{-1}^{+1} \frac{x dx}{\sqrt{1-x^2}} \int_{-1}^{+1} \frac{y \exp(\lambda xy) dy}{\sqrt{1-y^2}}}{\int_{-1}^{+1} \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \int_{-1}^{+1} \frac{\exp(\lambda xy) dy}{\sqrt{1-y^2}}} , \quad d=2 ,$$

où x et y représentent les quantités $\cos\theta_i$ et $\cos\theta_{i+1}$ (valeurs des projections, le long de l'axe Oz, des spins S^z et S'^z) et λ , la quantité βJ . Pour calculer ces corrélations, nous remarquons tout d'abord que le numérateur N apparaît comme la dérivée du dénominateur D par rapport à la variable λ .

Considérons le cas $d=3$. Après un changement de variable approprié, et compte tenu de la remarque ci-dessus, nous avons, à basse température :

$$\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\text{sh}(\lambda)}{\lambda \int_0^\lambda \frac{\text{sh}(u)}{u} du} ,$$

avec :

$$\int_0^\lambda \frac{\text{sh}(u)}{u} du \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\text{sh}(\lambda)}{\lambda} F(\lambda) .$$

Pour déterminer la fonction $F(\lambda)$ (ou plus exactement son comportement lorsque T tend vers 0), il suffit de dériver les deux membres de cette dernière expression et de

l'identifier à $\text{sh}(\lambda)/\lambda$. En ne gardant que les termes dominants, $F(\lambda)$ apparaît alors comme la solution d'une équation différentielle du premier ordre avec second membre dont la solution est :

$$F(\lambda) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 1 + \exp(-\lambda) ,$$

ce qui conduit à :

$$\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 1 - \frac{1}{\lambda} .$$

Il est alors aisé, compte tenu de (A1-15 et 16), d'en déduire l'expression (A11-13).

Dans le cas $d=2$, le travail à effectuer est beaucoup plus rapide : il suffit de remarquer que l'argument présent dans les exponentielles est maximum lorsque le radical est proche de 1. Il suffit alors d'en faire un développement limité, ce qui conduit à une séparation des variables dans les intégrations à effectuer. Là encore, le calcul de la corrélation conduit au même résultat que dans le cas $d=3$ et, partant, à l'expression (A11-13).

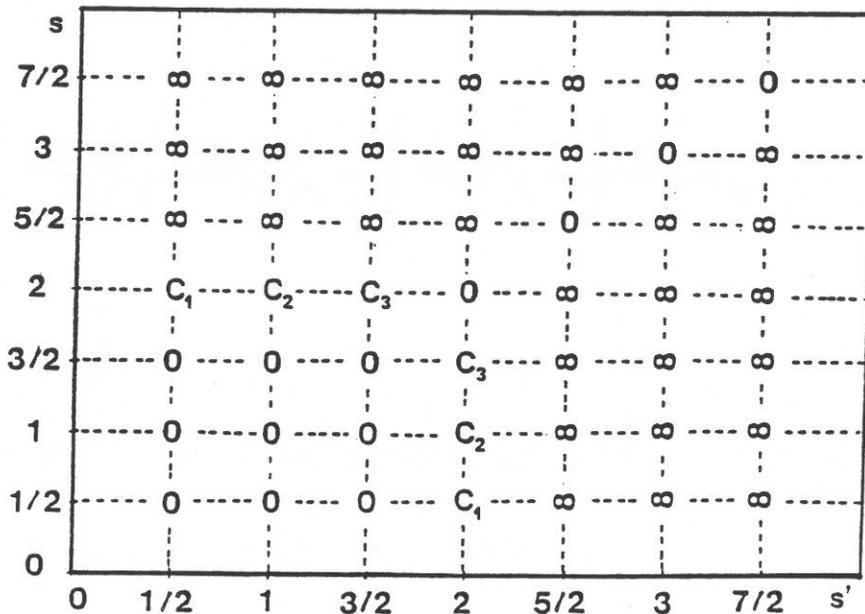


Fig.A11-5 : Carte des comportements du produit $(\chi_{//T})_n$ à $T=0$ K, pour une chaîne (s',s) présentant un couplage $z-z$ ($J>0, r=1$) ; le symbole 0 à la rencontre de deux valeurs de s et s' signifie que le produit $(\chi_{//T})_n$ tend vers 0 au zéro absolu ; le symbole ∞ signifie qu'il diverge, et C qu'il tend vers une limite finie.

Annexe 12

**CHAINE ALEATOIRE ALTERNEE (S,1/2) DE LONGUEUR
FINIE, PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z.
FONCTION DE PARTITION EN PRESENCE D'UN CHAMP B
PARALLELE A L'AXE OZ . CORRELATIONS EN CHAMP NUL**

Nous allons établir l'expression de la fonction de partition en champ B non nul (B//Oz), pour une chaîne commençant à la cellule 0 et se terminant à la cellule N ; nous avons :

$$Z_N(B) = \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} \int dS_1 \text{Tr}_{s_1} \dots \int dS_i \text{Tr}_{s_i} \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} \\ \times \exp\left(-\beta \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[\tilde{H}_k(S_k^z, S_{k+1}^z, S_k^z) + \tilde{H}_k^{\text{mag.}} \right] + \tilde{H}_N(S_N^z, 0, S_N^z) + \tilde{H}_N^{\text{mag.}} \right\} \right), \quad (\text{A12-1})$$

où \tilde{H}_k et $\tilde{H}_k^{\text{mag.}}$ sont donnés par les relations (III-26 et 27) et où $\int dS_i$ et Tr_{s_i} ont la même signification que dans l'annexe 3.

Compte tenu de la commutativité de ces opérateurs, nous pouvons écrire :

$$Z_N(B) = \int dS_0 \exp(-\beta \tilde{H}_0^{\text{mag.}}) \text{Tr}_{s_0} \dots \int dS_i \exp(-\beta \tilde{H}_i^{\text{mag.}}) \text{Tr}_{s_i} \dots \\ \times \int dS_N \text{Tr}_{s_N} \exp\left(-\beta \left\{ \tilde{H}_N(S_N^z, 0, S_N^z) + \tilde{H}_N^{\text{mag.}} \right\} \right) \prod_{k=0}^{N-1} \tilde{H}_k(S_k^z, S_{k+1}^z, S_k^z). \quad (\text{A12-2})$$

En développant cette expression, nous sommes conduits à poser, comme

dans l'annexe 9 :

$$Z_N(B) = \sum_{m_N=-\sigma}^{+\sigma} Z_N^{m_N}(B) , \quad \sigma = \frac{1}{2} , \quad (\text{A12-3})$$

avec :

$$\begin{aligned} Z_N^{m_N}(B) = & \int dS_0 \exp(b_0 S_0^z) \text{Tr}_{s_0} \dots \int dS_i \exp(b_i S_i^z) \text{Tr}_{s_i} \dots \\ & \times \sum_{m_{N-1}=-\sigma}^{+\sigma} \exp(\beta g_{N-1} m_{N-1} B) \int dS_{N-1} \exp((2a_{N-1,+} m_{N-1} + b_{N-1}) S_{N-1}^z) \\ & \times \prod_{k=0}^{N-2} \exp(-\beta \tilde{H}_k(S_k^z, S_{k+1}^z, s_k^z)) \exp(\beta g_N m_N B) \\ & \times \int dS_N \exp((2a_{N,+} m_N + 2a_{N-1,-} m_{N-1} + b_N) S_N^z) , \end{aligned} \quad (\text{A12-4})$$

où nous avons :

$$a_{i,\pm} = -\frac{\beta}{2} J_{i,\pm} , \quad b_i = \beta G_i B , \quad (\text{A12-5})$$

la quantité $J_{i,\pm}$ étant donnée par la relation (III-28). En définissant $Z_{N-1}^{m_{N-1}}(B)$ comme nous avons défini $Z_N^{m_N}(B)$, nous pouvons écrire :

$$Z_N^{m_N}(B) = \sum_{m_{N-1}=-\sigma}^{+\sigma} (\mathcal{J}_N)_{m_N m_{N-1}} Z_{N-1}^{m_{N-1}}(B) , \quad (\text{A12-6})$$

où nous avons posé :

$$\begin{aligned} (\mathcal{J}_N)_{m_N m_{N-1}} = & \exp(\beta g_N m_N B) \\ & \times \int dS_N \exp((2a_{N,+} m_N + 2a_{N-1,-} m_{N-1} + b_N) S_N^z) . \end{aligned} \quad (\text{A12-7})$$

Tout calcul effectué, il vient :

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{T}_N)^{m_N m_{N-1}} &= \exp(\beta g_N m_N B) \\
 &\times \left(\tilde{P}_N + 2m_N \tilde{R}'_N + 2m_{N-1} \tilde{R}_N + 4m_N m_{N-1} \tilde{Q}_N \right), \quad (\text{A12-8})
 \end{aligned}$$

avec :

$$\tilde{P}_i = \int dS_i \operatorname{ch}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{ch}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{ch}(b_i S_i^z), \quad (\text{A12-9})$$

$$\tilde{Q}_i = \int dS_i \operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{sh}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{ch}(b_i S_i^z), \quad (\text{A12-10})$$

$$\tilde{R}_i = \int dS_i \operatorname{ch}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{sh}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{sh}(b_i S_i^z), \quad (\text{A12-11})$$

$$\tilde{R}'_i = \int dS_i \operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{ch}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{sh}(b_i S_i^z). \quad (\text{A12-12})$$

$(\mathcal{T}_N)^{m_N m_{N-1}}$ apparaît donc comme l'élément courant d'une matrice de transfert (\mathcal{T}_N) de dimension 2×2 ; en continuant le procédé, nous avons :

$$Z_N(B) = \prod_{i=0}^N (\mathcal{T}_i) Z_0(B), \quad (\text{A12-13})$$

où $Z_N(B)$ et $Z_0(B)$ sont les vecteurs de composantes courantes respectives $Z_N^{m_N}(B)$ et $Z_0^{m_0}(B)$ (m_N et m_0 prenant les valeurs $\pm 1/2$), cette dernière quantité étant définie par :

$$Z_0^{m_0}(B) = \exp(\beta g_0 m_0 B) \left(\tilde{X}_0 + 2m_0 \tilde{Y}_0 \right), \quad (\text{A12-14})$$

avec :

$$\tilde{X}_i = \int dS_i \operatorname{ch}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{ch}(b_i S_i^z), \quad (\text{A12-15})$$

$$\tilde{Y}_i = \int dS_i \operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{sh}(b_i S_i^z). \quad (\text{A12-16})$$

En posant :

$$\begin{pmatrix} x_i \\ x'_i \end{pmatrix} = a_{i,+} + a_{i-1,-} \pm b_i , \quad (\text{A12-17})$$

$$\begin{pmatrix} y_i \\ y'_i \end{pmatrix} = a_{i,+} - a_{i-1,-} \pm b_i , \quad (\text{A12-18})$$

et :

$$\begin{pmatrix} z_i \\ z'_i \end{pmatrix} = a_{i,+} \pm b_i , \quad (\text{A12-19})$$

l'intégration des relations (A12-9 à 12) et (A12-15 et 16) conduit à :

$$\begin{pmatrix} \tilde{P}_i \\ \tilde{Q}_i \end{pmatrix} = \frac{A}{4} [\mathcal{J}_\nu(x_i) + \mathcal{J}_\nu(x'_i) \pm \{ \mathcal{J}_\nu(y_i) + \mathcal{J}_\nu(y'_i) \}] , \quad (\text{A12-20})$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{R}'_i \\ \tilde{R}_i \end{pmatrix} = \frac{A}{4} [\mathcal{J}_\nu(x_i) - \mathcal{J}_\nu(x'_i) \pm \{ \mathcal{J}_\nu(y_i) - \mathcal{J}_\nu(y'_i) \}] , \quad (\text{A12-21})$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{X}_i \\ \tilde{Y}_i \end{pmatrix} = \frac{A}{2} [\mathcal{J}_\nu(z_i) \pm \mathcal{J}_\nu(z'_i)] , \quad (\text{A12-22})$$

où :

$$A = (2\pi)^{1-\delta(d,1)} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{2\nu^2} , \quad \nu = \frac{d}{2} - 1 , \quad (\text{A12-23})$$

d étant la dimension de l'espace où s'oriente le spin classique S_i , $\delta(d,1)$

la fonction de Dirac, et :

$$\mathcal{J}_\nu(u) = \frac{I_\nu(u)}{u} , \quad (\text{A12-24})$$

où $I_\nu(u)$ est la fonction de Bessel modifiée d'ordre ν (entier ou demi-en-

tier) définie par (Ay-71) :

$$I_{\nu}(u) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\left(\frac{u}{2}\right)^{\nu+2k}}{k! (\nu+k)!} . \quad (\text{A12-25})$$

Remarque :

Pour les valeurs non entières de ν , l'expression de $I_{\nu}(u)$ conduit à des difficultés lorsque l'argument est négatif, en raison du terme u^{ν} qui se factorise dans la série de définition. Nous notons que cette difficulté disparaît dans la définition de $\mathcal{J}_{\nu}(u)$ grâce à la division précisément par u^{ν} .

En appelant F la valeur en champ nul de l'intégrale \tilde{F} (rel. A12-20 à 22), la fonction de partition en champ nul $Z_N(0)$ s'écrit simplement sous la forme :

$$Z_N(0) = 2^{N+1} X_0 \prod_{i=0}^N P_i , \quad (\text{A12-26})$$

avec :

$$X_i = A \mathcal{J}_{\nu}(a_{i,+}) , \quad (\text{A12-27})$$

$$\begin{pmatrix} P_i \\ Q_i \end{pmatrix} = \frac{A}{2} [\mathcal{J}_{\nu}(a_{i,+} + a_{i-1,-}) \pm \mathcal{J}_{\nu}(a_{i,+} - a_{i-1,-})] . \quad (\text{A12-28})$$

Pour évaluer les corrélations en champ nul $\langle S_i^z S_j^z \rangle$, $\langle S_i^z s_j^z \rangle$, $\langle s_i^z S_j^z \rangle$ et $\langle s_i^z s_j^z \rangle$, nous posons:

$$U_i^0 = 1 , \quad U_i^1 = S_i^z , \quad U_i^2 = s_i^z \quad (\text{A12-29})$$

et :

$$\begin{aligned}
 U_{ijN}^{\alpha\alpha'} &= \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} \int dS_1 \text{Tr}_{s_1} \dots \int dS_{i-1} \text{Tr}_{s_{i-1}} \int dS_i \text{Tr}_{s_i} (U_i^\alpha) \int dS_{i+1} \text{Tr}_{s_{i+1}} \dots \\
 &\times \dots \int dS_{j-1} \text{Tr}_{s_{j-1}} \int dS_j \text{Tr}_{s_j} (U_j^{\alpha'}) \int dS_{j+1} \text{Tr}_{s_{j+1}} \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} \\
 &\times \prod_{i=0}^{N-1} \exp(-\beta H_i^{\text{éch.}}(S_i^z, S_{i+1}^z, s_i^z)) \exp(-\beta H_N^{\text{éch.}}(S_N^z, 0, s_N^z)) , \quad (\text{A12-30})
 \end{aligned}$$

(nous remarquons que U_{ijN}^{00} est la fonction de partition $Z_N(0)$). Les corrélations s'écrivent alors :

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{11}}{U_{ijN}^{00}} , \quad (\text{A12-31})$$

$$\langle S_i^z s_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{12}}{U_{ijN}^{00}} , \quad (\text{A12-32})$$

$$\langle s_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{21}}{U_{ijN}^{00}} , \quad (\text{A12-33})$$

$$\langle s_i^z s_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{22}}{U_{ijN}^{00}} . \quad (\text{A12-34})$$

En utilisant l'expression (A12-30) ainsi que la propriété de commutation des opérateurs $H_i^{\text{éch.}}$, la quantité U_{ijN}^{11} s'écrit :

$$\begin{aligned}
U_{ijN}^{11} = & \int dS_0 \operatorname{Tr}_{s_0} \int dS_1 \operatorname{Tr}_{s_1} \dots \int dS_{i-1} \operatorname{Tr}_{s_{i-1}} \int dS_i S_i^z \operatorname{Tr}_{s_i} \int dS_{i+1} \operatorname{Tr}_{s_{i+1}} \dots \\
& \times \dots \int dS_{j-1} \operatorname{Tr}_{s_{j-1}} \int dS_j S_j^z \operatorname{Tr}_{s_j} \int dS_{j+1} \operatorname{Tr}_{s_{j+1}} \dots \int dS_N \operatorname{Tr}_{s_N} \\
& \times \prod_{i=0}^{N-1} \exp\left(-\beta H_i^{\text{éch.}}(S_i^z, S_{i+1}^z, S_i^z)\right) \exp\left(-\beta H_N^{\text{éch.}}(S_N^z, 0, S_N^z)\right). \quad (\text{A12-35})
\end{aligned}$$

En procédant comme pour le calcul de $Z_N(B)$, nous obtenons :

$$U_{ijN}^{11} = 2^{N+1} X_0 \left(\prod_{k_1=1}^{i-1} P_{k_1} \right) R_{i,2} \left(\prod_{k_2=i+1}^{j-1} Q_{k_2} \right) R_{j,1} \left(\prod_{k_3=j+1}^N P_{k_3} \right), \quad (\text{A12-36})$$

où X_k , P_k et Q_k sont donnés par les relations (A12-27 et 28), et où nous avons posé :

$$\begin{pmatrix} R_{i,2} \\ R_{i,1} \end{pmatrix} = \int dS_i S_i^z \begin{pmatrix} \operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{ch}(a_{i-1,-} S_i^z) \\ \operatorname{ch}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{sh}(a_{i-1,-} S_i^z) \end{pmatrix}. \quad (\text{A12-37})$$

D'où, en effectuant les intégrations :

$$\begin{pmatrix} R_{i,2} \\ R_{i,1} \end{pmatrix} = \frac{A}{2} [(a_{i,+} + a_{i-1,-})^{\mathcal{J}_{\nu+1}} (a_{i,+} + a_{i-1,-}) \pm (a_{i,+} - a_{i-1,-})^{\mathcal{J}_{\nu+1}} (a_{i,+} - a_{i-1,-})] . \quad (\text{A12-38})$$

De sorte qu'avec les relations (A12-26, 31 et 36) :

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{R_{i,2}}{P_i} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} \frac{Q_k}{P_k} \right) \frac{R_{j,1}}{P_j}, \quad (\text{A12-39})$$

(pour l'interprétation du symbole Π , voir la remarque 1 de l'annexe 3).
Le calcul de l'auto-corrélation $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ est analogue, avec un seul pivot en i (au lieu de deux en i et j). Nous avons :



$$\langle (S_i^z)^2 \rangle = \frac{T_i}{P_i}, \quad (\text{A12-40})$$

où :

$$T_i = \int dS_i (S_i^z)^2 \text{ch}(a_{i,+} S_i^z) \text{ch}(a_{i-1,-} S_i^z). \quad (\text{A12-41})$$

Après intégration :

$$T_i = \frac{A}{4(\nu+1)} [(2\nu+1)(a_{i,+} + a_{i-1,-})^2 \mathcal{J}_{\nu+2}(a_{i,+} + a_{i-1,-}) + \mathcal{J}_{\nu}(a_{i,+} + a_{i-1,-}) \\ + (2\nu+1)(a_{i,+} - a_{i-1,-})^2 \mathcal{J}_{\nu+2}(a_{i,+} - a_{i-1,-}) + \mathcal{J}_{\nu}(a_{i,+} - a_{i-1,-})]. \quad (\text{A12-42})$$

Le calcul de la corrélation $\langle S_i^z s_j^z \rangle$ nécessite l'évaluation de l'expression :

$$U_{ijN}^{12} = \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} \int dS_1 \text{Tr}_{s_1} \dots \int dS_{i-1} \text{Tr}_{s_{i-1}} \int dS_i S_i^z \text{Tr}_{s_i} \int dS_{i+1} \text{Tr}_{s_{i+1}} \dots \\ \times \dots \int dS_{j-1} \text{Tr}_{s_{j-1}} \int dS_j \text{Tr}_{s_j} (s_j^z) \int dS_{j+1} \text{Tr}_{s_{j+1}} \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} \\ \times \prod_{i=0}^{N-1} \exp(-\beta H_i^{\text{éch.}}(S_i^z, S_{i+1}^z, s_i^z)) \exp(-\beta H_N^{\text{éch.}}(S_N^z, 0, s_N^z)). \quad (\text{A12-43})$$

Lorsque le spin s_j vaut 1/2, la trace :

$$\mathcal{F}_j = \text{Tr}_{s_j} (s_j^z \exp(-\beta H_j^{\text{éch.}})) \quad (\text{A12-44})$$

vaut :

$$\mathcal{F}_j = \text{sh}(a_{j,+} S_j^z + a_{j,-} S_{j+1}^z). \quad (\text{A12-45})$$

En utilisant la même méthode que précédemment, nous obtenons :

$$U_{ijN}^{12} = 2^N X_0 \left(\prod_{k_1=1}^{i-1} P_{k_1} \right) R_{i,2} \left(\prod_{k_2=i+1}^j Q_{k_2} \right) \left(\prod_{k_3=j+1}^N P_{k_3} \right), \quad (\text{A12-46})$$

de sorte qu'avec (A12-26, 32 et 46), il vient :



$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{R_{i,2}}{P_i} \left(\prod_{k=i+1}^j \frac{Q_k}{P_k} \right) . \quad (\text{A12-47})$$

Moyennant la convention adoptée pour le symbole Π , cette expression reste valable pour i égal à j :

$$\langle S_i^z S_i^z \rangle = \frac{1}{2} \frac{R_{i,2}}{P_i} . \quad (\text{A12-48})$$

Un cheminement analogue nous permet de calculer $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ et $\langle S_i^z S_j^z \rangle$:

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{1}{2} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} \frac{Q_k}{P_k} \right) \frac{R_{j,1}}{P_j} , \quad (\text{A12-49})$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{1}{4} \prod_{k=i+1}^j \frac{Q_k}{P_k} . \quad (\text{A12-50})$$

Annexe 13

**CHAINE ALEATOIRE (S,1/2) INFINIE, PRESENTANT
UN COUPLAGE Z-Z.
ETABLISSEMENT DES EXPRESSIONS DE L'AIMANTATION
ET DE LA SUSCEPTIBILITE PARALLELES**

L'expression de l'aimantation parallèle s'obtient en dérivant par rapport à B l'expression (A12-26) de la fonction de partition $Z_N(B)$. Pour cela, nous commençons par mettre chaque matrice (\mathcal{T}_i) , de dimension 2×2 , sous la forme :

$$(\mathcal{T}_i) = (\mathcal{S}_i)(\mathcal{D}_i)(\mathcal{S}_i)^{-1}, \quad (\text{A13-1})$$

où (\mathcal{D}_i) est la matrice diagonale associée à (\mathcal{T}_i) , dont les valeurs propres $v_{i,1}, v_{i,2}$ sont écrites dans l'ordre des modules décroissants. Le produit des matrices (\mathcal{T}_i) s'écrit alors :

$$\prod_{i=1}^N (\mathcal{T}_i) = (\mathcal{S}_1)(\mathcal{D}_1)(\mathcal{S}_1)^{-1} \dots (\mathcal{S}_{i-1})(\mathcal{D}_{i-1})(\mathcal{S}_{i-1})^{-1} (\mathcal{S}_i)(\mathcal{D}_i)(\mathcal{S}_i)^{-1} \dots \\ \times \dots (\mathcal{S}_N)(\mathcal{D}_N)(\mathcal{S}_N)^{-1}. \quad (\text{A13-2})$$

Si nous excluons toute corrélation entre des paramètres relatifs à des indices distincts, les matrices $(\mathcal{S}_{i-1})^{-1}(\mathcal{S}_i)$ ne sont pas inverses l'une de l'autre.

En conséquence, il n'est pas possible de faire apparaître dans (A13-2) le produit des matrices diagonales (\mathcal{D}_i) et nous ne pouvons exprimer $Z_N^{m_N}(B)$ (et donc $Z_N(B)$) à l'aide d'un produit des valeurs propres dominantes).

Il est ainsi impossible, dans le cas d'une chaîne aléatoire, d'obtenir

une expression littérale simple de la fonction de partition $Z_N(B)$ ainsi que l'aimantation parallèle $\mathcal{M}_{//}$. La situation est différente en ce qui concerne la susceptibilité parallèle $\chi_{//}$; en effectuant les dérivations convenables de la fonction de partition, par rapport au champ appliqué, nous obtenons une expression de la forme :

$$\chi_{//} = \beta(X_1 + X_2 + X_3 + X_4) , \quad (\text{A13-3})$$

avec :

$$X_1 = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left(\frac{G_i^2 T_i}{P_i} + \left(\frac{g_i}{2} \right)^2 \right) , \quad (\text{A13-4})$$

$$X_2 = 2 \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \frac{G_i R_{i,2}}{P_i} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} \frac{Q_k}{P_k} \right) \frac{G_j R_{j,1}}{P_j} , \quad (\text{A13-5})$$

$$X_3 = 2 \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \frac{g_i}{2} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} \frac{Q_k}{P_k} \right) \frac{g_j Q_j}{2 P_j} , \quad (\text{A13-6})$$

$$X_4 = 2 \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \left(\frac{G_i g_i R_{i,2}}{2 P_i} + \sum_{j>i} \left(\frac{g_i}{2} \left\{ \prod_{k=i+1}^{j-1} \frac{Q_k}{P_k} \right\} \frac{G_j R_{j,1}}{P_j} + \frac{G_i R_{i,2}}{P_i} \left\{ \prod_{k=i+1}^{j-1} \frac{Q_k}{P_k} \right\} \frac{g_j Q_j}{2 P_j} \right) \right) . \quad (\text{A13-7})$$

Nous remarquons que ces expressions qui font intervenir les corrélations entre les composantes z des spins, obtenues dans l'annexe précédente (rel. A12-39, 40, 47, 48, 49 et 50) sont la traduction du théorème de dissipation-fluctuation. En appelant la valeur moyenne \overline{F} de toute quantité F_i présentant une distribution, nous avons :

$$X_1 = \overline{\left(\frac{G^2 T}{P}\right)} + \overline{\left(\frac{g}{2}\right)^2} . \quad (\text{A13-8})$$

Le calcul des quantités X_2 à X_4 s'effectue comme dans l'annexe 4 (rel. A4-8 à 11). Nous obtenons :

$$X_2 = 2 \frac{\overline{\left(\frac{GR_2}{P}\right)} \overline{\left(\frac{GR_1}{P}\right)}}{1 - \overline{\left(\frac{Q}{P}\right)}} , \quad (\text{A13-9})$$

$$X_3 = 2 \frac{\overline{\left(\frac{g}{2}\right)} \overline{\left(\frac{g}{2} \frac{Q}{P}\right)}}{1 - \overline{\left(\frac{Q}{P}\right)}} , \quad (\text{A13-10})$$

et :

$$X_4 = 2 \left(\overline{\left(G \frac{g}{2} \frac{R_2}{P}\right)} + \frac{\overline{\left(\frac{g}{2} \frac{GR_1}{P}\right)} + \overline{\left(\frac{GR_2}{P}\right)} \overline{\left(\frac{g}{2} \frac{Q}{P}\right)}}{1 - \overline{\left(\frac{Q}{P}\right)}} \right) . \quad (\text{A13-11})$$

En définitive, nous avons après réarrangement :

$$\begin{aligned} x_{//} = \beta & \left\{ \overline{\left(\frac{G^2 T}{P}\right)} + \overline{\left(\frac{g}{2}\right)^2} \right. \\ & + 2 \left(1 - \overline{\left(\frac{Q}{P}\right)} \right)^{-1} \left(\overline{\left(\frac{GR_2}{P}\right)} \overline{\left(\frac{GR_1}{P}\right)} + \overline{\left(\frac{g}{2}\right)} \overline{\left(\frac{g}{2} \frac{Q}{P}\right)} + \overline{\left(G \frac{g}{2} \frac{R_2}{P}\right)} \right. \\ & \left. \left. - \overline{\left(\frac{Q}{P}\right)} \overline{\left(G \frac{g}{2} \frac{R_2}{P}\right)} + \overline{\left(\frac{g}{2}\right)} \overline{\left(\frac{GR_1}{P}\right)} + \overline{\left(\frac{GR_2}{P}\right)} \overline{\left(\frac{g}{2} \frac{Q}{P}\right)} \right) \right\} . (\text{A13-12}) \end{aligned}$$

Annexe 14

**CHAINE ALEATOIRE ALTERNEE (S,1/2) DE LONGUEUR
FINIE, PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z.
ETABLISSEMENT DE L'EXPRESSION DE LA SUSCEPTIBILITE
PERPENDICULAIRE**

En procédant comme dans l'annexe 12, nous sommes amenés à calculer la trace courante :

$$\mathcal{F}_i(\mathbf{B}) = \text{Tr}_{s_i} \left(\exp \left(-\beta \left\{ \left(J_{i,+} S_i^z + J_{i,-} S_{i+1}^z \right) s_i^z - g_i B s_i^x \right\} \right) \right) , \quad (\text{A14-1})$$

où s_i fait toujours référence au spin de nombre quantique 1/2 et où le champ \mathbf{B} est porté par l'axe Ox, normal à la direction Oz du couplage d'échange. $\mathcal{F}_i(\mathbf{B})$ peut se mettre sous la forme :

$$\mathcal{F}_i(\mathbf{B}) = \text{Tr}_{s_i} \left(\exp(\mathcal{S}_i(\mathbf{B}) \cdot s_i) \right) , \quad (\text{A14-2})$$

où le vecteur \mathcal{S}_i a pour norme :

$$\mathcal{S}_i(\mathbf{B}) = 2 \sqrt{ \left(a_{i,+} S_i^z + a_{i,-} S_{i+1}^z \right)^2 + \left(\beta \frac{g_i}{2} B \right)^2 } , \quad (\text{A14-3})$$

et où $a_{i,\pm}$ est donné par (A12-5). En introduisant le repère orthonormé (i'_i, j'_i, k'_i) , dans lequel k'_i est orienté suivant la direction de \mathcal{S}_i , et en appelant \tilde{s}_i^x , \tilde{s}_i^y et \tilde{s}_i^z les composantes de s_i suivant (i'_i, j'_i, k'_i) , nous avons simplement :

$$\mathcal{F}_i(B) = 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\mathcal{S}_i(B)}{2} \right) . \quad (\text{A14-4})$$

Nous constatons que, contrairement au cas où B est parallèle à l'axe Oz , nous ne pouvons pas effectuer la séparation des variables S_i^z et S_{i+1}^z dans l'expression de \mathcal{F}_i : il ne sera donc pas possible de calculer la fonction de partition \tilde{Z}_N pour les valeurs non nulles de B , ni de l'aimantation perpendiculaire. Notons que ce fait n'est pas lié au caractère aléatoire des paramètres de la chaîne.

Compte tenu de la définition générale de la susceptibilité ramenée à une cellule (I-35), nous pouvons écrire, par analogie, pour la susceptibilité perpendiculaire :

$$\chi_{\perp} = \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \frac{\left(\frac{\partial^2 \tilde{Z}_N(B)}{\partial B^2} \right)_{B=0}}{Z_N(0)} , \quad (\text{A14-5})$$

où $Z_N(0)$ est donnée par (A12-26). Soit $V_{iN}(B)$ la dérivée seconde par rapport au champ de la fonction de partition figurant dans l'expression (A14-5) :

$$V_{iN}(B) = \int dS_0 \exp(-\beta \tilde{H}_0^{\text{mag.}}) \dots \int dS_i \exp(-\beta \tilde{H}_i^{\text{mag.}}) \dots \int dS_N \exp(-\beta \tilde{H}_N^{\text{mag.}}) \\ \times \left[(\beta G_i S_i^x)^2 \mathcal{F}_i(B) + 2\beta G_i S_i^x \mathcal{F}'_i(B) + \mathcal{F}''_i(B) \right] \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^N \mathcal{F}_k(B) , \quad (\text{A14-6})$$

expression dans laquelle $\mathcal{F}_i(B)$ est donnée par (A14-3 et 4), \tilde{H}_k par la relation (III-26) et $\tilde{H}_k^{\text{mag.}}$ par (III-27) où l'on a remplacé S_k^z par S_k^x ; $\mathcal{F}'_i(B)$ et

$\mathcal{F}''_i(B)$ sont respectivement les dérivées première et seconde de $\mathcal{F}_i(B)$ par rapport au champ B. En champ nul, $\mathcal{F}'_i(B)$ est nul et $\mathcal{F}''_i(B)$ se réduit à :

$$\mathcal{F}''_i(0) = 2 \left(\beta \frac{g_i}{2} \right)^2 \frac{\text{sh}(a_{i,+} S_i^z + a_{i,-} S_{i+1}^z)}{a_{i,+} S_i^z + a_{i,-} S_{i+1}^z} . \quad (\text{A14-7})$$

$V_{iN}(0)$ peut alors se mettre sous la forme :

$$V_{iN}(0) = (\beta G_i)^2 V_{iN}^c(0) + \left(\beta \frac{g_i}{2} \right)^2 V_{iN}^q(0) , \quad (\text{A14-8})$$

avec :

$$V_{iN}^c(0) = 2^{N+1} \int dS_0 \dots \int dS_i (S_i^x)^2 \dots \int dS_N \prod_{k=0}^N \text{ch}(a_{k,+} S_k^z + a_{k,-} S_{k+1}^z) , \quad (\text{A14-9})$$

$$V_{iN}^q(0) = 2^{N+1} \int dS_0 \dots \int dS_i \frac{\text{sh}(a_{i,+} S_i^z + a_{i,-} S_{i+1}^z)}{a_{i,+} S_i^z + a_{i,-} S_{i+1}^z} \dots \int dS_N \times \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^N \text{ch}(a_{k,+} S_k^z + a_{k,-} S_{k+1}^z) . \quad (\text{A14-10})$$

Dans le cas $d=1$, la composante S_i^x du vecteur S_i est nulle de sorte qu'il n'y a pas de contribution classique à la susceptibilité perpendiculaire. En procédant comme dans l'annexe 12, nous avons pour $d>1$:

$$V_{iN}^c(0) = 2^{N+1} X_0 \left(\prod_{k_1=1}^{i-1} P_{k_1} \right) T_i \left(\prod_{k_2=i+1}^N P_{k_2} \right) , \quad (\text{A14-11})$$

où X_0 est donné par la relation (A12-27) et :

$$T_i = \int dS_i (S_i^x)^2 \text{ch}(a_{i,+} S_i^z) \text{ch}(a_{i,-} S_i^z) . \quad (\text{A14-12})$$

Il est aisé de montrer que :

$$T_i' = \frac{1}{d-1} (P_i - T_i) \quad , \quad d \neq 1 \quad , \quad (\text{A14-13})$$

où P_i et T_i sont donnés par les relations (A12-28 et 42). De même, nous avons :

$$V_{iN}^q(0) = 2^{N+1} X_0 \left(\prod_{k_1=1}^{i-1} P_{k_1} \right) U_i \left(\prod_{k_2=i+1}^N P_{k_2} \right) \quad , \quad (\text{A14-14})$$

où :

$$U_i = \iint dS_i dS_{i+1} \operatorname{ch}(a_{i-1,-} S_i^z) \frac{\operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z + a_{i,-} S_{i+1}^z)^2}{a_{i,+} S_i^z + a_{i,-} S_{i+1}^z} \operatorname{ch}(a_{i+1,+} S_{i+1}^z) \quad . \quad (\text{A14-15})$$

Cette intégrale ne peut pas se mettre sous forme analytique :

$$U_i = \left(\frac{A}{2} \right)^2 \int_0^1 du [\mathcal{J}_\nu(ua_{i,+} + a_{i-1,-}) + \mathcal{J}_\nu(ua_{i,-} - a_{i-1,-})] \\ \times [\mathcal{J}_\nu(ua_{i,-} + a_{i+1,+}) + \mathcal{J}_\nu(ua_{i,-} - a_{i+1,+})] \quad , \quad (\text{A14-16})$$

où A et ν sont donnés par la relation (A12-23) et la fonction $\mathcal{J}_\nu(x)$ par (A12-24 et 25) ; il n'est pas possible d'obtenir une expression analytique plus simple. En définitive, en effectuant comme dans les autres cas de chaînes aléatoires les moyennes convenables, la susceptibilité perpendiculaire χ_\perp s'écrit :

$$\chi_\perp = \beta \left(\frac{1}{d-1} \overline{\left(G^2 \left(1 - \frac{T}{P} \right) \right)} + \overline{\left(\left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{U}{P^2} \right)} \right) \quad , \quad d > 1 \quad . \quad (\text{A14-17})$$

Pour $d=1$, la contribution classique est nulle et :

$$\chi_\perp = \beta \overline{\left(\left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{U}{P^2} \right)} \quad , \quad d=1 \quad . \quad (\text{A14-18})$$

Annexe 15

**EXPRESSIONS DE LA SUSCEPTIBILITE ET DE L'AIMANTATION
PARALLELES, DE LA LONGUEUR DE CORRELATION ET DE LA
SUSCEPTIBILITE PERPENDICULAIRE D'UNE CHAINE REGULIERE
(S,1/2) INFINIE PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z.
COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE**

1- Etude de la susceptibilité parallèle

Dans le cas d'une chaîne régulière, les barres de moyenne deviennent inutiles dans l'expression (III-29) de la susceptibilité parallèle qui devient :

$$\chi_{//} = \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{r^2 (2R^2 + T(P-Q)) + 4rPR + P(P+Q)}{P(P-Q)} , \quad (\text{A15-1})$$

où r représente le rapport des moments magnétiques de la cellule élémentaire. Il en est de même de l'indice i dans les expressions (A12-9, 10, 11 et 41) :

$$\left(\frac{P}{Q} \right) = \frac{A}{2} [\mathcal{J}_{\nu}(2a) + \mathcal{J}_{\nu}(0)] , \quad (\text{A15-2})$$

$$R = Aa \mathcal{J}_{\nu+1}(2a) , \quad (\text{A15-3})$$

$$T = \frac{A}{4(\nu+1)} \left[(2\nu+1) (2a)^2 \mathcal{J}_{\nu+2}(2a) + \mathcal{J}_{\nu}(2a) + \mathcal{J}_{\nu}(0) \right] . \quad (\text{A15-4})$$

Dans ce cadre, nous remarquons que la quantité R_2 devient nulle et nous désignons par R la valeur non distribuée de R_1 . A basse température,

l'argument tend vers l'infini dans les diverses fonctions $J_\nu(x)$ de sorte que nous devons utiliser leurs développements asymptotiques qui se déduisent immédiatement de ceux des fonctions de Bessel modifiées

$I_\nu(x)$:

$$J_k(x) \underset{|x| \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{\exp(|x|)}{\sqrt{2\pi |x|}^{\nu + \frac{1}{2}}} \left(1 - \frac{4k^2 - 1}{1! 8|x|} + \frac{(4k^2 - 1)(4k^2 - 9)}{2! (8x)^2} + \dots \right) \quad (\text{A15-5})$$

Dans le cas où d est égal à 1 (ν vaut $-1/2$), le développement asymptotique se réduit à $\exp(|x|)$. Dans ces conditions, pour effectuer l'étude à basse température de la susceptibilité parallèle $\chi_{//}$, nous repartons de son expression générale qui prend alors la forme :

$$\chi_{//} = \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 [r^2 \operatorname{ch}(2a) + 2r \operatorname{sh}(2a) + \operatorname{ch}(2a)] , \quad d=1 , \quad (\text{A15-6})$$

ou encore :

$$\chi_{//} = \frac{\beta}{2} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \left[\exp(|2a|) \left(r - \frac{J}{|J|} \right)^2 + \exp(-|2a|) \left(r + \frac{J}{|J|} \right)^2 \right] , \quad d=1 \quad (\text{A15-7})$$

Pour d supérieur à 1, les développements asymptotiques ne sont pas aussi simples et nous avons (en nous limitant aux seuls termes utiles) :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(|2a|)}{|2a|^{\nu + \frac{1}{2}}} + \dots , \quad (\text{A15-8})$$

$$R \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\frac{J}{|J|} P \left(1 - \frac{2\nu + 1}{4|a|} + \dots \right) , \quad (\text{A15-9})$$

$$T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} P \left(1 - \frac{2\nu+1}{|2a|} + \frac{(2\nu+3)^2(2\nu+1)^2(2\nu-7)}{2(\nu+1)(16a)^2} + \dots \right), \quad (\text{A15-10})$$

$$P-Q = A J_\nu(0) = 1. \quad (\text{A15-11})$$

L'expression (A15-1) de la susceptibilité parallèle se met sous la forme :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \left[\frac{\exp(|2a|)}{\sqrt{2\pi} J_{\nu+\frac{1}{2}}(0) |2a|^{\frac{\nu+1}{2}}} \left(r \left(1 - \frac{2\nu+1}{4|a|} + \dots \right) - \frac{J}{|J|} \right)^2 \right], \quad d > 1. \quad (\text{A15-12})$$

2- Discussion

J > 0 : tous les couplages sont antiferromagnétiques

* r ≠ 1 : les moments d'une même cellule ont des amplitudes différentes

Dans le cas général, le comportement dominant de la susceptibilité parallèle est donné par :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{(r-1)^2 \left(\frac{g}{2} \right)^2 \exp(\beta J)}{J \sqrt{2\pi} J_\nu(0) \frac{d-3}{(\beta J)^2}}. \quad (\text{A15-13})$$

La susceptibilité diverge comme $(\beta J)^{(3-d)/2} \exp(\beta J)$.

* r = 1 : les moments ont la même amplitude

d = 1 :

Le premier terme du développement (A15-7) s'annule et le terme dominant devient :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2\beta \left(\frac{g}{2}\right)^2 \exp(-\beta J) , \quad d=1 . \quad (\text{A15-14})$$

La susceptibilité tend vers zéro au zéro absolu.

d > 1 :

Il en est de même pour le premier terme du développement (A15-12) et le terme dominant devient :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A (d-1)^2}{4J\sqrt{2\pi}} \left(\frac{g}{2}\right)^2 \frac{\exp(\beta J)}{(\beta J)^{\frac{d+1}{2}}} , \quad d > 1 . \quad (\text{A15-15})$$

La susceptibilité suit une loi de type Curie où seuls les moments classiques interviennent. Tous ces comportements sont illustrés par les figures A15-1 à 4.

J < 0 : tous les couplages sont ferromagnétiques

Dans le cas général, le comportement dominant de la susceptibilité parallèle est donné par :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{(r+1)^2 \left(\frac{g}{2}\right)^2 \exp(\beta |J|)}{|J| \sqrt{2\pi} g_{\nu}(0) |\beta J|^{\frac{d-3}{2}}} . \quad (\text{A15-16})$$

Elle diverge donc en $(\beta J)^{(3-d)/2} \exp(\beta J)$, comme dans le cas antiferromagnétique ($d \neq 1$), mais avec un coefficient de divergence plus fort (fig.A15-5).

3- Etude de l'aimantation parallèle

En reprenant l'étude de l'annexe 13 dans le cas d'une chaîne régulière, le produit des matrices (\mathcal{T}_i) peut se mettre sous la forme :

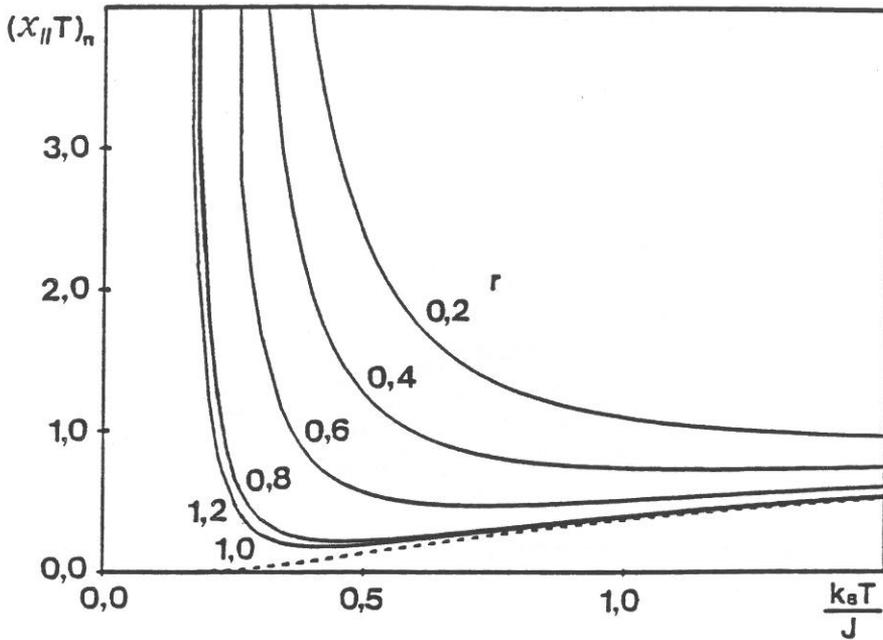


Fig.A15-1 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de r ($J > 0$, $g=2$, $d=1$).

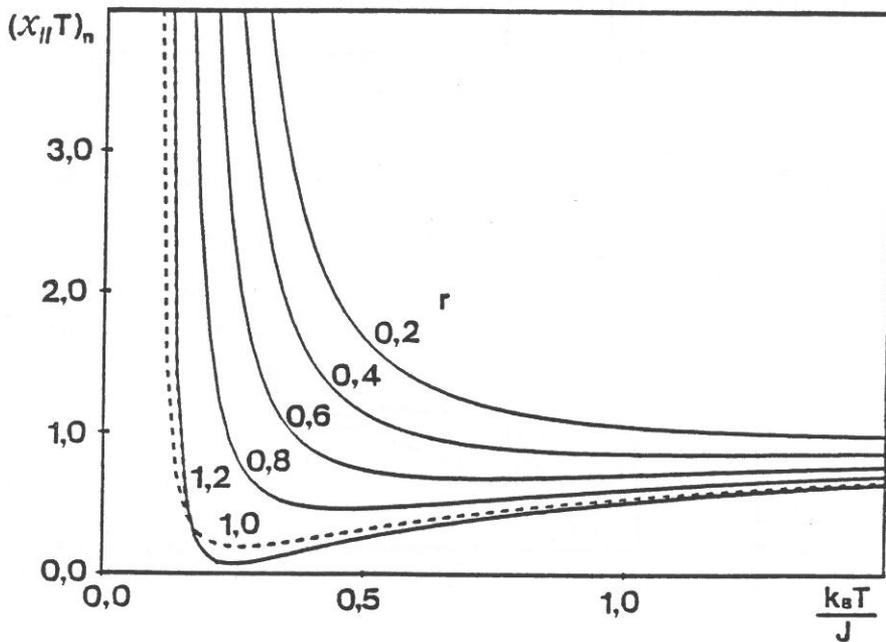


Fig.A15-2 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de r ($J > 0$, $g=2$, $d=2$).

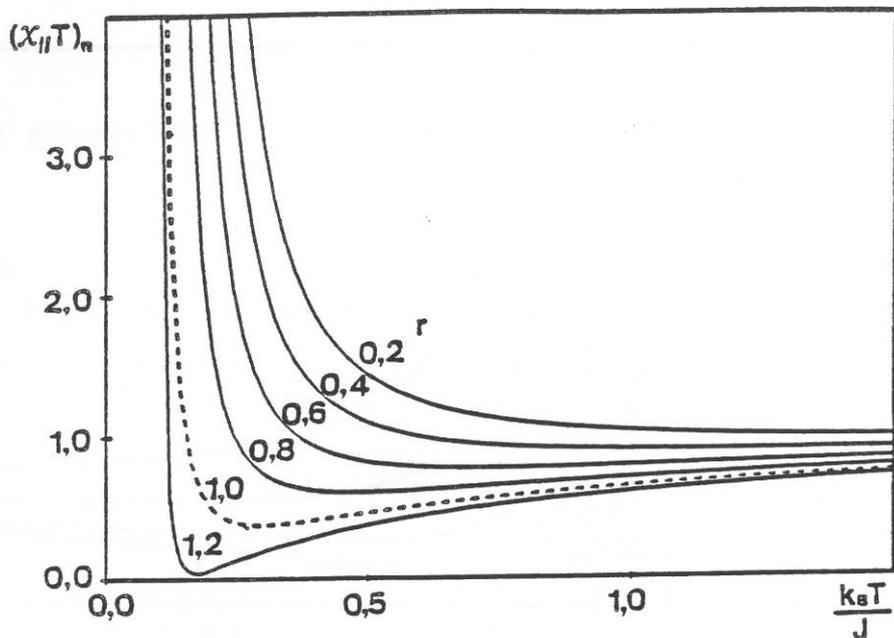


Fig.A15-3 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de r ($J > 0$, $g=2$, $d=3$).

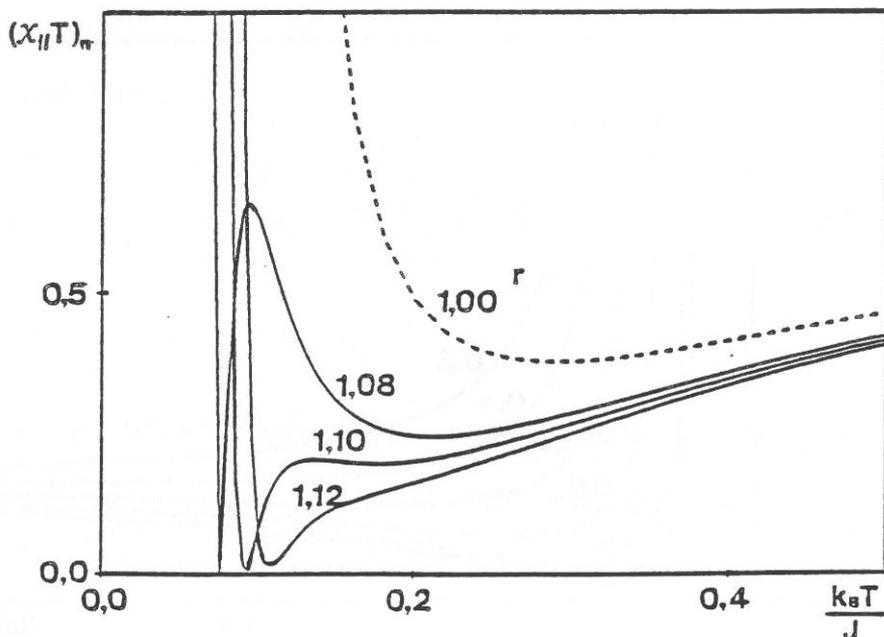


Fig.A15-4 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $g=2$, $d=3$).

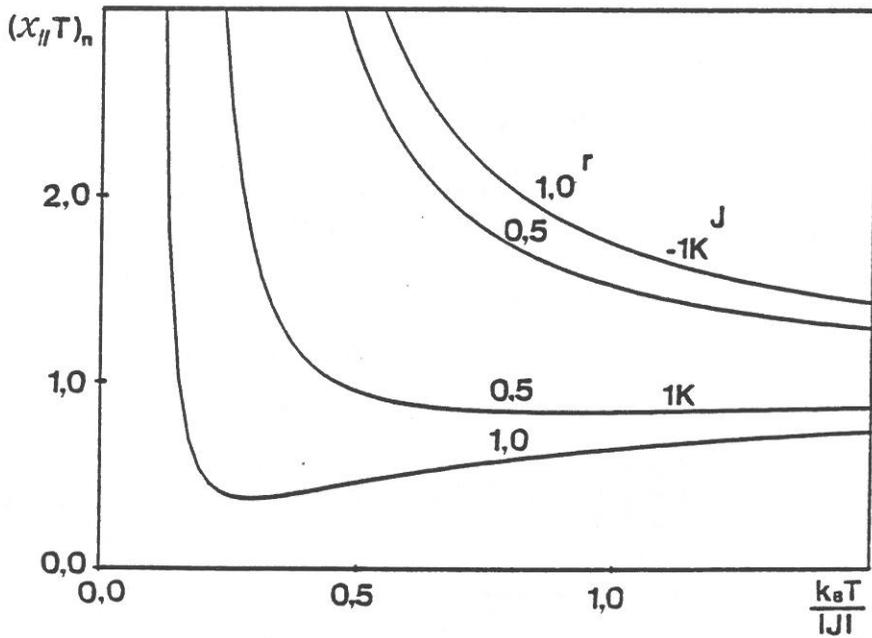


Fig.A15-5 : Variation thermique du produit $(x_{II}/T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z, pour diverses valeurs de r et J ($g=2, d=3$).

$$\prod_{i=1}^N (\mathcal{T}_i) = (\mathcal{S}) (\mathcal{D})^N (\mathcal{S})^{-1} , \quad (\text{A15-17})$$

(où (\mathcal{D}) est la matrice (\mathcal{T}) obtenue en la diagonalisant et (\mathcal{S}) une matrice de passage). En se plaçant dans la limite des chaînes de très grande longueur, la fonction de partition, rapportée à une cellule, est donnée par la valeur propre dominante $v_1(B)$ de la matrice (\mathcal{T}) . Nous considérons ici exclusivement le cas où les deux valeurs de l'interaction d'échange sont égales ; le cas où elles sont différentes (et plus particulièrement de signes opposés) est examiné en détail dans l'annexe 16. En posant :

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix} = 2a \pm \beta r B , \quad y = \beta r B , \quad (\text{A15-18})$$

$$\mathcal{S} = \frac{A}{2} \left[\exp\left(\beta \frac{g}{2} B\right) \mathcal{J}_v(x) + \exp\left(-\beta \frac{g}{2} B\right) \mathcal{J}_v(x') \right] , \quad (\text{A15-19})$$

$$\mathcal{P} = \left(\frac{A}{2}\right)^2 \left[\mathcal{J}_v(x) \mathcal{J}_v(x') - (\mathcal{J}_v(y))^2 \right] , \quad (\text{A15-20})$$

les valeurs propres de (\mathcal{T}) s'écrivent :

$$\begin{pmatrix} v_1(B) \\ v_2(B) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{S} \pm \sqrt{\mathcal{S}^2 - 4\mathcal{P}} \right) . \quad (\text{A15-21})$$

L'aimantation parallèle est donnée par :

$$\mathcal{M}_{//} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \text{Ln}(v_1(B))}{\partial B} . \quad (\text{A15-22})$$

Le calcul de cette expression ne soulève pas de difficultés particulières. La variation de l'aimantation parallèle en fonction du champ réduit, pour diverses valeurs de la température réduite $k_B T/J$, est illustrée par les figures A15-6 à 15. Ces figures sont discutées dans le corps du texte.

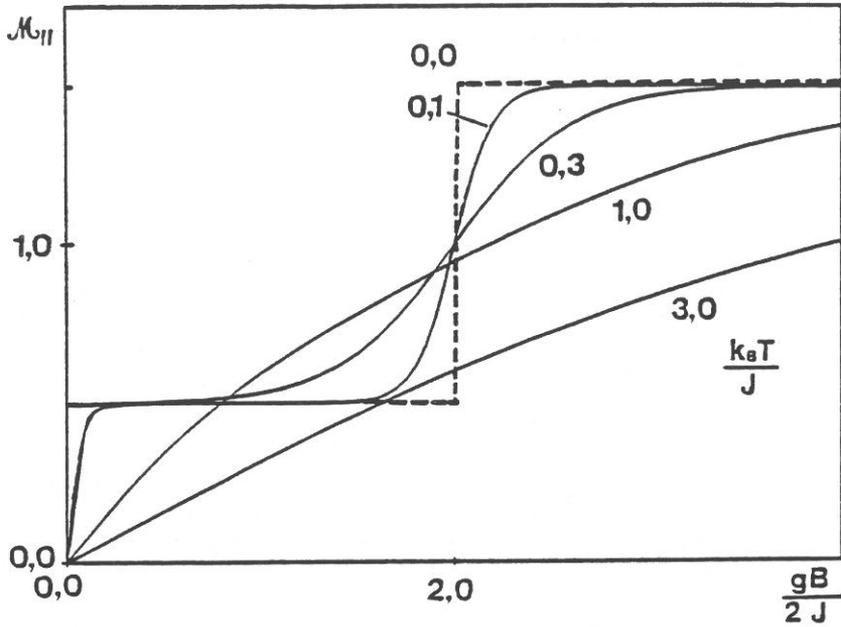


Fig.A15-6 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$, $r=0,5$, $d=1$).

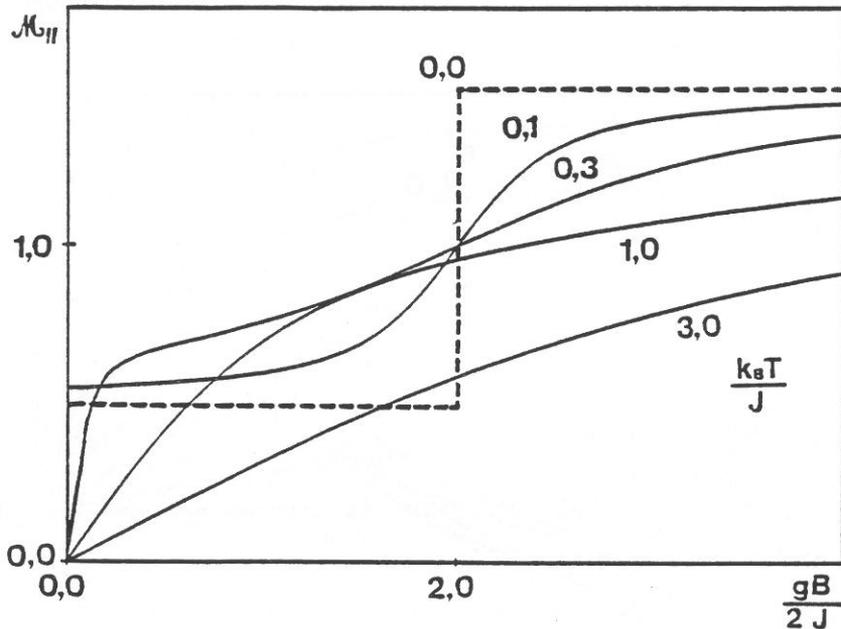


Fig.A15-7 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$, $r=0,5$, $d=3$).

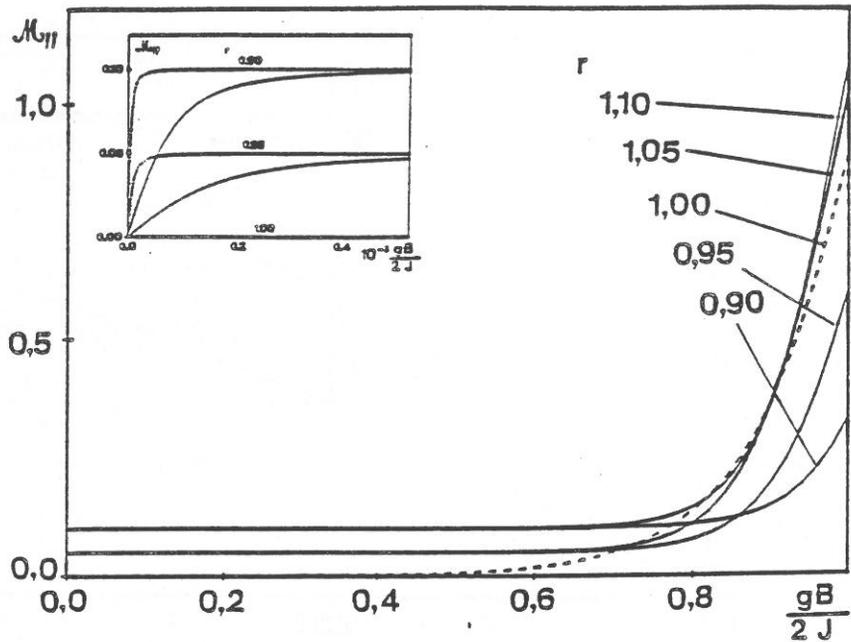


Fig.A15-8 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $k_3 T/J = 0,1$, $g=2$, $d=1$) ; encart : détail du comportement lorsque $gB/2J$ est très faible ; les courbes correspondant à r égal à 0,90 et 1,10 sont confondues (de même pour r égal 0,95 et 1,05).

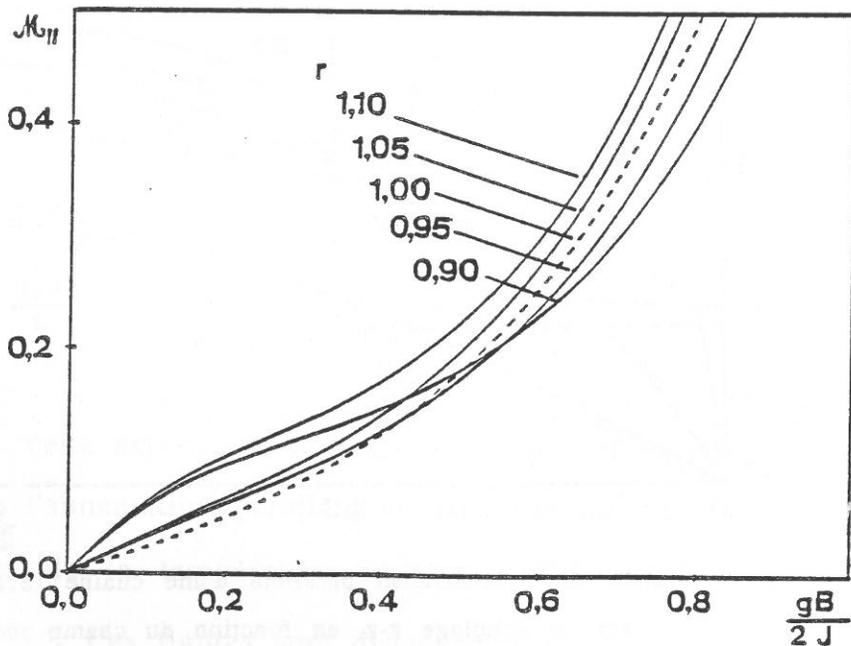


Fig.A15-9 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $k_3 T/J = 0,3$, $g=2$, $d=1$).

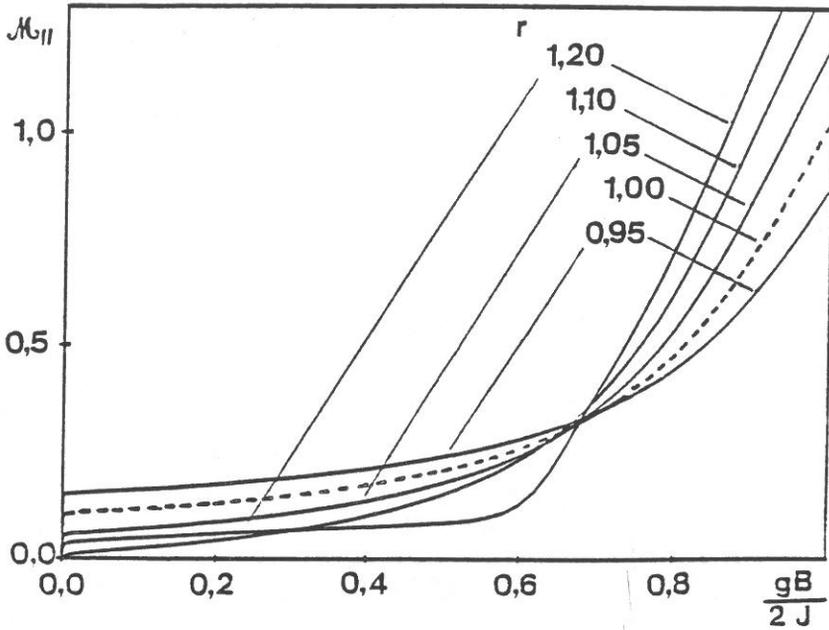


Fig.A15-10 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $k_B T/J = 0,1$, $g=2$, $d=3$).

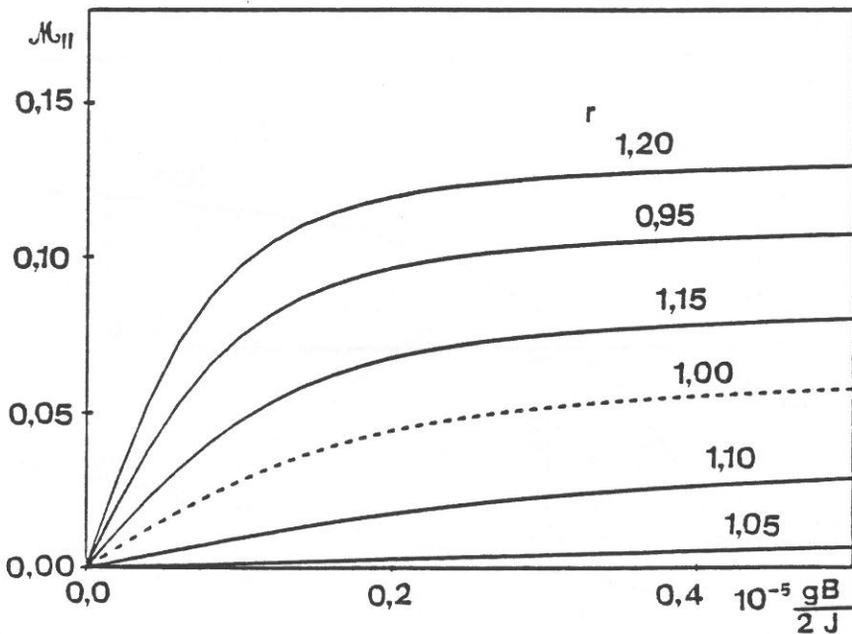


Fig.A15-11 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $k_B T/J = 0,06$, $g=2$, $d=3$) et lorsque $gB/2J$ est très faible.

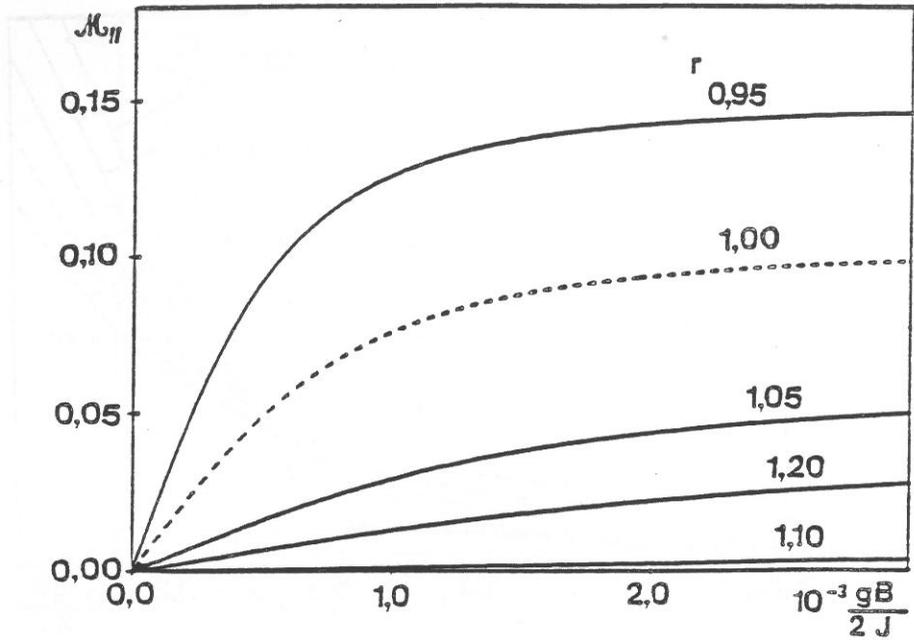


Fig.A15-12 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne ($S,1/2$) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $k_B T/J = 0,1$, $g=2$, $d=3$) et lorsque $gB/2J$ est très faible.

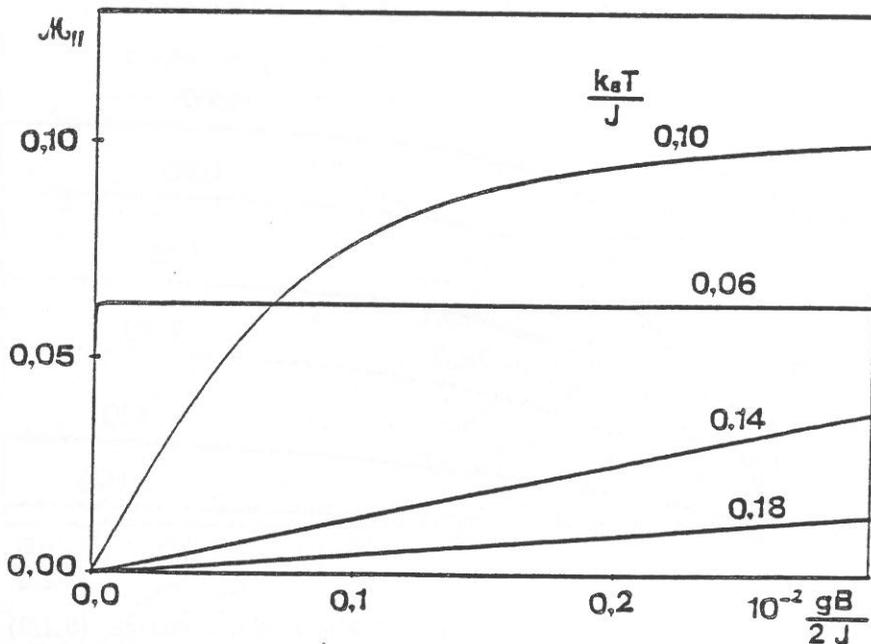


Fig.A15-13 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne ($S,1/2$) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs de $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$, $r=1$, $d=3$) et lorsque $gB/2J$ est très faible.

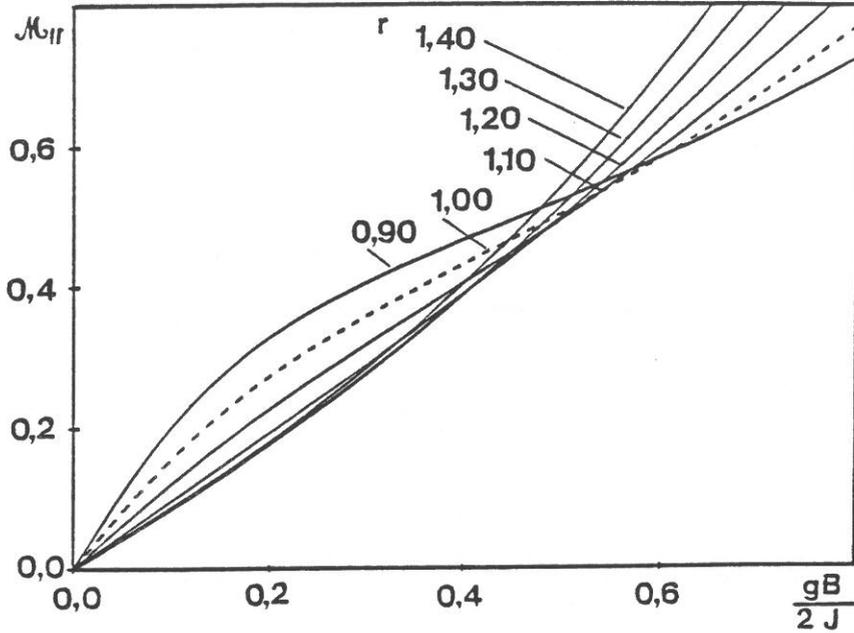


Fig.A15-14 : Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du champ réduit $gB/2J$, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $k_B T/J = 0,3$, $g=2$, $d=3$).

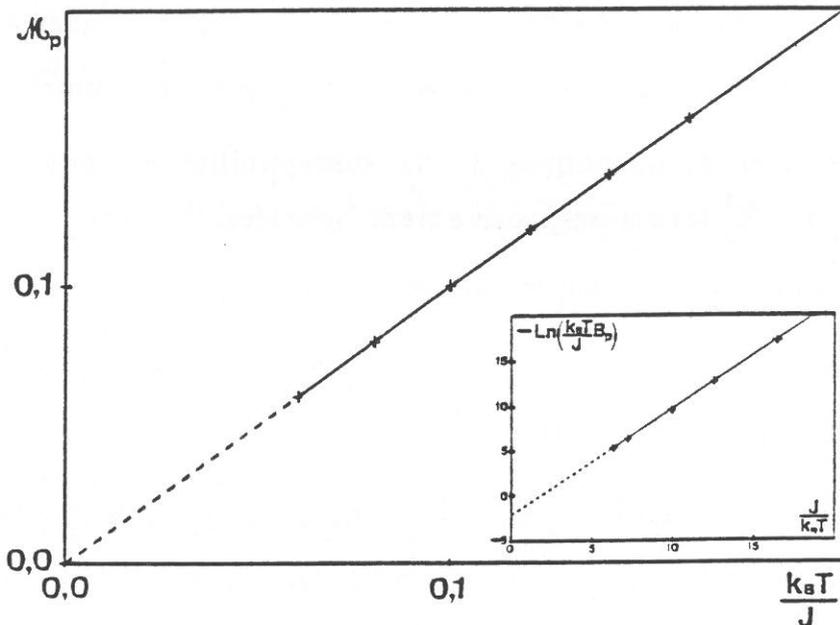


Fig.A15-15 : Variation thermique de la hauteur du plateau M_p de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z, en fonction du rapport $k_B T/J$, à la compensation ($J > 0$, $g=2$, $r=1$, $d=3$) ; encart : variation de $-\ln(k_B T B_p/J)$ en fonction de $J/k_B T$ (B_p est la valeur du champ réduit correspondant au début du plateau).

4- Etude de la longueur de corrélation

Elle est donnée par la relation (A1-15) avec ici :

$$u = \frac{v_2(0)}{v_1(0)} . \quad (\text{A15-23})$$

A basse température, le rapport tend vers 1 en valeur absolue et, compte tenu de (A15-19 et 20), la longueur de corrélation diverge suivant la loi :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} |\beta J|^{\frac{1-d}{2}} \exp(\beta |J|) . \quad (\text{A15-24})$$

5- Comportement de la susceptibilité perpendiculaire à basse température

Lorsque la chaîne est régulière, l'expression de la susceptibilité perpendiculaire, établie dans le cas général (annexe 14), se réduit à :

$$\chi_{\perp} = \beta \left[M_c^2 X_{\perp}^c + M_q^2 X_{\perp}^q \right] , \quad (\text{A15-25})$$

où M_c et M_q sont les amplitudes respectives des moments associés aux spins classiques et quantiques et où X_{\perp}^c et X_{\perp}^q sont les contributions des moments classiques et quantiques à la susceptibilité perpendiculaire (les quantités βX_{\perp}^c et βX_{\perp}^q seront respectivement appelées "susceptibilité perpendiculaire classique" χ_{\perp}^c et "susceptibilité perpendiculaire quantique" χ_{\perp}^q).

La contribution classique est nulle lorsque les spins classiques sont bloqués le long de l'axe Oz ($d=1$) et nous avons :

$$X_{\perp}^c = \frac{1}{d-1} \left(1 - \frac{T}{P} \right) , \quad d > 1 , \quad (\text{A15-26})$$

où P et T sont donnés par (A15-2 et 4) et :

$$X_{\perp}^q = \frac{U}{P^2} , \quad (\text{A15-27})$$

où d'après (A14-16) :

$$U = \left(\frac{A}{2}\right)^2 \int_0^1 du \left(\mathcal{J}_\nu[a(1+u)] + \mathcal{J}_\nu[a(1-u)] \right)^2 . \quad (\text{A15-28})$$

En utilisant le développement asymptotique de P et T, la susceptibilité perpendiculaire classique s'écrit à basse température :

$$\chi_{\perp}^c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{M_c^2}{|J|} \left(1 + \frac{(d^2-1)(d+1)(d-9)}{64|J|d} \frac{1}{\beta} + \dots \right) , \quad d > 1 . \quad (\text{A15-29})$$

L'étude à basse température de la contribution quantique nécessite, dans cette limite, l'évaluation de l'intégrale U sous la forme (A14-15) :

$$U = \iint dS dS' \operatorname{ch}(aS^z) \frac{\operatorname{sh}[a(S^z+S'^z)]}{a(S^z+S'^z)} \operatorname{ch}(aS'^z) . \quad (\text{A15-30})$$

Compte tenu de la parité de la fonction à intégrer vis-à-vis des variables x et y, et en se plaçant à basse température, nous avons :

$$U \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \rho(x) \rho(y) \frac{\exp(2|a|(x+y))}{|a|(x+y)} dx dy , \quad (\text{A15-31})$$

où nous avons posé :

$$x = S^z , \quad y = S'^z . \quad (\text{A15-32})$$

Pour tenir compte de la nature de l'espace dans lequel s'orientent les spins classiques, nous avons introduit la distribution $\rho(x)$ des valeurs de S^z . L'expression de ρ dépend de d ; nous montrons aisément que :

$$\rho(x) = \delta(x,1) , \quad d=1 , \quad (\text{A15-33})$$

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} , \quad d=2 , \quad (\text{A15-34})$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2}, \quad d=3. \quad (\text{A15-35})$$

La quantité U peut être obtenue en développant l'intégrant en série entière puis en intégrant sur x et y . Nous obtenons alors U sous la forme d'une série :

$$U = \frac{1}{4a\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(2a)^{2k+1}}{2k+1} \left(\frac{\left(k+\nu-\frac{1}{2}\right)!}{k!(k+\nu)!(k+2\nu)!} + \frac{R_{\nu,k}}{2^{2\nu}\sqrt{\pi}(2k)!} \right), \quad (\text{A15-36})$$

où $R_{\nu,n}$ est donné par :

$$R_{\nu,k} = \sum_{\ell=0}^k \frac{\left(\ell-\frac{1}{2}\right)! \left(k-\ell-\frac{1}{2}\right)!}{(\ell+\nu)!(k-\ell+\nu)!}. \quad (\text{A15-37})$$

Pour $\nu=-1/2$ ou 0 ($d=1$ ou 2), $R_{\nu,n}$ prend une valeur simple :

$$R_{-1/2,k} = k+1, \quad R_{0,k} = \pi. \quad (\text{A15-38})$$

Pour $\nu=1/2$ ($d=3$), $R_{\nu,n}$ se réduit à la série :

$$R_{1/2,k} = \frac{4}{k+1} \sum_{\ell=0}^k \frac{1}{2\ell+1}. \quad (\text{A15-39})$$

Remarquons, pour finir que, dans le cas où d est égal à 1, l'expression générale de U se ramène à :

$$U = \text{ch}^2(a) \frac{\text{sh}(2a)}{2a}, \quad d=1. \quad (\text{A15-40})$$

À basse température, pour d égal à 1, nous avons, d'une part :

$$U \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2|a|} \left(\frac{1}{2} \exp(2|a|) \right)^2, \quad d=1, \quad (\text{A15-41})$$

et, d'autre part :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \exp(2|a|), \quad d=1, \quad (\text{A15-42})$$

de sorte que :

$$\frac{U}{P^2} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2|a|}, \quad d=1. \quad (\text{A15-43})$$

Dans le cas où d est supérieur à 1, au voisinage du zéro absolu, le spin classique reste très proche de la direction z de sorte que nous pouvons remplacer x et y respectivement par :

$$x = 1 - \varepsilon \quad , \quad y = 1 - \eta \quad , \quad (\text{A15-44})$$

avec ε et η très petits devant l'unité. Dans ces conditions, la fonction densité d'espace s'écrit :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\pi \sqrt{2\varepsilon}} \quad , \quad d=2 \quad , \quad (\text{A15-45})$$

$\rho(\varepsilon)$ étant toujours donné par (A15-35) lorsque d est égal à 3. Plus généralement, la fonction densité d'espace se présente sous la forme :

$$\rho(\varepsilon) = C \varepsilon^\alpha \quad , \quad C = \left(\frac{\pi^{2\nu-1}}{\sqrt{2}} \right)^{2\nu+1} \quad , \quad \alpha = \frac{d-3}{2} \quad , \quad d=1 \quad . \quad (\text{A15-46})$$

L'expression (A15-30) devient alors :

$$U \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2|a|} \left(\frac{C}{2} \exp(2|a|) \right)^2 \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \varepsilon^\alpha \eta^\alpha \left(1 + \frac{\varepsilon + \eta}{2} \right) \times \exp(-2|a|(\varepsilon + \eta)) \, d\varepsilon \, d\eta \quad , \quad d > 1 \quad , \quad (\text{A15-47})$$

qui, une fois intégrée, s'écrit :

$$U \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2|a|} \left(\frac{C}{2} \exp(2|a|) \frac{\alpha!}{|2a|^{\alpha+1}} \right)^2 \left(1 + \frac{\alpha+1}{2|a|} + \dots \right) \quad , \quad d > 1 \quad . \quad (\text{A15-48})$$

En procédant de la même façon pour calculer l'intégrale P , nous avons :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{C}{2} \exp(2|a|) \frac{\alpha!}{|2a|^{\alpha+1}} + \dots \quad , \quad d > 1 \quad . \quad (\text{A15-49})$$

de telle sorte que, en tenant compte de la définition (A15-46) de α :

$$\frac{U}{P^2} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2|a|} \left(1 + \frac{d-1}{4|a|} + \dots \right) \quad . \quad (\text{A15-50})$$

En utilisant alors les relations (A15-27, 43 et 50), la contribution quantique s'écrit à basse température, quelle que soit la dimension de l'espace où s'orientent les spins classiques :

$$\chi_{\perp}^q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{M_q^2}{|J|} \left(1 + \frac{(d-1)}{2|J|d} \frac{1}{\beta} + \dots \right) . \quad (\text{A15-51})$$

Le comportement des contributions classique et quantique à la susceptibilité perpendiculaire est illustré par la figure A15-16.

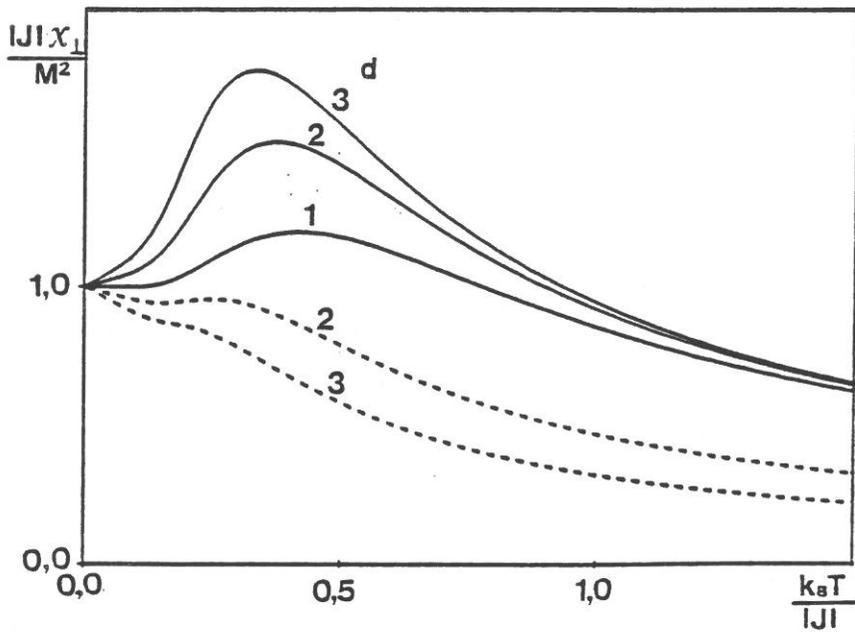


Fig.A15-16 : Variation thermique de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne (S,1/2) régulière présentant un couplage z-z (tireté : contribution classique ; trait plein : contribution quantique ; M représente M_c ou M_q amplitude du moment associé au spin classique ou quantique).

Annexe 16

**EXPRESSIONS DE LA SUSCEPTIBILITE ET DE L'AIMANTATION
PARALLELES, DE LA LONGUEUR DE CORRELATION ET DE LA
SUSCEPTIBILITE PERPENDICULAIRE D'UNE CHAINE REGULIERE
(S,1/2) INFINIE, PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z, AVEC
ALTERNANCE DANS L'ECHANGE.
COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE**

1- Etude de la susceptibilité parallèle

Dans le cas d'une chaîne régulière, avec alternance dans l'échange, les barres de moyenne deviennent inutiles dans l'expression (III-29) de la susceptibilité parallèle :

$$\chi_{//} = \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{r^2 (2R_1 R_2 + T(P-Q)) + 2rP(R_1 + R_2) + P(P+Q)}{P(P-Q)} . \quad (\text{A16-1})$$

En omettant l'indice i , les expressions (A12-28, 38 et 42) se réduisent à :

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = \frac{A}{2} [\mathcal{J}_{\nu}(2a) \pm \mathcal{J}_{\nu}(2\alpha a)] , \quad (\text{A16-2})$$

$$\begin{pmatrix} R_2 \\ R_1 \end{pmatrix} = \frac{A}{2} [2a \mathcal{J}_{\nu+1}(2a) \pm 2\alpha a \mathcal{J}_{\nu+1}(2\alpha a)] , \quad (\text{A16-3})$$

$$T = \frac{A}{4(\nu+1)} [(d-1) \{ (2a)^2 \mathcal{J}_{\nu+2}(2a) + (2\alpha a)^2 \mathcal{J}_{\nu+2}(2\alpha a) \} + \mathcal{J}_{\nu}(2a) + \mathcal{J}_{\nu}(2\alpha a)] , \quad (\text{A16-4})$$

où les quantités A , ν et $\mathcal{J}_k(u)$ sont définies par (A12-23 à 25).

Ici, contrairement aux chaînes non alternées, l'étude est conditionnée par le classement de α par rapport à l'unité ; de plus, nous sommes amenés à distinguer les cas $d=1$ et $d>1$.

Dans le cas où d est égal à 1, la susceptibilité parallèle s'écrit simplement :

$$\chi_{//} = \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{r^2 \operatorname{ch}(2a) + 2r \operatorname{sh}(2a) + \operatorname{ch}(2a)}{\operatorname{ch}(2\alpha a)}, \quad d=1, \quad (\text{A16-5})$$

ou encore :

$$\chi_{//} = \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{(r-1)^2 \exp(-2a) + (r+1)^2 \exp(2a)}{\exp(-2a(1+\epsilon)) + \exp(2a(1+\epsilon))}, \quad d=1, \quad (\text{A16-6})$$

où nous avons posé :

$$\alpha = 1+\epsilon. \quad (\text{A16-7})$$

Dans cette expression, ϵ peut être positif, négatif ou nul ; nous écarterons le cas $\epsilon=-1$ qui correspond à la chaîne régulière et nous nous intéresserons plus particulièrement aux valeurs de ϵ proches de 0, associées à une chaîne fortement dimérisée.

Dans le cas où d est supérieur à 1, nous utiliserons, à basse température, le développement asymptotique (A15-5) des fonctions $\mathcal{J}_k(x)$. Dans ces conditions, la susceptibilité parallèle s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 x_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} & \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}} \exp(-\varepsilon\beta|J|)}{1 + \frac{\exp(\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}}} \left[X_1 \left(r - \frac{J}{|J|} \right)^2 \right. \\
 & + \frac{2\nu+1}{8\beta J} \left(r^2 X_2 - 2r \frac{J}{|J|} X_3 + X_4 \right) + \frac{2\nu+1}{2(8\beta J)^2} \left(r^2 X_5 - 2r \frac{J}{|J|} X_6 + X_7 \right) \\
 & \left. + r^2 \frac{2\nu+1}{2(\beta J)^2} \frac{\exp(-2\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{2\nu+1}} + \dots \right], \quad d > 1, \quad (\text{A16-8})
 \end{aligned}$$

avec :

$$X_1 = 1 + \frac{\exp(-\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}} \left[1 + \frac{2\nu+1}{8(1+\varepsilon)\beta J} \left(1 + \frac{(2\nu+1)(4\nu^2-9)}{16(1+\varepsilon)\beta J} \right) + \dots \right], \quad (\text{A16-9})$$

$$X_2 = 2(2\nu+3) + \frac{\exp(-\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}} (2\nu+7) \left(1 + \frac{4\nu^2-1}{8(1+\varepsilon)\beta J} \right) + \dots, \quad (\text{A16-10})$$

$$X_3 = 2(2\nu+1) + \frac{\exp(-\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}} (2\nu+3) \left(1 + \frac{4\nu^2-1}{8(1+\varepsilon)\beta J} \right) + \dots, \quad (\text{A16-11})$$

$$X_4 = (2\nu-1) \left[2 + \frac{\exp(-\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}} \left(1 + \frac{4\nu^2-1}{8(1+\varepsilon)\beta J} \right) + \dots \right], \quad (\text{A16-12})$$

$$X_5 = (2\nu+3) \left[4(4\nu^2+8\nu-1) + \frac{\exp(-\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}} (4\nu^2+24\nu+19) + \dots \right], \quad (\text{A16-13})$$

$$X_6 = (2\nu+3) \left[4(4\nu^2-1) + \frac{\exp(-\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}} (2\nu+5)(2\nu-1) + \dots \right], \quad (\text{A16-14})$$

$$X_7 = (2\nu-1) \left[4(4\nu^2-5) + \frac{\exp(-\varepsilon\beta|J|)}{(1+\varepsilon)^{\nu+\frac{1}{2}}} (4\nu^2-9) + \dots \right]. \quad (\text{A16-15})$$

$0 < \alpha < 1$ (ou $-1 < \varepsilon < 0$) : toutes les interactions sont de même signe

$J > 0$: tous les couplages sont antiferromagnétiques

* $r \neq 1$: les moments d'une même cellule ont des amplitudes différentes

Quelle que soit la dimensionnalité d , le comportement de la susceptibilité parallèle est donné par :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \alpha^{\frac{d-1}{2}} (r-1)^2 \exp((1-\alpha)\beta J). \quad (\text{A16-16})$$

Elle diverge au zéro absolu comme $\beta \exp((1-\alpha)\beta J)$.

* $r=1$: les moments ont la même amplitude

$d=1$:

Le premier terme du développement (A16-6) s'annule et le terme dominant devient :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 4\beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \exp(-(1+\alpha)\beta J), \quad d=1. \quad (\text{A16-17})$$

La susceptibilité parallèle tend vers 0 au zéro absolu.

$d > 1$:

Les deux premiers termes du développement (A16-8)

s'annulent, le dernier tend vers 0, de sorte que le terme dominant devient :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{(d-1)^2 \alpha^{\frac{d-1}{2}}}{4J} \times \frac{\exp((1-\alpha)\beta J)}{\beta J}, \quad d > 1. \quad (\text{A16-18})$$

La susceptibilité diverge comme $\beta^{-1} \exp((1-\alpha)\beta J)$.

$J < 0$: tous les couplages sont ferromagnétiques

Le comportement dominant de la susceptibilité parallèle est donné par :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \alpha^{\frac{d-1}{2}} (r+1)^2 \exp((1-\alpha)\beta |J|). \quad (\text{A16-19})$$

La susceptibilité diverge comme $\beta \exp((1-\alpha)\beta |J|)$, comme dans le cas $\{J > 0, r = 1\}$ mais avec un coefficient de divergence plus fort. Ces comportements sont illustrés par les figures A16-1 à 3.

$\alpha > 1$ (ou $\varepsilon < 0$) : si J est positif, le couplage le plus fort est antiferromagnétique ; il est ferromagnétique si J est négatif

$J > 0$:

$d=1$:

L'expression (A16-6) permet d'écrire dans ce cas :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 [(r-1)^2 \exp((1-\alpha)\beta J) + (r+1)^2 \exp(-(1+\alpha)\beta J)], \quad d=1. \quad (\text{A16-20})$$

La susceptibilité tend vers 0 à basse température comme

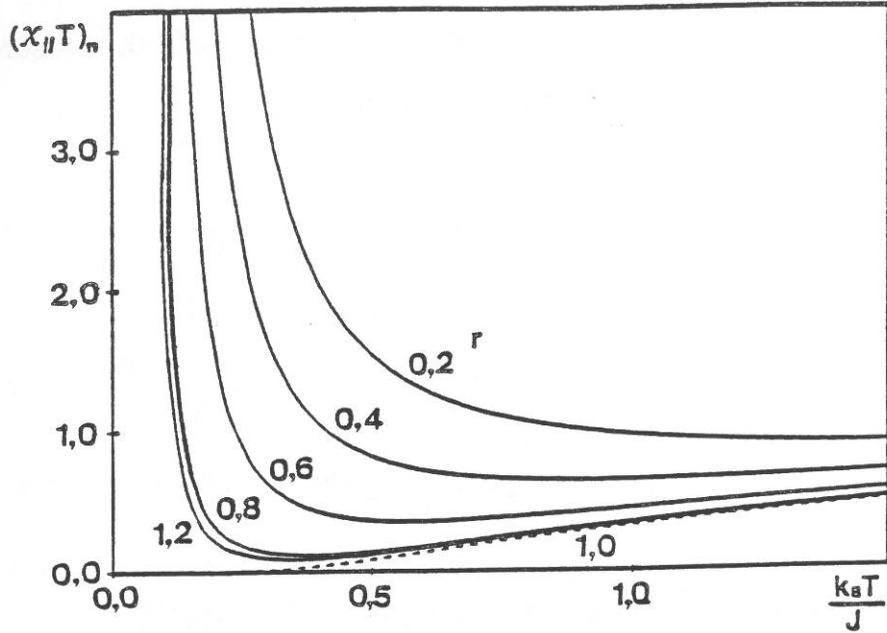


Fig.A16-1 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de r ($J > 0$, $g=2$, $d=1$, $\alpha=0,5$).

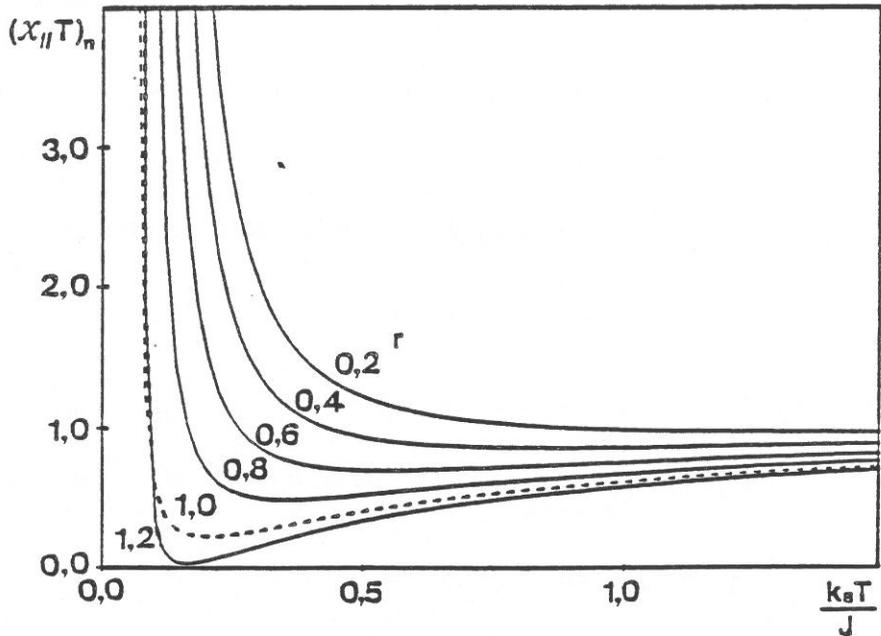


Fig.A16-2 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de r ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $\alpha=0,5$).

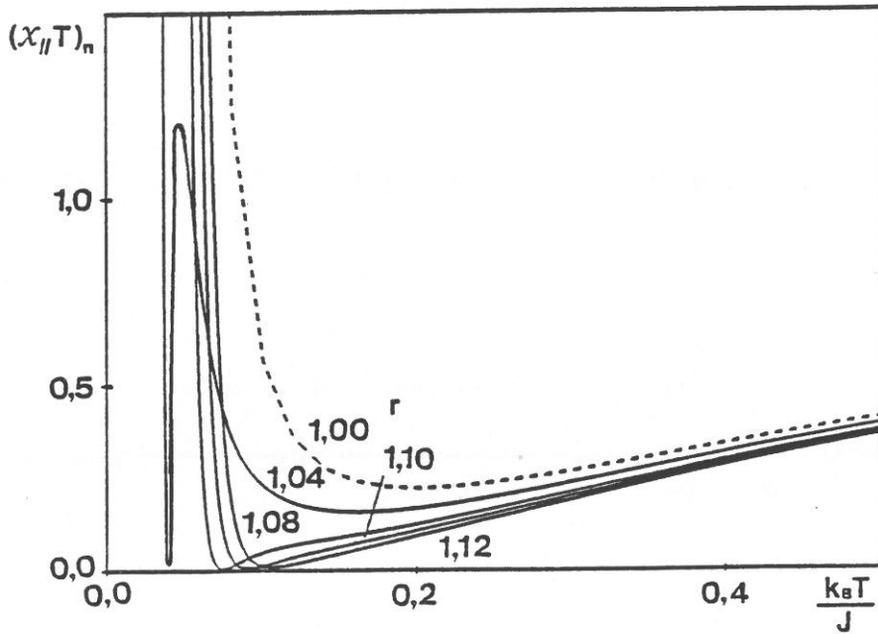


Fig.A16-3 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $\alpha=0,5$).

$\beta \exp(-(\alpha-1)\beta J)$ si $r \neq 1$ ou comme $\beta \exp(-(\alpha+1)\beta J)$ si $r=1$.
La décroissance de la susceptibilité, à l'approche du zéro absolu, est plus rapide lorsque les moments sont compensés.

$d > 1$:

L'expression (A16-8) se réduit à :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{r^2 (d-1)}{2(\alpha\beta J)^2}, \quad d > 1. \quad (\text{A16-21})$$

Elle traduit un comportement linéaire en T au voisinage du zéro absolu.

$J < 0$:

$d = 1$:

L'expression (A16-6) s'écrit ici :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 (r+1)^2 \exp(- (1+\alpha)\beta |J|), \quad d=1. \quad (\text{A16-22})$$

La susceptibilité tend vers 0 à basse température comme $\beta \exp(- (1+\alpha)\beta |J|)$, quel que soit r .

$d > 1$:

L'expression (A16-8) s'écrit ici :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{r^2 (d-1)}{2(\alpha\beta J)^2}, \quad d > 1. \quad (\text{A16-23})$$

La susceptibilité tend vers 0 à basse température suivant une loi linéaire en T . Ces comportements sont illustrés par les figures A16-4 à 9.

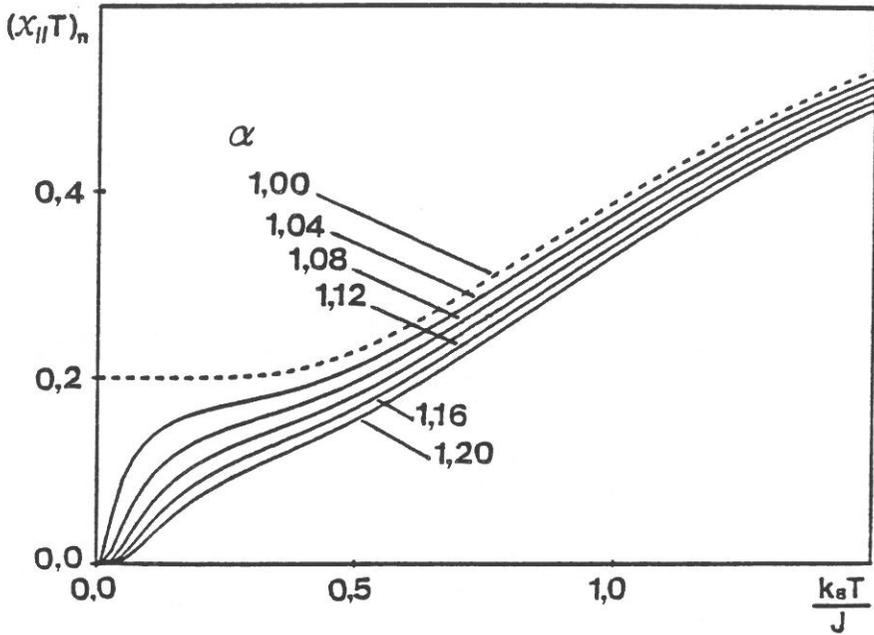


Fig.A16-4 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S, 1/2)$ présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de α supérieures à 1 ($J > 0$, $g=2$, $d=1$, $r=0,5$).

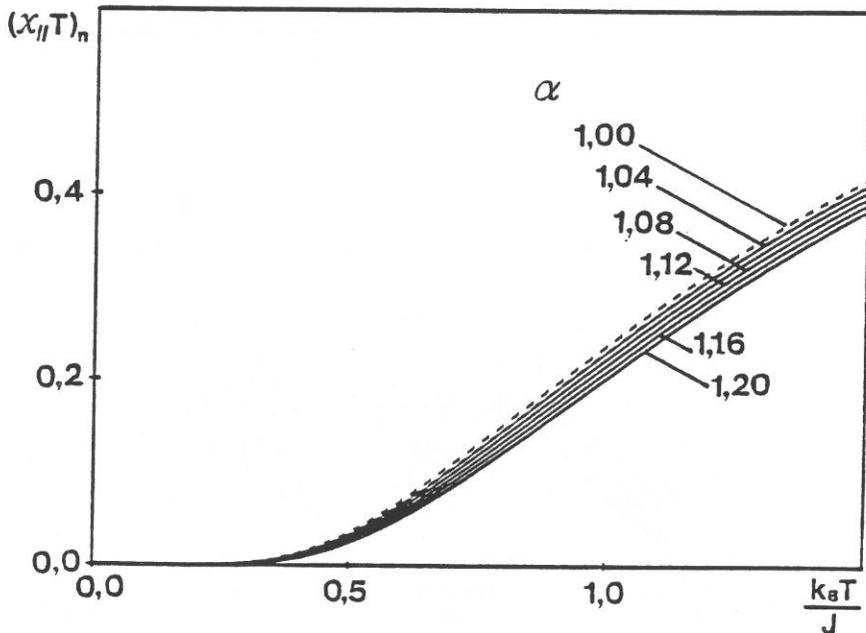


Fig.A16-5 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S, 1/2)$ présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de α supérieures à 1, à la compensation ($J > 0$, $g=2$, $d=1$, $r=1$).

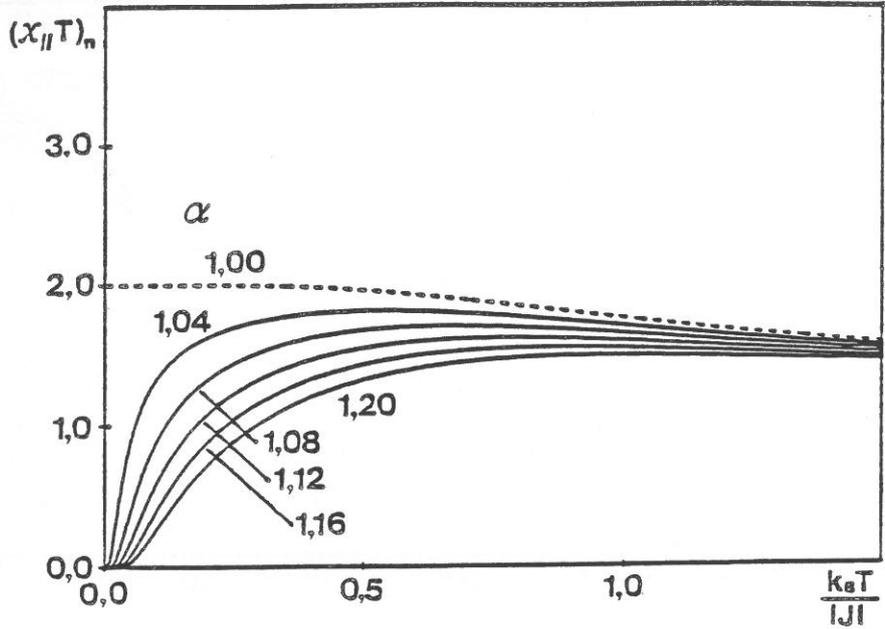


Fig.A16-6 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de α supérieures à 1 ($J < 0$, $g=2$, $d=1$, $r=1$).

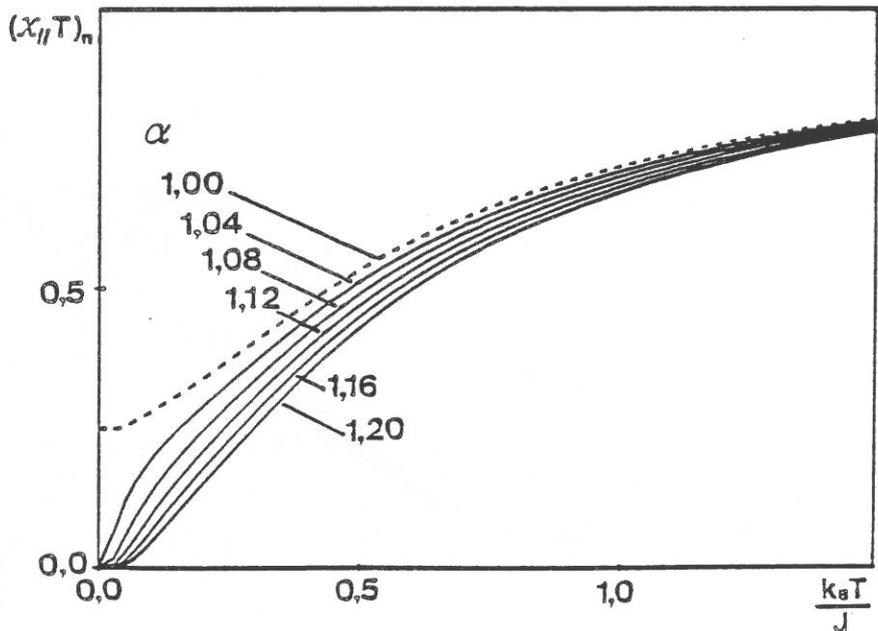


Fig.A16-7 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de α supérieures à 1 ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $r=0,5$).

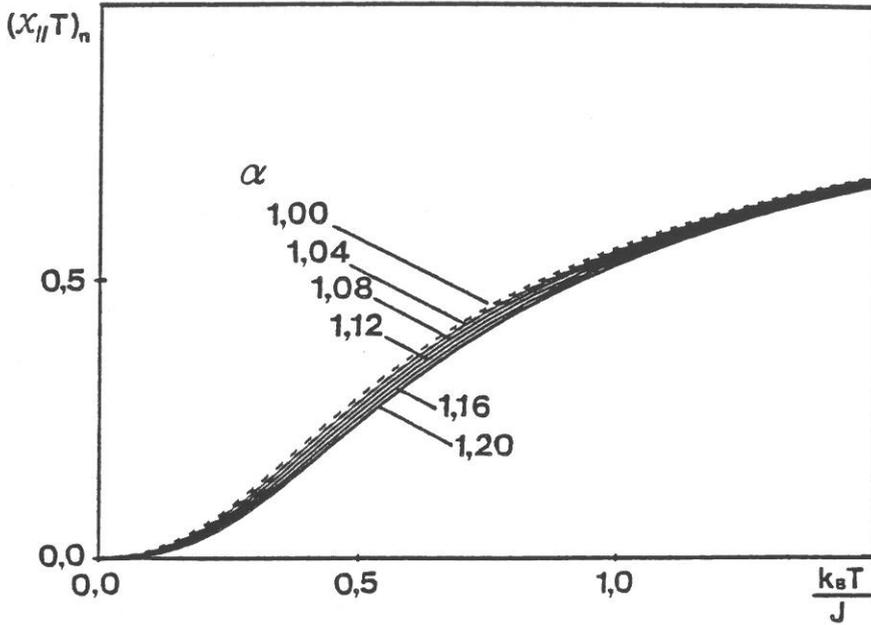


Fig.A16-8 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de α supérieures à 1, à la compensation ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $r=1$).

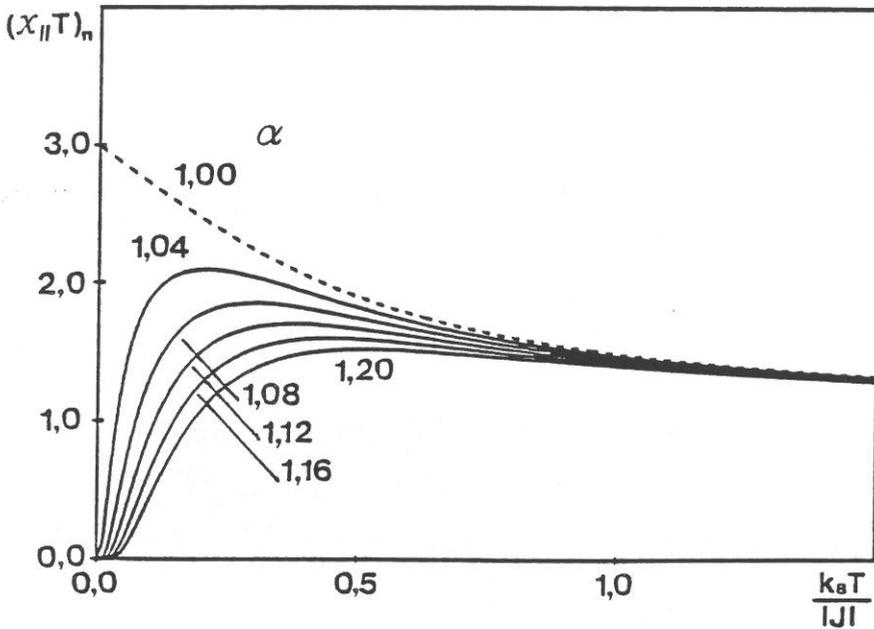


Fig.A16-9 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de α supérieures à 1 ($J < 0$, $g=2$, $d=3$, $r=1$).

$\alpha=1$ (ou $\varepsilon=0$) : la chaîne est constituée de dimères

$J>0$:

* $r \neq 1$:

Les expressions (A16-6 et 8) se réduisent à (loi de Curie) :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 (r-1)^2 . \quad (\text{A16-24})$$

* $r=1$:

$d=1$:

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 4\beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \exp(-2\beta J) , \quad d=1 . \quad (\text{A16-25})$$

$d>1$:

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{d^2-1}{2\beta J^2} , \quad d>1 . \quad (\text{A16-26})$$

$J<0$:

Quelle que soit la dimensionnalité du système, nous avons (loi de Curie) :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 (r+1)^2 . \quad (\text{A16-27})$$

Ces comportements sont illustrés par les figures A16-10 à 12.

2- Expression de l'aimantation parallèle

Comme dans le cas de la chaîne régulière (annexe 15), il est possible de mettre le produit des matrices de transfert (\mathcal{T}_i) sous la forme (A15-17). Là encore, en se plaçant dans la limite des chaînes de très grande longueur, la fonction de partition rapportée à une cellule est

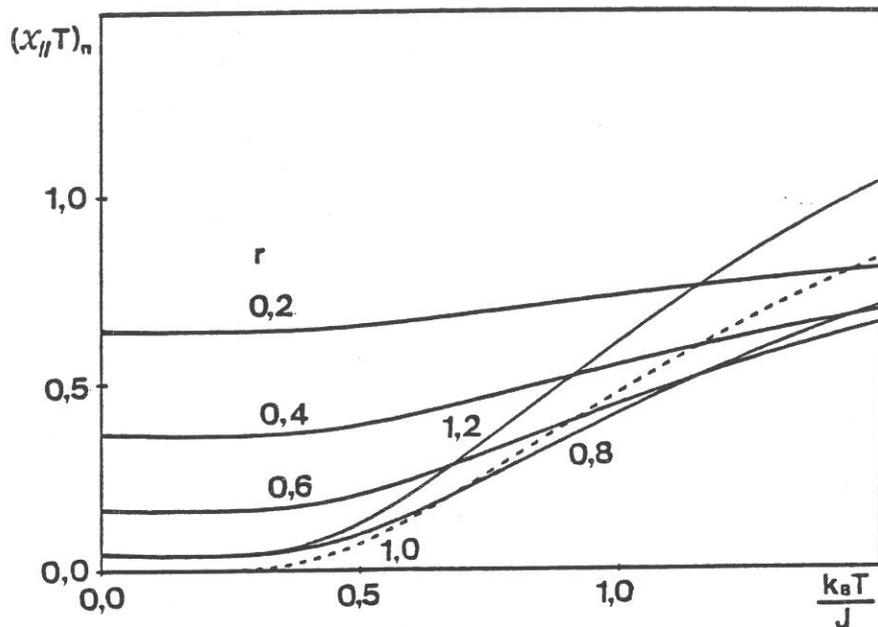


Fig.A16-10 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de r ($J>0$, $\alpha=1$, $g=2$, $d=1$).

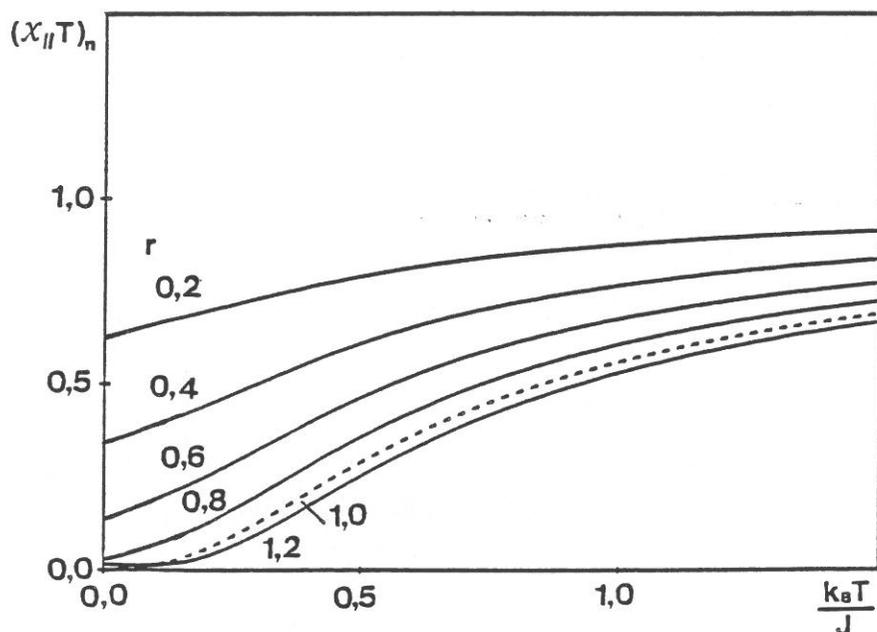


Fig.A16-11 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de r ($J>0$, $\alpha=1$, $g=2$, $d=3$).

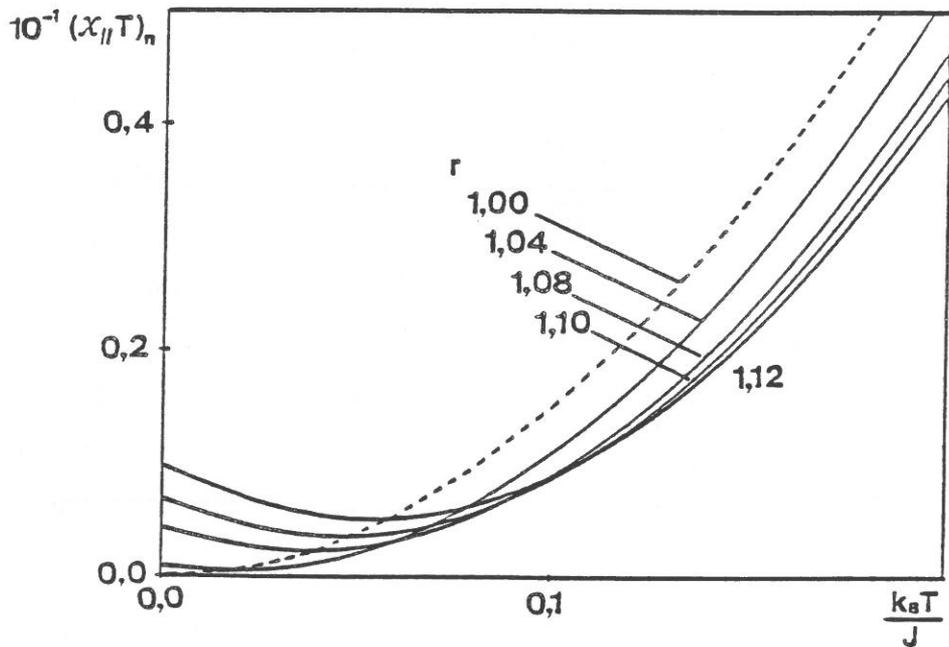


Fig.A16-12 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné, pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J > 0$, $\alpha=1$, $g=2$, $d=3$).

donnée par la valeur propre dominante $v_1(B)$ de la matrice (\mathcal{T}) . En posant :

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix} = 2a \pm \beta r B \quad , \quad \begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix} = 2\alpha a \pm \beta r B \quad , \quad (\text{A16-28})$$

$$\mathcal{S} = \frac{A}{2} \left[\exp\left(\beta \frac{g}{2} B\right) \mathcal{J}_v(x) + \exp\left(-\beta \frac{g}{2} B\right) \mathcal{J}_v(x') \right] \quad , \quad (\text{A16-29})$$

$$\mathcal{P} = \left(\frac{A}{2}\right)^2 [\mathcal{J}_v(x) \mathcal{J}_v(x') - \mathcal{J}_v(y) \mathcal{J}_v(y')] \quad , \quad (\text{A16-30})$$

les valeurs propres de (\mathcal{T}) s'écrivent :

$$\begin{pmatrix} v_1(B) \\ v_2(B) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{S} \pm \sqrt{\mathcal{S}^2 - 4\mathcal{P}} \right) \quad . \quad (\text{A16-31})$$

L'aimantation parallèle est alors donnée par :

$$\mathcal{M}_{//} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \text{Ln}(v_1(B))}{\partial B} \quad . \quad (\text{A16-32})$$

Le calcul de cette expression, comme dans le cas de la chaîne régulière, ne présente pas de difficultés. L'alternance dans l'échange n'introduit pas de comportement original, sauf pour certains cas de compensation. Ces situations sont tout à fait marginales et nous ne les avons pas étudiées en détail.

3- Etude de la longueur de corrélation

Le calcul de la longueur de corrélation ξ s'effectue comme dans le cas d'une chaîne régulière. Les relations (A1-15) et (A15-23) permettent d'écrire :

$$\xi^2 \underset{\tau \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \frac{|v_2(0)| (|v_1(0)| + |v_2(0)|)}{(|v_1(0)| - |v_2(0)|)^2} \quad , \quad (\text{A16-33})$$

avec ici :

$$\begin{pmatrix} v_1(0) \\ v_2(0) \end{pmatrix} = A |\mathcal{J}_v(2a) \pm \mathcal{J}_v(2\alpha a)| . \quad (\text{A16-34})$$

Nous en déduisons :

$$0 < \alpha < 1 \quad \xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \alpha^{\frac{d-1}{2}} \exp(\beta |J|(1-\alpha)) , \quad (\text{A16-35})$$

$$\alpha > 1 \quad \xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \alpha^{\frac{1-d}{2}} \exp(\beta |J|(\alpha-1)) . \quad (\text{A16-36})$$

Si α est différent de 1, la longueur de corrélation diverge comme $\exp(\beta |J|(1-\alpha))$ à basse température. Dans le cas $\alpha=1$ (chaînes de dimères), la notion de longueur de corrélation perd son sens.

4- Etude de la susceptibilité perpendiculaire

Comme dans le cas de la chaîne régulière, nous avons ici :

$$\chi_{\perp} = \beta \left[M_c^2 X_{\perp}^c + M_q^2 X_{\perp}^q \right] , \quad (\text{A16-37})$$

où M_c et M_q sont les amplitudes respectives des moments associés aux spins classique et quantique. La contribution classique X_{\perp}^c est nulle pour $d=1$ et, pour $d>1$, nous avons :

$$X_{\perp}^c = \frac{1}{d-1} \left(1 - \frac{T}{P} \right) , \quad d>1 , \quad (\text{A16-38})$$

où P et T sont donnés par (A16-2 et 4). La contribution quantique X_{\perp}^q s'écrit :

$$X_{\perp}^q = \frac{U}{P^2} , \quad (\text{A16-39})$$

où, d'après (A14-16), nous avons :

$$U = \left(\frac{A}{2}\right)^2 \int_0^1 du [\mathcal{J}_v(ua_+ + a_-) + \mathcal{J}_v(ua_+ - a_-)] \\ \times [\mathcal{J}_v(a_+ + ua_-) + \mathcal{J}_v(a_+ - ua_-)] , \quad (\text{A16-40})$$

avec :

$$a_{\pm} = -\frac{\beta}{2} (J_+ \pm J_-) . \quad (\text{A16-41})$$

L'étude des comportements, à basse température, se conduit comme dans le cas de la chaîne régulière (annexe 15). Nous avons :

$0 < \alpha \leq 1$:

$$\chi_{\perp}^c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{M_c^2}{|J|} \left(1 + \frac{(d^2-1)(d+1)(d-9)}{64|J|d} \frac{1}{\beta} + \dots \right) , \quad (\text{A16-42})$$

$$\chi_{\perp}^q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{M_q^2}{|J|} \left(1 + \frac{d-1}{2|J|} \frac{1}{\beta} + \dots \right) . \quad (\text{A16-43})$$

$\alpha > 1$:

$$\chi_{\perp}^c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{M_c^2}{\alpha|J|} \left(1 + \frac{(d^2-1)(d+1)(d-9)}{64\alpha|J|d} \frac{1}{\beta} + \dots \right) , \quad (\text{A16-44})$$

$$\chi_{\perp}^q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{M_q^2}{\alpha|J|} \left(1 + \frac{d-1}{2\alpha|J|} \frac{1}{\beta} + \dots \right) . \quad (\text{A16-45})$$

Ces comportements sont illustrés par les figures A16-13 à 15.

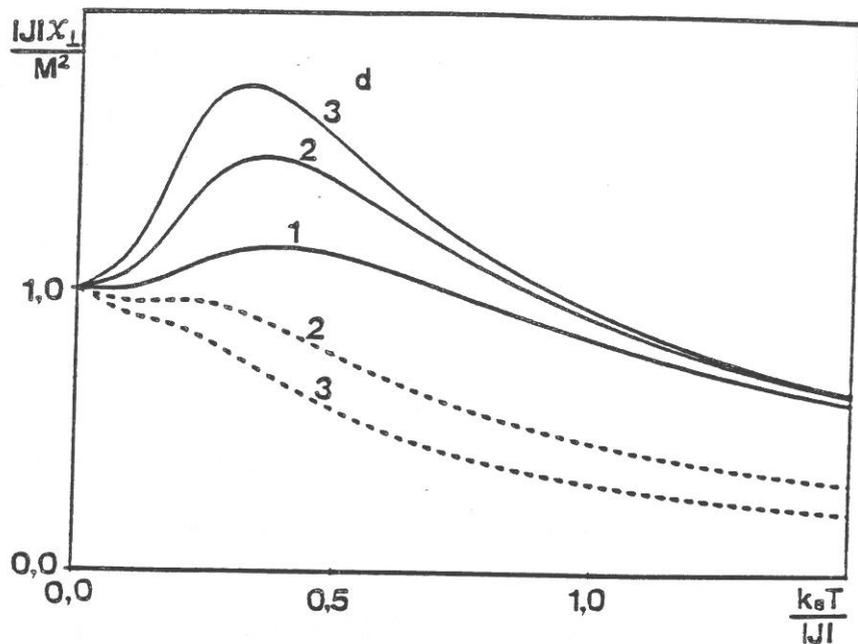


Fig.A16-13 : Variation thermique de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne ($S, 1/2$) présentant un couplage z-z et un échange alterné ($\alpha=0,5$; tireté : contribution classique ; trait plein : contribution quantique ; M représente M_c ou M_q amplitude du moment associé au spin classique ou quantique).

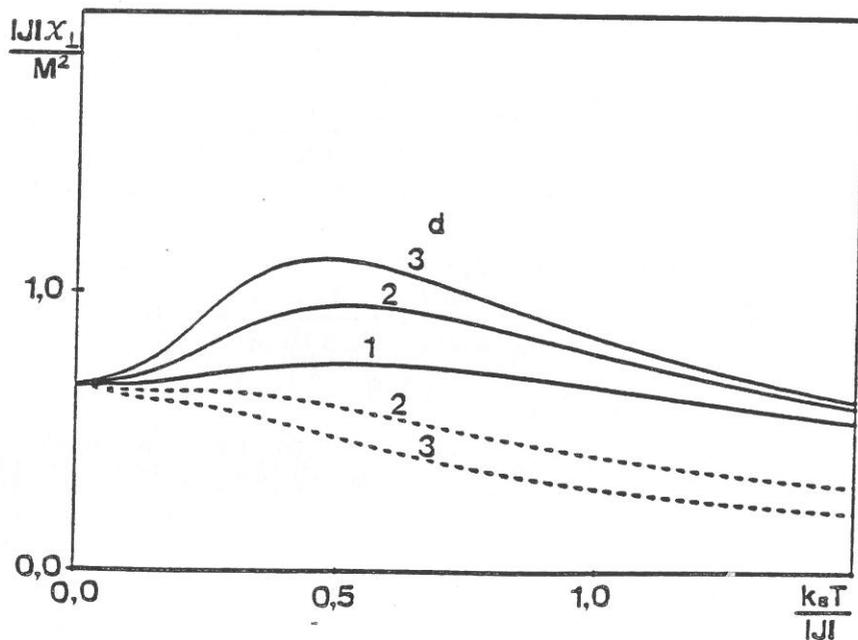


Fig.A16-14 : Variation thermique de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne ($S, 1/2$) présentant un couplage z-z et un échange alterné ($\alpha=1,5$; tireté : contribution classique ; trait plein : contribution quantique ; M représente M_c ou M_q amplitude du moment associé au spin classique ou quantique).

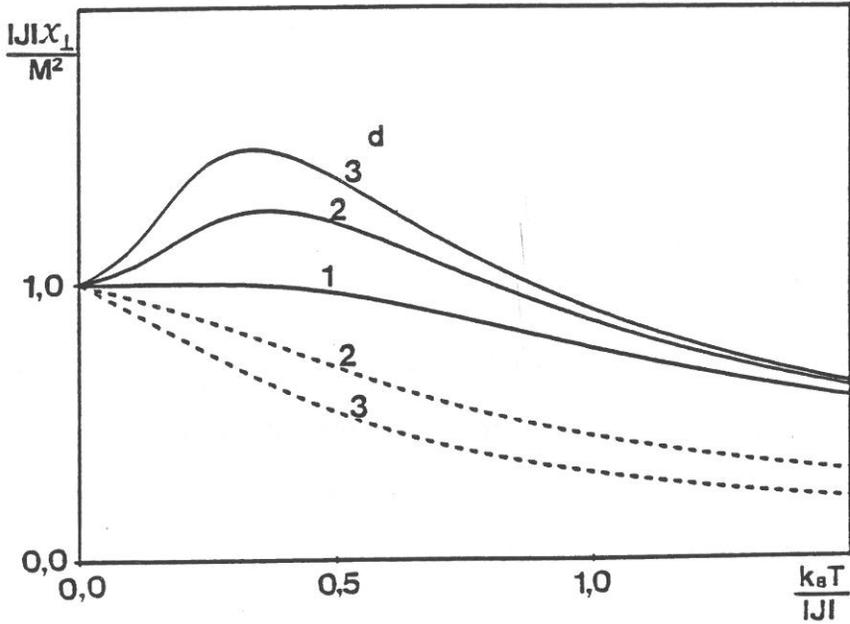


Fig.A16-15 : Variation thermique de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et un échange alterné ($\alpha=1$; tireté : contribution classique ; trait plein : contribution quantique ; M représente M_c ou M_q amplitude du moment associé au spin classique ou quantique).

Annexe 17

**CHAINE CLASSIQUE-QUANTIQUE ALTERNEE (S,1/2) INFINIE
PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z A CARACTERE ALEATOIRE.
COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE DES SUSCEPTIBILITES
PARALLELE ET PERPENDICULAIRE**

Nous supposons ici aussi que la nature des moments est la même d'une cellule à l'autre. Il en résulte que le rapport r du moment classique au moment quantique est constant. Par ailleurs, les paires $(J_{i,+}, J_{i,-})$ peuvent présenter une distribution aléatoire dont l'incidence sur les propriétés magnétiques fait l'objet de cette annexe. Cette discussion suit le même plan que la discussion de l'annexe 7, concernant les chaînes classique-quantique isotropes, à couplage aléatoire.

1- Etude de la susceptibilité parallèle

Dans ces conditions, l'expression (III-29) de la susceptibilité parallèle devient :

$$\chi_{//} = \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 r^2 \frac{(2\bar{n}_1 \bar{n}_2 + \bar{t}(1 - \bar{m})) + 2r(\bar{n}_1 + \bar{n}_2) + 1 + \bar{m}}{1 - \bar{m}}, \quad (\text{A17-1})$$

avec :

$$\bar{m} = \left(\frac{Q}{P} \right), \quad (\text{A17-2})$$

$$\bar{n}_1 = \left(\frac{R_1}{P} \right), \quad \bar{n}_2 = \left(\frac{R_2}{P} \right), \quad (\text{A17-3})$$

$$\bar{t} = \left(\frac{T}{P} \right) . \quad (\text{A17-4})$$

Compte tenu des expressions des quantités P, Q, R₁, R₂ et T (A12-28, 38 et 42) et de la définition de la valeur moyenne (A4-6), nous avons simplement :

$$\bar{m} = \iint_{\mathcal{D}} dJ_+ dJ_- f(J_+, J_-) \frac{\mathcal{J}_\nu[u(J_+, J_-)] - \mathcal{J}_\nu[v(J_+, J_-)]}{\mathcal{J}_\nu[u(J_+, J_-)] + \mathcal{J}_\nu[v(J_+, J_-)]} , \quad (\text{A17-5})$$

$$\left(\frac{\bar{n}_2}{\bar{n}_1} \right) = \iint_{\mathcal{D}} dJ_+ dJ_- f(J_+, J_-) \frac{u(J_+, J_-) \mathcal{J}_{\nu+1}[u(J_+, J_-)] \pm v(J_+, J_-) \mathcal{J}_{\nu+1}[v(J_+, J_-)]}{\mathcal{J}_\nu[u(J_+, J_-)] + \mathcal{J}_\nu[v(J_+, J_-)]} , \quad (\text{A17-6})$$

$$\bar{t} = \frac{1}{2(\nu+1)} (1 + (2\nu-1)x$$

$$x \left. \iint_{\mathcal{D}} dJ_+ dJ_- f(J_+, J_-) \frac{u^2(J_+, J_-) \mathcal{J}_{\nu+2}[u(J_+, J_-)] + v^2(J_+, J_-) \mathcal{J}_{\nu+2}[v(J_+, J_-)]}{\mathcal{J}_\nu[u(J_+, J_-)] + \mathcal{J}_\nu[v(J_+, J_-)]} \right\} \quad (\text{A17-7})$$

où :

$$u(J_+, J_-) = -\frac{\beta}{2} (J_+ + J_-) , \quad v(J_+, J_-) = -\frac{\beta}{2} (J_+ - J_-) , \quad (\text{A17-8})$$

et où $f(J_+, J_-)$ caractérise la distribution \mathcal{D} des paires (J_+, J_-) .

Vers les très basses températures, les quantités $|J_+ + J_-|$ et $|J_+ - J_-|$ deviennent très grandes sauf si $|J_+|$ et $|J_-|$ sont égaux. Si, ni J_+ , ni J_- ne sont nuls avec une probabilité finie, l'une de ces deux quantités finit toujours par l'emporter sur l'autre. Si nous nous reportons à la figure II-13, $|J_+ + J_-|$ l'emporte dans les régions I et III, alors que $|J_+ - J_-|$ l'emporte dans les régions II et IV. Un très grand nombre de cas de figures peuvent se présenter. Pour illustrer ce problème, nous considérons

seulement trois d'entre eux : le cas (a) où J_+ et J_- prennent indépendamment l'un de l'autre des valeurs positives ou négatives (la distribution des points représentant les paramètres d'échange associés à chaque paire (J_+, J_-) s'étend aux quatre quadrants du plan) ; le cas (b) où les paires sont représentées par des points qui occupent les quadrants I et III du plan (J_+, J_-) ; le cas (c) où J_+ et J_- sont distribués aléatoirement mais ont le même signe au sein de chaque cellule élémentaire.

Etude du cas (a)

En utilisant le développement asymptotique (A15-5) de la fonction $\mathcal{J}_k(x)$ ($d > 1$) ou son expression au moyen des fonctions hyperboliques ($d=1$), nous montrons facilement que, si T tend vers 0, \bar{m}_i tend vers 1 pour tous les points des régions I et III et vers -1 pour ceux des régions II et IV. Donc, en appelant p_I, p_{II}, p_{III} ou p_{IV} les probabilités respectives pour que la paire courante (J_+, J_-) tombe dans les régions I, II, III ou IV, nous avons :

$$\bar{m} \xrightarrow{T \rightarrow 0} p_I + p_{III} - (p_{II} + p_{IV}) , \quad (\text{A17-9})$$

de sorte que (la somme des probabilités étant égale à 1) :

$$1 - \bar{m} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 2(p_{II} + p_{IV}) . \quad (\text{A17-10})$$

A l'aide des relations (A17-6 et 7), nous obtenons de la même façon :

$$\bar{n}_1 + \bar{n}_2 \xrightarrow{T \rightarrow 0} \varepsilon (p_I - p_{III}) , \quad (\text{A17-11})$$

où ε représente le signe de $u(J_+, J_-)$; d'autre part :

$$\bar{t} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 1 . \quad (\text{A17-12})$$

Dans ce cas, $1 - \bar{m}$ ne s'annule pas au zéro absolu. Le produit $\chi_{//} T$ a donc une

limite finie et la susceptibilité observe, à basse température, un comportement décrit par une pseudo-loi de Curie :

$$\chi_{//} = \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \left(\frac{r^2 ((p_I - p_{III})^2 - (p_{II} - p_{IV})^2) + 2r\epsilon(p_I - p_{III}) + p_I + p_{III}}{p_{II} + p_{IV}} + r^2 \right) \quad (\text{A17-13})$$

Le coefficient de la loi en $1/T$ dépend de la répartition des paires (J_+, J_-) parmi les quatre quadrants. Nous pouvons montrer qu'il n'existe pas de valeurs de r qui l'annulent. Ce comportement est illustré, dans le cas d'une distribution carrée homogène, par les figures A17-1 et 2.

Etude du cas (b)

Ce cas peut être considéré comme un cas particulier du cas (a), obtenu en imposant à p_{II} et p_{IV} d'être nulles. Dans ces conditions, le numérateur de la fraction présente dans l'expression (A17-12) se réduit à $(r(2p_I - 1) - 1)^2$. En revanche, le dénominateur est nul, ce qui signifie que, sauf si r prend la valeur $(2p_I - 1)^{-1}$, le produit $\chi_{//}T$ diverge comme $(1 - \bar{m})^{-1}$. Pour mieux connaître le type de divergence, nous sommes conduits à étudier le comportement, à basse température, de $1 - \bar{m}$. Avec le changement de variable (A17-8), la nouvelle distribution \mathcal{D}' des paramètres u' et v' est donnée par :

$$g(u', v') = \frac{1}{2} f\left(\frac{u' + v'}{2}, \frac{u' - v'}{2}\right), \quad (\text{A17-14})$$

de sorte que, si la distribution ne présente pas de caractère pathologique, et en remarquant que, dans ce cas précis, $|u'|$ est supérieur à $|v'|$, nous avons d'après (A17-5, 6 et 7) :

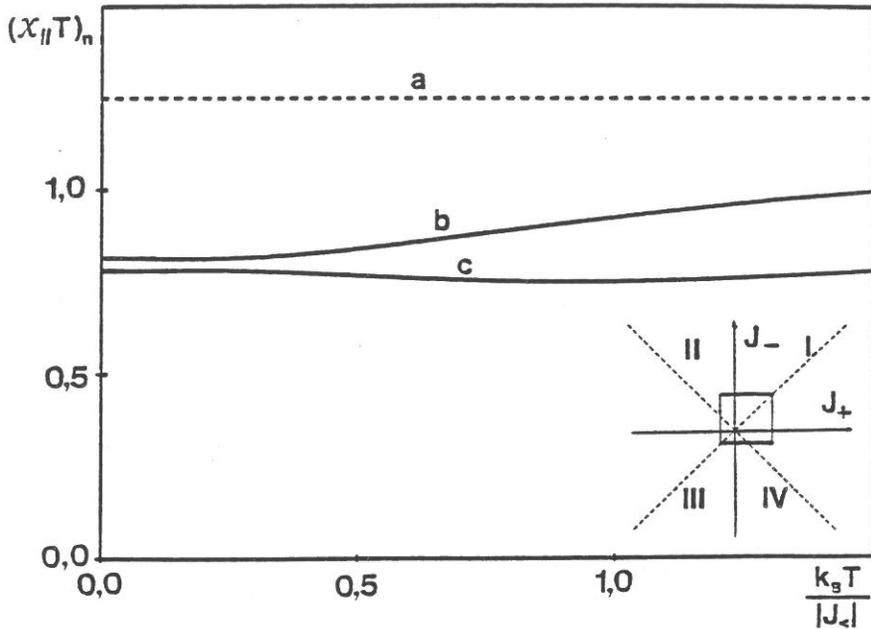


Fig.A17-1 : Variation thermique du produit $(X_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z à caractère aléatoire ($J_{<} \ll J_{>} \ll J_{>}$, $J_{<} \ll J_{+} \ll J_{>}$, $J_{<} = -10\text{K}$; cas a : $J_{>} = 10\text{K}$; cas b : $J_{>} = 20\text{K}$; cas c : $J_{>} = 40\text{K}$; $g=2$, $d=1$, $r=0,5$).

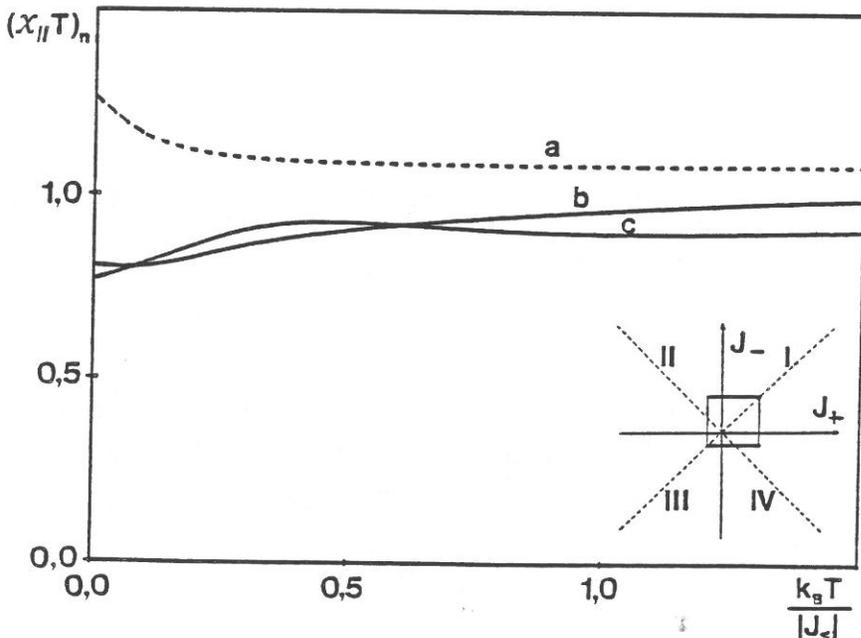


Fig.A17-2 : Variation thermique du produit $(X_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z à caractère aléatoire ($J_{<} \ll J_{>} \ll J_{>}$, $J_{<} \ll J_{+} \ll J_{>}$, $J_{<} = -10\text{K}$; cas a : $J_{>} = 10\text{K}$; cas b : $J_{>} = 20\text{K}$; cas c : $J_{>} = 40\text{K}$; $g=2$, $d=3$, $r=0,5$).

$$1 - \overline{m} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2 \iint_{\mathcal{D}'} du' dv' g(u', v') \left| \frac{u'}{v'} \right|^{\nu + \frac{1}{2}} \exp(|v'| - |u'|) . \quad (\text{A17-15})$$

La manière dont $1 - \overline{m}$ tend vers 0 est conditionnée à la fois par la valeur de ν (en fait celle de d) et par la distribution de J_+ et J_- (à la rigueur, nous pouvons imaginer des distributions de J_+ et J_- marquées par une accumulation suffisamment forte au voisinage de 0 pour que l'intégrale $1 - \overline{m}$ ne tende pas vers 0).

Si r annule le numérateur de la fraction présente dans (A17-13), ce qui n'est possible que si $p_I > 1/2$:

$$r = \frac{1}{2p_I - 1} , \quad (\text{A17-16})$$

la susceptibilité suit, aux basses températures, la loi :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 (r^2 + K) , \quad (\text{A17-17})$$

où K est la limite de cette même fraction et dépend de la nature de la distribution des paires (J_+, J_-). Dans le cas plus particulier d'une distribution carrée homogène où les quadrants I et III sont occupés (avec $J_+ = J_- = J_>$ dans le quadrant I, $J_+ = J_- = J_<$ dans le quadrant III), nous avons dans ces conditions :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{(2p_I - 1)^2} - 1 \right) , \quad d=1 , \quad (\text{A17-17a})$$

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 4\beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{1 - p_I}{(2p_I - 1)^2} \frac{\int_{\nu}(\beta J_<)}{(\beta J_<)^2} , \quad d=3 \quad (\nu=1/2). \quad (\text{A17-17b})$$

Dans le cas $d=1$, la susceptibilité suit, aux basses températures, une loi de type Curie ; dans le cas $d=3$, elle diverge puis passe par un minimum. Ces comportements sont illustrés, pour le produit $\chi_{//}T$, par les courbes des

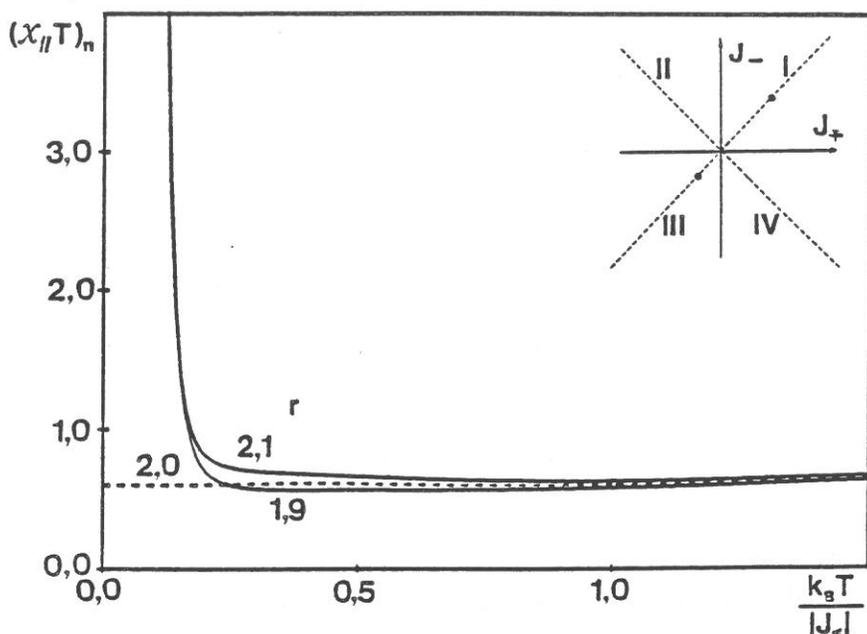


Fig.A17-3 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z à caractère aléatoire, pour diverses valeurs de r ($g=2$, $d=1$, $J_+=J_-=-10$ K avec la probabilité 0,25, $J_+=J_-=20$ K avec la probabilité 0,75).

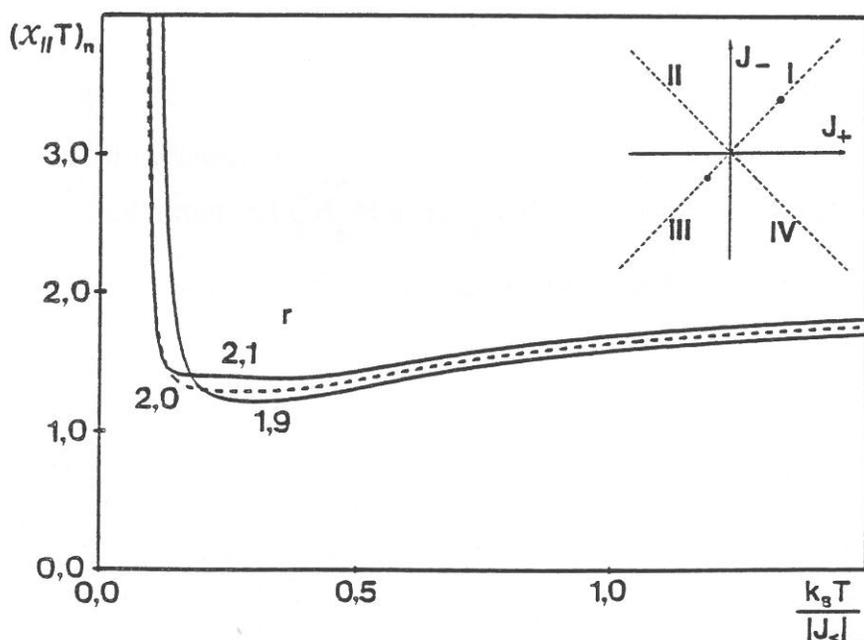


Fig.A17-4 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z à caractère aléatoire, pour diverses valeurs de r ($g=2$, $d=3$, $J_+=J_-=-10$ K avec la probabilité 0,25, $J_+=J_-=20$ K avec la probabilité 0,75).

figures A17-3 et 4.

Etude du cas (c) :

Dans le cas où seul le quadrant I (ou III) est occupé, les comportements (voisins de ceux d'une chaîne régulière à couplage antiferromagnétique - ou ferromagnétique) sont illustrés par les courbes des figures A17-5 à 7.

2- Etude de la susceptibilité perpendiculaire

Nous avons vu dans l'annexe 14 que, pour $d > 1$, la susceptibilité perpendiculaire s'écrit :

$$\chi_{\perp} = \beta \left[M_c^2 X_{\perp}^c + M_q^2 X_{\perp}^q \right] , \quad (\text{A17-18})$$

où M_c et M_q sont les amplitudes respectives des moments associés aux spins classique et quantique et où X_{\perp}^c et X_{\perp}^q sont respectivement les contributions des moments classiques et quantiques à la susceptibilité perpendiculaire. Nous appellerons susceptibilités perpendiculaires "classique" et "quantique" les termes $\beta M_c^2 X_{\perp}^c$ et $\beta M_q^2 X_{\perp}^q$. La contribution classique est nulle, naturellement, pour $d=1$. Pour $d > 1$, nous avons :

$$X_{\perp}^c = \frac{1}{d-1} \left(1 - \overline{t} \right) , \quad d > 1 , \quad (\text{A17-19})$$

$$X_{\perp}^q = \overline{\left(\frac{U}{P^2} \right)} , \quad (\text{A17-20})$$

où l'intégrale \overline{t} est donnée par (A17-7) et l'intégrale $\overline{\left(\frac{U}{P^2} \right)}$ par :

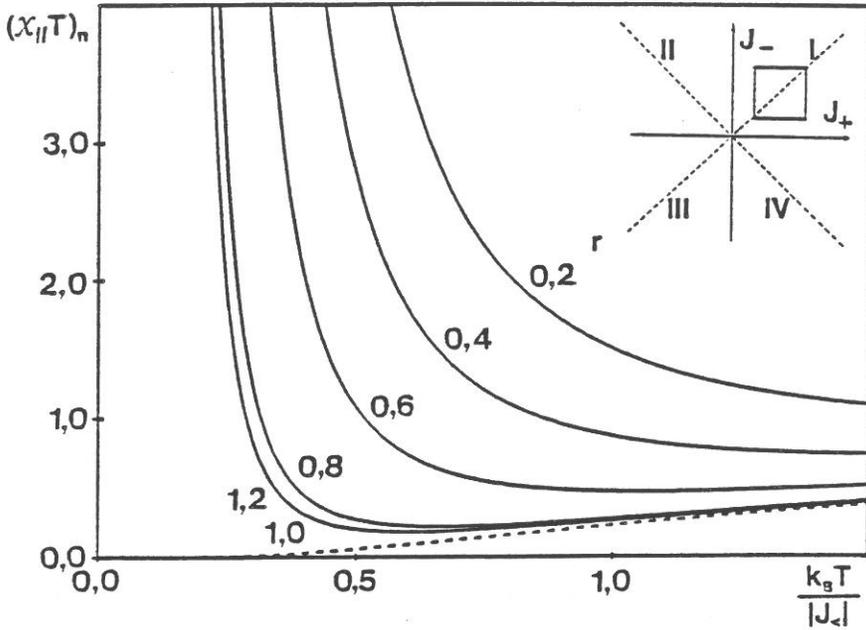


Fig.A17-5 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z à caractère aléatoire pour diverses valeurs de r ($J_{<} \ll J_{>} \ll J_{>}$, $J_{<} \ll J_{+} \ll J_{>}$, $J_{<} = 10$ K, $J_{>} = 20$ K ; $g=2$, $d=1$).

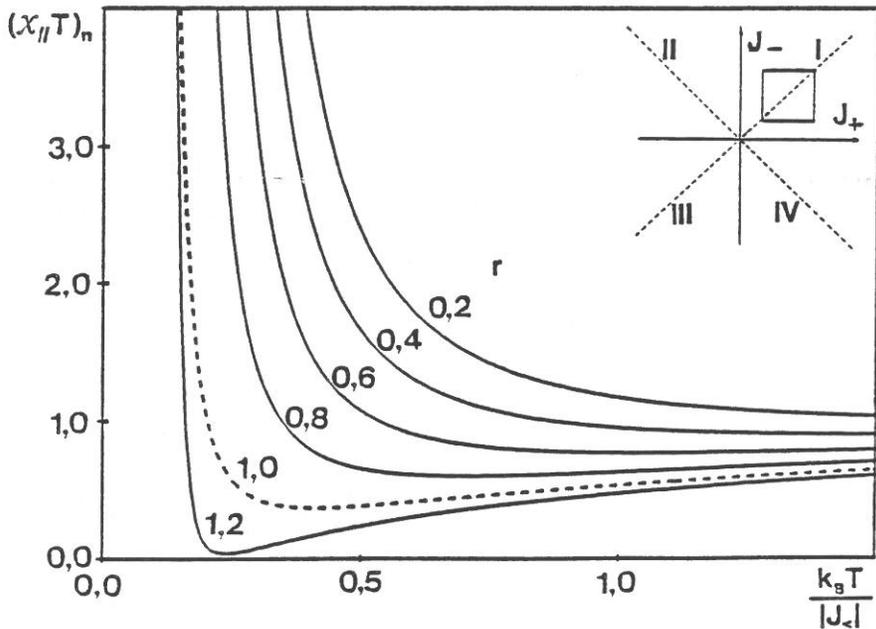


Fig.A17-6 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z à caractère aléatoire pour diverses valeurs de r ($J_{<} \ll J_{>} \ll J_{>}$, $J_{<} \ll J_{+} \ll J_{>}$, $J_{<} = 10$ K, $J_{>} = 20$ K ; $g=2$, $d=3$).

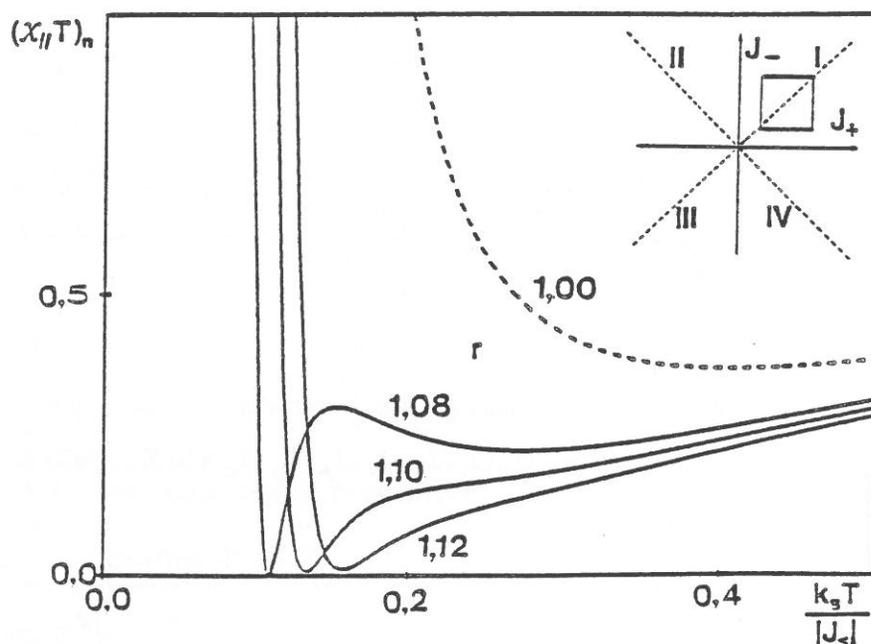


Fig.A17-7 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z - z à caractère aléatoire pour diverses valeurs de r au voisinage de la compensation ($J_- \ll J_+ \ll J_-$, $J_- \ll J_+ \ll J_-$, $J_- = 10$ K, $J_+ = 20$ K ; $g=2$, $d=3$).

$$\overline{\left(\frac{U}{P^2}\right)} = \iint_{\mathcal{D}} dJ_+ dJ_- f(J_+, J_-) \times$$

$$\iint dS dS' \frac{\operatorname{ch}\left[-\frac{\beta J_-}{2} S^z\right] \operatorname{sh}\left[-\frac{\beta}{2} (J_+ S^z + J_- S'^z)\right] \operatorname{ch}\left[-\frac{\beta J_+}{2} S'^z\right]}{(\mathcal{J}_\nu[u(J_+, J_-)] + \mathcal{J}_\nu[v(J_+, J_-)])^2}. \quad (\text{A17-21})$$

En examinant, dans la limite des basses températures, le comportement de χ_{\perp}^c , nous retrouvons l'expression (A15-29) dans laquelle les quantités $(1/|2a|)^n$ sont remplacées par les valeurs moyennes :

$$K_n = \iint_{\mathcal{D}} dJ_+ dJ_- f(J_+, J_-) \frac{1}{|w|^n}, \quad (\text{A17-22})$$

où $|w|$ représente la plus grande des deux quantités $|u|$, $|v|$. Nous obtenons de la même façon l'expression de χ_{\perp}^q en remplaçant dans (A15-51) les mêmes quantités $(1/|2a|)^n$ par les valeurs moyennes convenables. En faisant le changement de variable :

$$\tilde{u} = -\frac{2}{\beta} u, \quad \tilde{v} = -\frac{2}{\beta} v, \quad \dots \quad (\text{A17-23})$$

les intégrales K_n s'écrivent :

$$K_n = \left(-\frac{2}{\beta}\right)^n \tilde{K}_n, \quad (\text{A17-24})$$

avec :

$$\tilde{K}_n = \iint_{\mathcal{D}} dJ_+ dJ_- f(J_+, J_-) \frac{1}{|\tilde{w}|^n}, \quad (\text{A17-25})$$

où $|\tilde{w}|$ représente la plus grande des quantités $|\tilde{u}|$ et $|\tilde{v}|$. Nous remarquons que les intégrales \tilde{K}_n ne dépendent pas de la température mais uniquement de la distribution des paramètres d'échange. En définitive, en rappelant

que χ_{\perp}^c est nulle pour $d=1$, nous avons :

$$\chi_{\perp}^c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} M_c^2 \left(\tilde{K}_1 + \frac{(d^2-1)(d+1)(d-9)}{64d} \frac{\tilde{K}_2}{\beta} + \dots \right), \quad d > 1, \quad (\text{A17-26})$$

$$\chi_{\perp}^q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} M_q^2 \left(\tilde{K}_1 + \frac{(d-1)}{2} \frac{\tilde{K}_2}{\beta} + \dots \right). \quad (\text{A17-27})$$

Ainsi, à l'approche du zéro absolu, les susceptibilités perpendiculaires classique et quantique tendent, linéairement en T , respectivement vers $M_c^2 \tilde{K}_1$ et $M_q^2 \tilde{K}_1$. Ces comportements sont illustrés par les figures A17-8 à 10.

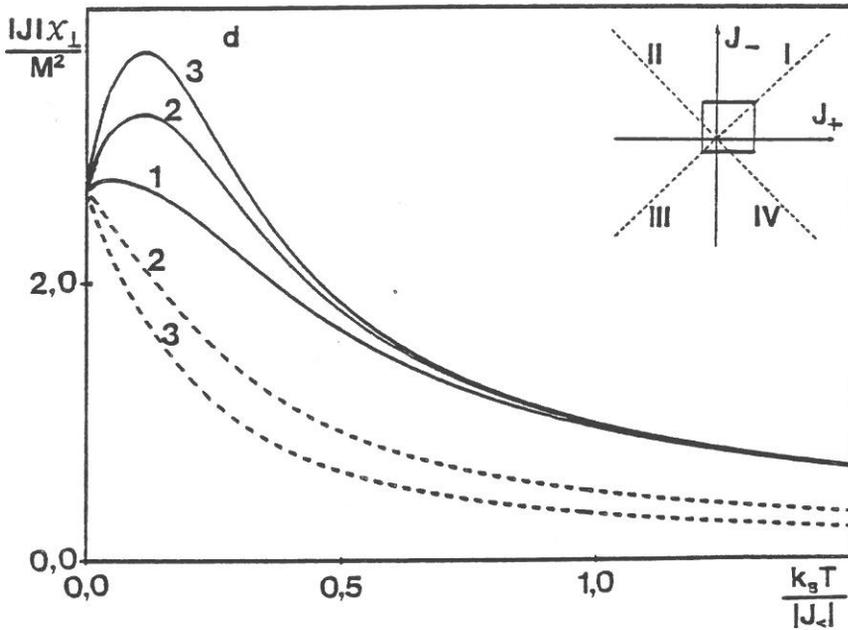


Fig.A17-8 : Variation thermique de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z à caractère aléatoire ($J_{<} \ll J_{>} \ll J_{>}$, $J_{<} \ll J_{+} \ll J_{>}$, $J_{<} = -10$ K, $J_{>} = 10$ K ; tireté : contribution classique ; trait plein : contribution quantique ; M représente M_c ou M_q amplitude du moment associé au spin classique ou quantique).

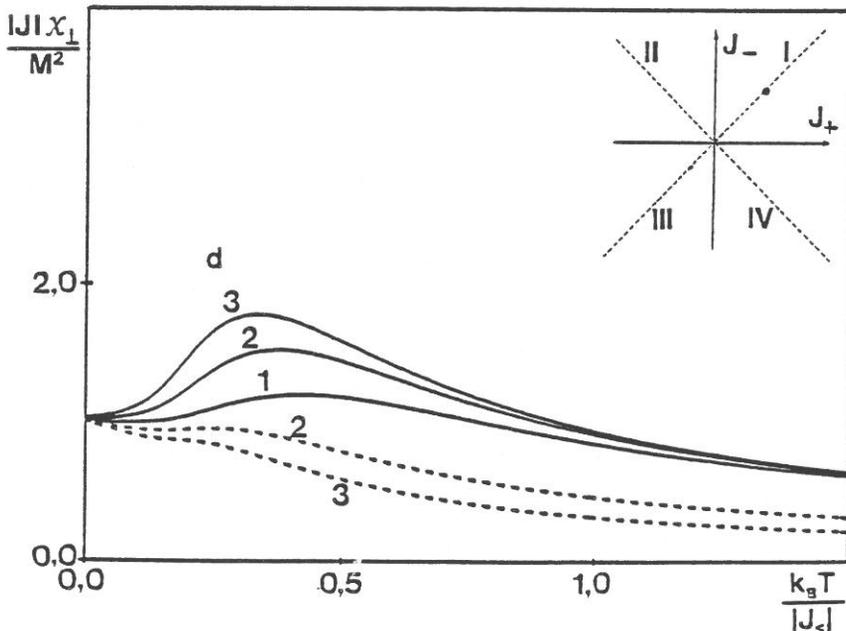


Fig.A17-9 : Variation thermique de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z à caractère aléatoire ($J_{<} \ll J_{>} \ll J_{>}$, $J_{<} \ll J_{+} \ll J_{>}$, $J_{<} = J_{>} = 10$ K ; tireté : contribution classique ; trait plein : contribution quantique ; M représente M_c ou M_q amplitude du moment associé au spin classique ou quantique).

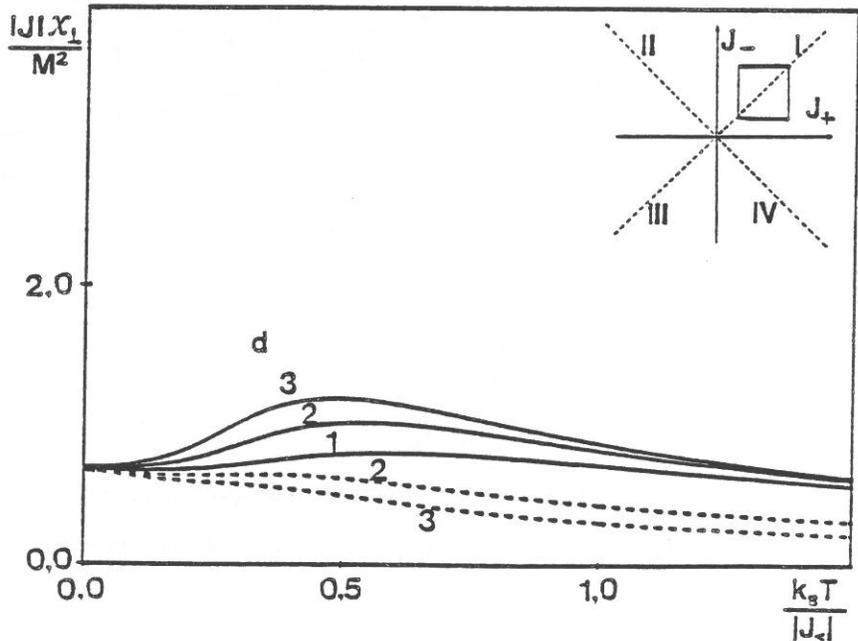


Fig.A17-10 : Variation thermique de la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z à caractère aléatoire ($J_{<} \ll J_{>}, J_{<} \ll J_{+} \ll J_{>}, J_{<} = 10 \text{ K}, J_{>} = 20 \text{ K}$; tireté : contribution classique ; trait plein : contribution quantique ; M représente M_c ou M_q amplitude du moment associé au spin classique ou quantique).

Annexe 18

**CHAINE (s',1/2) PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z ET UNE
ANISOTROPIE AXIALE (LE LONG DE L'AXE OZ) SUR LES SPINS s'.
ETABLISSEMENT DES EXPRESSIONS DE
L'AIMANTATION ET DE LA SUSCEPTIBILITE PARALLELES.
ETUDE DE LEUR COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE**

Nous reprenons ici la même démarche que dans l'annexe 9 (cas des chaînes (s',1/2) sans anisotropie sur les spins s'), en rajoutant un terme d'anisotropie sur les spins s' ; nous excluons donc de cette étude le cas où le nombre quantique s' vaut 1/2. Nous avons toujours :

$$Z_N(B) = \sum_{m_N = -\sigma}^{+\sigma} Z_N^{m_N}(B) \quad , \quad \sigma = \frac{1}{2} \quad , \quad (A18-1)$$

avec cette fois :

$$Z_N^{m_N}(B) = \sum_{m_0} \dots \sum_{m_{N-1}} \dots \sum_{M_0} \dots \sum_{M_{N-1}} \exp \left(-\beta \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} \left[H_i^{\text{éch.}} + H_i^{\text{mag.}}(m_i, M_i) + H_i^{\text{anis.}} \right] + H_N^{\text{mag.}}(m_N, 0) \right\} \right) \quad , \quad (A18-2)$$

où $H_i^{\text{éch.}}$ et $H_i^{\text{mag.}}$ sont donnés par (III-61 et 62) et où $H_i^{\text{anis.}}$ est défini par (III-60). Compte tenu de la commutativité de tous les opérateurs mis en jeu, l'élément courant de la matrice de transfert (\mathcal{T}) s'écrit :

$$\begin{aligned} (\mathcal{T})_{m_N m_{N-1}} &= \exp \left(-\beta H_N^{\text{mag.}}(m_N, 0) \right) \times \\ &\times \sum_{M_{N-1} = -s'}^{+s'} \exp \left(-\beta \left[H_{N-1}^{\text{éch.}} + H_{N-1}^{\text{mag.}}(0, M_{N-1}) + H_{N-1}^{\text{anis.}} \right] \right) \quad . \quad (A18-3) \end{aligned}$$

Nous vérifions que les configurations définies par la donnée de m_{N-1} et m_N sont des états propres de l'hamiltonien figurant dans chacun des éléments de la matrice (\mathcal{J}), de sorte que :

$$(\mathcal{J})_{m_N m_{N-1}} = \exp(\beta g m_N B) \times \\ \times \sum_{M_{N-1}=-s'}^{+s'} \exp\left(-\beta \left[J(m_{N-1} + m_N) - \frac{gr}{2s'} B + k_z M_{N-1} \right] M_{N-1}\right), \quad (\text{A18-4})$$

où r est le rapport des moments magnétiques présents dans la cellule élémentaire (III-5). La fonction de partition rapportée à une cellule est donnée par la valeur propre de plus grand module, $v_1(B)$, de la matrice (\mathcal{J}). En posant :

$$x = \frac{\beta}{2} J, \quad y = \frac{\beta}{2} \frac{gr}{2s'}, \quad K = \beta k_z, \quad (\text{A18-5})$$

$$\Pi(x) = \sum_{M=-s'}^{+s'} \exp\{ (2(yB-x) - KM)M \} \sum_{M'=-s'}^{+s'} \exp\{ (2(yB+x) - KM')M' \}, \quad (\text{A18-6})$$

$$S = \sum_{\epsilon=\pm 1} \exp\left(\epsilon \beta \frac{g}{2} B\right) \sum_{M=-s'}^{+s'} \exp\{ (2(yB-\epsilon x) - KM)M \}, \quad (\text{A18-7})$$

$$P = \Pi(x) - \Pi(0), \quad (\text{A18-8})$$

et :

$$R = \sqrt{S^2 - 4P}, \quad (\text{A18-9})$$

nous avons simplement :

$$v_1(B) = \frac{1}{2} (S + R). \quad (\text{A18-10})$$

En appelant F , F' et F'' les dérivées successives de la quantité F par rapport au champ B et $F(0)$, $F'(0)$ et $F''(0)$ leur valeur en champ nul, nous avons, à partir des relations (I-66 et 67) :

$$\mathcal{M}_{//} = \frac{1}{\beta(S+R)} \left(S' + \frac{SS' - 2P'}{R} \right), \quad (\text{A18-11})$$

tous calculs effectués, S' et P' étant donnés par :

$$S' = \sum_{\varepsilon=\pm 1} \exp\left(\varepsilon\beta \frac{g}{2} B\right) \sum_{M=-s'}^{+s'} \left(\varepsilon\beta \frac{g}{2} + 2yM \right) \times \\ \times \exp\{ (2(yB-\varepsilon x) - KM)M \}, \quad (\text{A18-12})$$

$$P' = 2y \left(\sum_{M=-s'}^{+s'} \sum_{M'=-s'}^{+s'} \left[(M + M') \exp\{ (2(yB-x) - KM)M \} \exp\{ (2(yB+x) - KM')M' \} \right. \right. \\ \left. \left. - 2M \exp\{ (2yB - KM)M \} \exp\{ (2yB - KM')M' \} \right] \right), \quad (\text{A18-13})$$

et :

$$\chi_{//} = \frac{1}{\beta R(0)} \left(S''(0) - \frac{2P''(0)}{S(0) + R(0)} \right), \quad (\text{A18-14})$$

avec :

$$R(0) = 2 \sum_{M=-s'}^{+s'} \exp(-KM^2), \quad (\text{A18-15})$$

$$S''(0) = \sum_{\varepsilon=\pm 1} \sum_{M=-s'}^{+s'} \left(\varepsilon\beta \frac{g}{2} + 2yM \right)^2 \exp\{ -(2\varepsilon x + KM)M \}, \quad (\text{A18-16})$$

$$P''(0) = (2y)^2 \sum_{M=-s'}^{+s'} \sum_{M'=-s'}^{+s'} \left[(M + M')^2 \exp\{ -(2x + KM)M \} \exp\{ (2x - KM')M' \} \right. \\ \left. - \exp\{ -K(M^2 + M'^2) \} \right]. \quad (\text{A18-17})$$

Nous nous limitons ici à l'étude du comportement de la susceptibilité parallèle lorsque les interactions sont antiferromagnétiques ($J>0$). Le moment magnétique porté par le spin 1/2 est pris égal à 1 par convention ($g=2$). A basse température, le comportement de $\chi_{//}$ est directement lié à

celui des quantités $S''(0)/\beta^2 R(0)$ et $P''(0)/(\beta^2 R(0)(S(0) + R(0)))$; compte tenu de la nature de la sommation sur M et des propriétés de symétrie de l'argument des exponentielles présentes dans $S(0)$, $S''(0)$ et $P''(0)$, ces quantités peuvent se ré-écrire sous la forme :

$$S(0) = 2 \sum_{M=-s'}^{+s'} \exp(2xM - KM^2) , \quad (\text{A18-18})$$

$$S''(0) = 2\beta^2 \sum_{M=-s'}^{+s'} \left(\frac{r}{s'} M - 1 \right)^2 \exp(2xM - KM^2) , \quad (\text{A18-19})$$

$$P''(0) = 2 \left(\beta \frac{r}{s'} \right)^2 \left(\sum_{M=-s'}^{+s'} M^2 \exp(2xM - KM^2) \sum_{M'=-s'}^{+s'} \exp(2xM' - KM') \right. \\ \left. - \left(\sum_{M=-s'}^{+s'} M \exp(2xM - KM^2) \right)^2 \right. \\ \left. - \sum_{M=-s'}^{+s'} M^2 \exp(-KM^2) \sum_{M'=-s'}^{+s'} \exp(-KM'^2) \right) . \quad (\text{A18-20})$$

La discussion à basse température est fondée sur le classement de l'argument courant

$$u_M = -KM^2 + 2xM , \quad (\text{A18-21})$$

par rapport à ses voisins u_{M+1} et u_{M-1} en fonction du rapport K/x (qui est en fait le rapport k_z/J des deux énergies significatives du problème). Pour que l'état de projection $M = s' - \mu$ rende maximal u_M , nous trouvons dans l'une des cinq possibilités :

$$u_{M+1} = u_M > u_{M-1} , \quad \frac{k_z}{J} = \frac{1}{2M+1} , \quad (\text{A18-22})$$

$$u_M > u_{M+1} > u_{M-1} , \quad \frac{1}{2M+1} < \frac{k_z}{J} < \frac{1}{2M} , \quad (\text{A18-23})$$

$$u_M > u_{M+1} = u_{M-1} , \quad \frac{k_z}{J} = \frac{1}{2M} , \quad (\text{A18-24})$$

$$u_M > u_{M-1} > u_{M+1} , \quad \frac{1}{2M} < \frac{k_z}{J} < \frac{1}{2M-1} , \quad (\text{A18-25})$$

$$u_M = u_{M-1} > u_{M+1} , \quad \frac{k_z}{J} = \frac{1}{2M-1} . \quad (\text{A18-26})$$

Nous notons que, pour chacun des deux cas extrêmes, il existe deux valeurs de M qui rendent l'argument maximal ; d'autre part, nous remarquons également que, pour $\mu=0$, les cinq situations du cas général ($\mu > 0$) se réduisent à :

$$u_{s'} > u_{s'-1} , \quad \frac{k_z}{J} < \frac{1}{2s'-1} , \quad (\text{A18-27})$$

$$u_{s'} = u_{s'-1} , \quad \frac{k_z}{J} = \frac{1}{2s'-1} . \quad (\text{A18-28})$$

Nous ne donnerons pas ici le détail de l'étude à basse température de la susceptibilité parallèle car elle est longue et fastidieuse, mais ne présente aucune difficulté majeure. Nous l'avons volontairement limitée à la valeur du nombre quantique s' égale à $5/2$. Les comportements du produit $\chi_{//}T$ sont illustrés par les courbes des figures A18-1 à 8 ; la figure A18-9 fournit une vue d'ensemble de ces comportements.

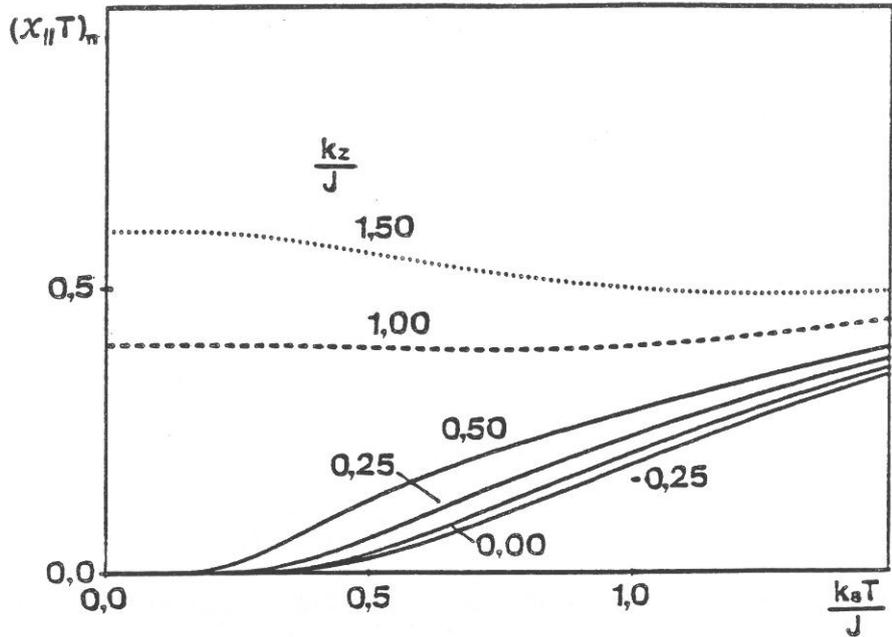


Fig.A18-1 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(1,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, favorisant l'état $M=1$ ($J>0$, $g=2$, $r=1$).

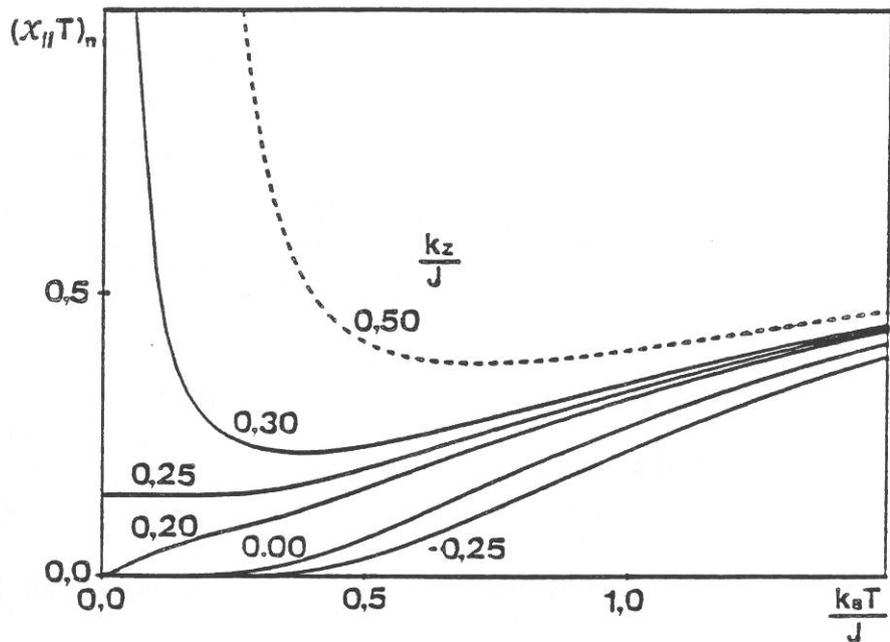


Fig.A18-2 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(3/2,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin $3/2$, favorisant l'état $M=3/2$ ($J>0$, $g=2$, $r=1$).

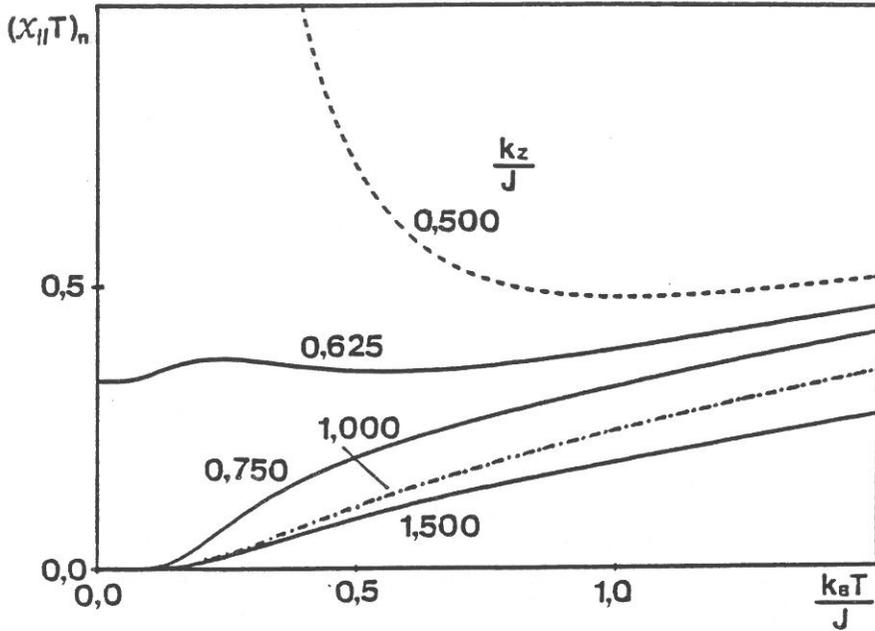


Fig.A18-3 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(3/2, 1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin $3/2$, favorisant l'état $M'=1/2$ ($J > 0$, $g=2$, $r=3$).

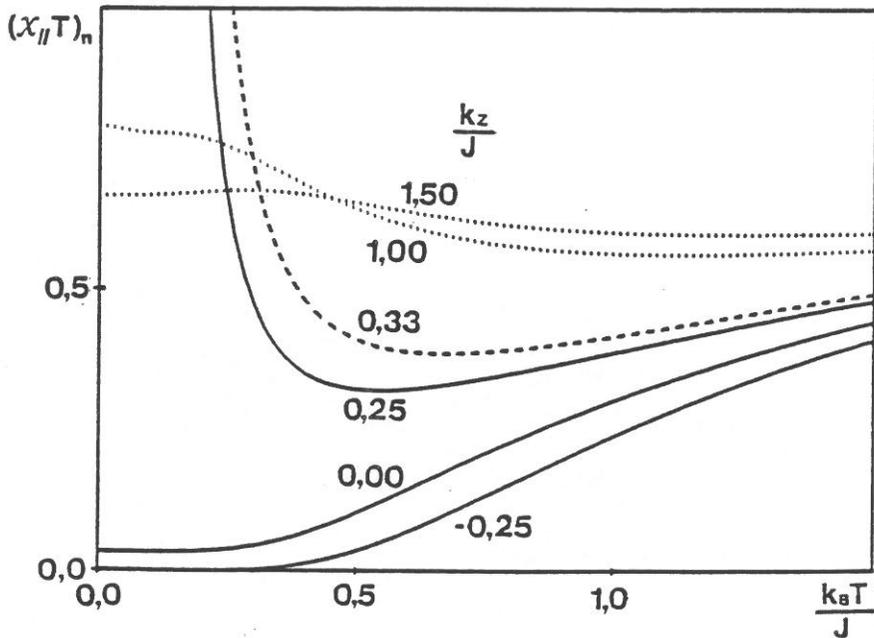


Fig.A18-4 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(2, 1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 2, favorisant l'état $M'=2$ ($J > 0$, $g=2$, $r=1$).

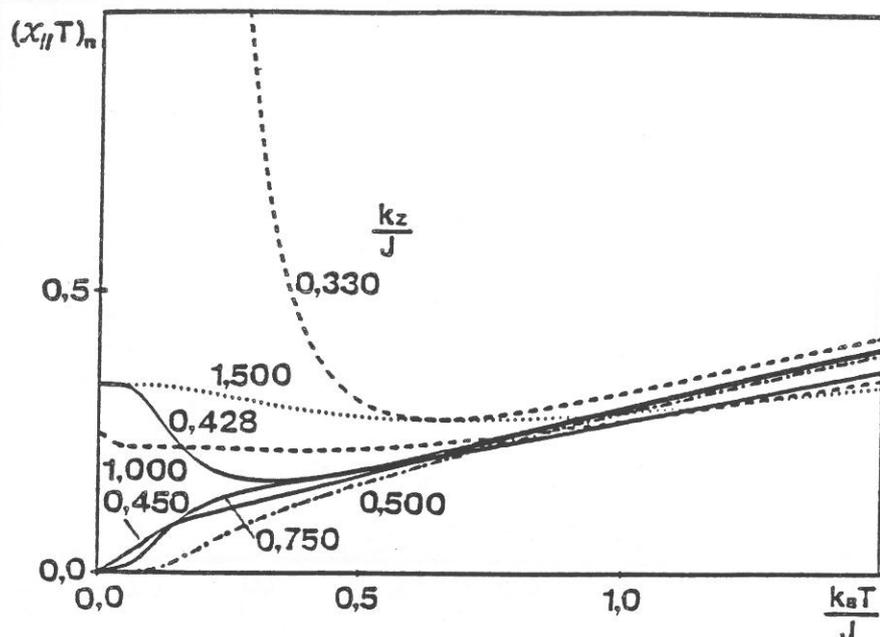


Fig.A18-5 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (2,1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 2, favorisant l'état $M'=1$ ($J>0$, $g=2$, $r=2$).

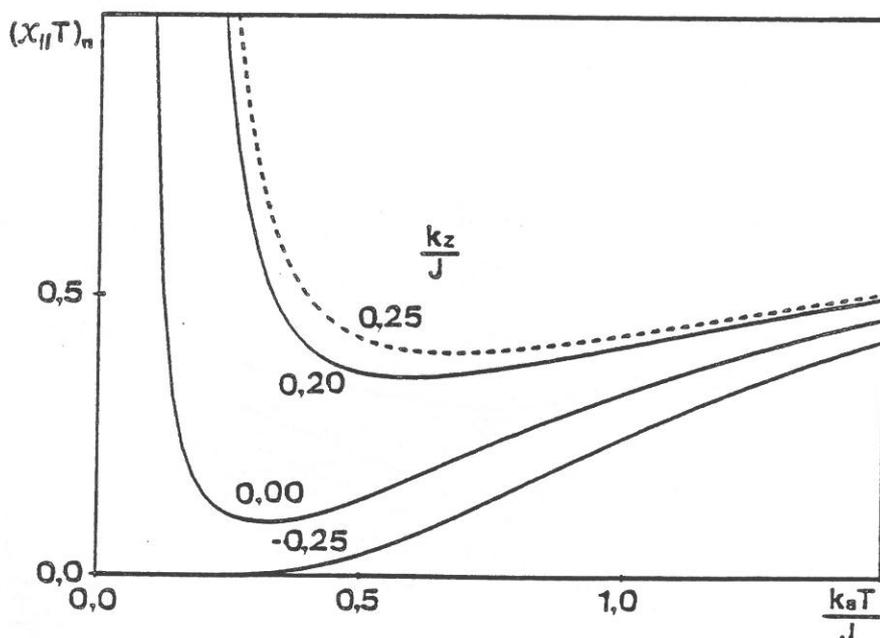


Fig.A18-6 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (5/2,1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 5/2, favorisant l'état $M'=5/2$ ($J>0$, $g=2$, $r=1$).

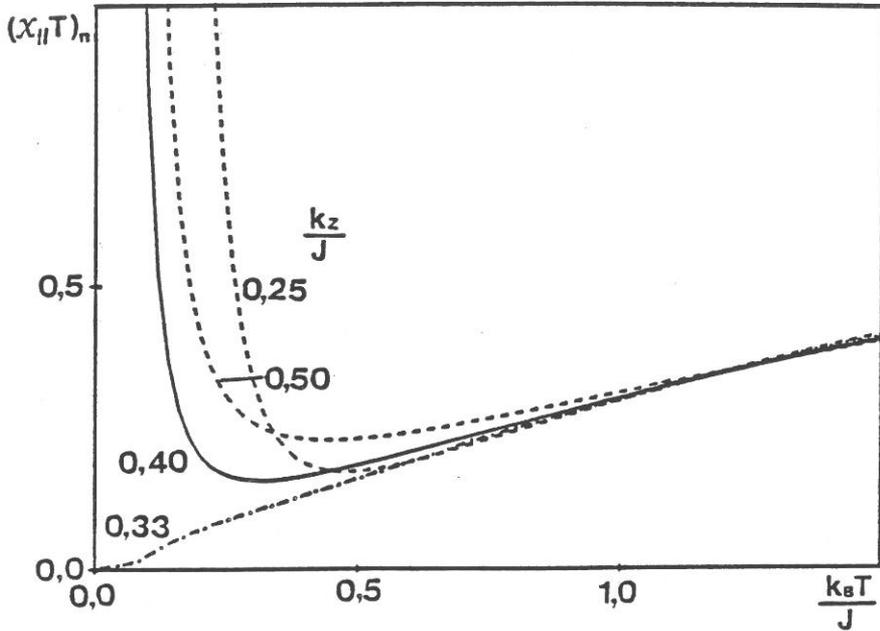


Fig.A18-7 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(5/2, 1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin $5/2$, favorisant l'état $M'=3/2$ ($J > 0$, $g=2$, $r=5/3$).

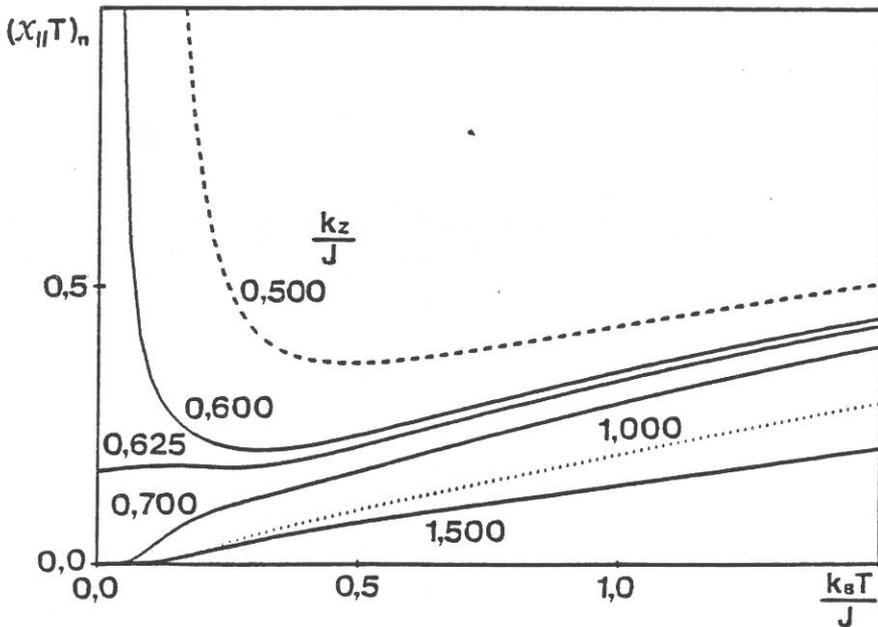


Fig.A18-8 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(5/2, 1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin $5/2$, favorisant l'état $M'=1/2$ ($J > 0$, $g=2$, $r=5$).

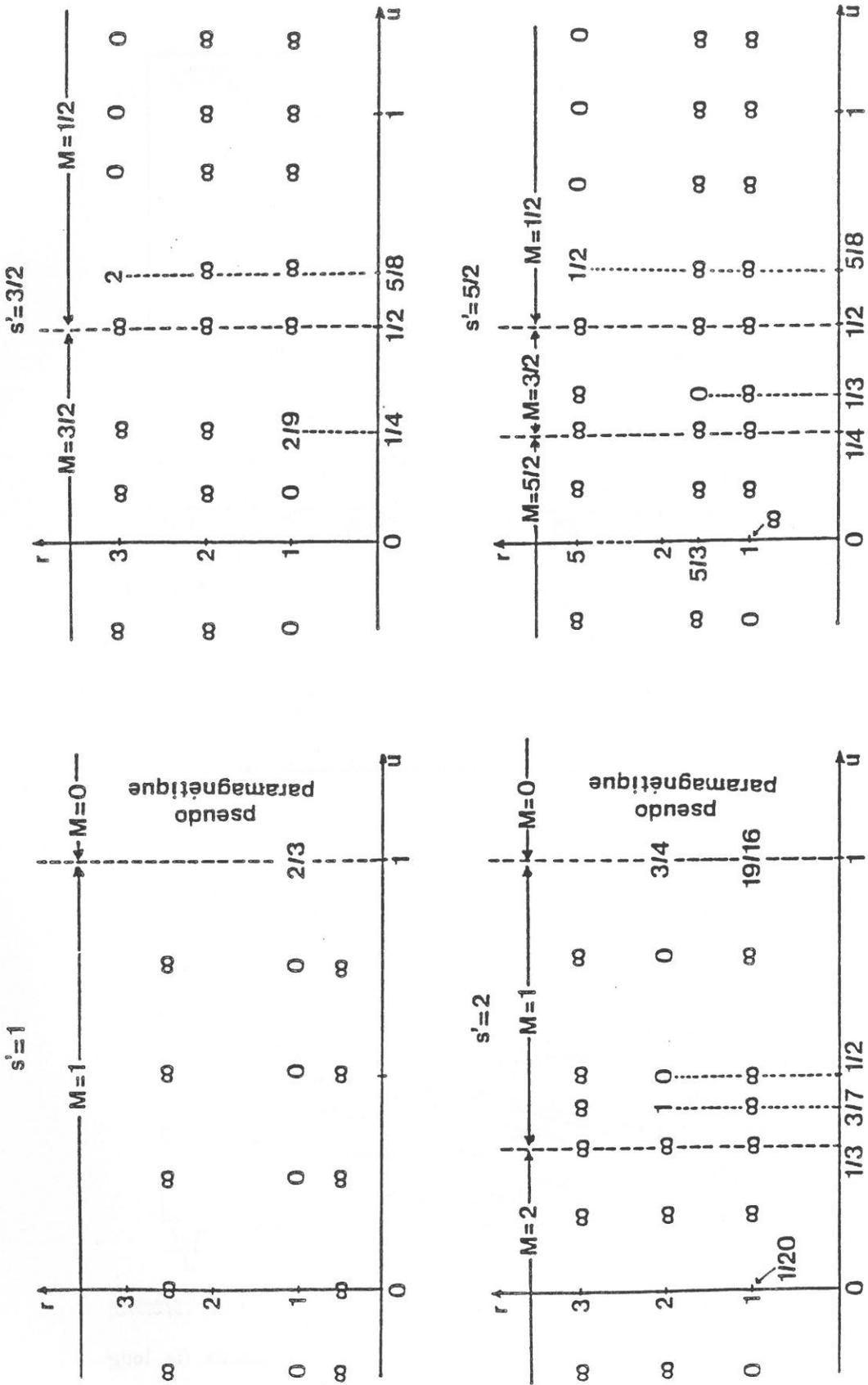


Fig.A18-9 : Carte des comportements du produit $(\chi_{//}T)_n$ à $T=0$ K, à la compensation ($r=1$) pour divers types de chaînes $(s', 1/2)$ à couplage z-z présentant une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin s' .

Annexe 19

**EXPRESSIONS DE LA SUSCEPTIBILITE ET DE L'AIMANTATION
PARALLELES, DE LA LONGUEUR DE CORRELATION ET DE
LA SUSCEPTIBILITE PERPENDICULAIRE
D'UNE CHAINE (S,1/2), INFINIE, PRESENTANT
UN COUPLAGE Z-Z ET UNE ANISOTROPIE AXIALE
(LE LONG DE OZ) SUR LE SPIN CLASSIQUE (d=3).
COMPORTEMENTS A BASSE TEMPERATURE**

1- Etude de la susceptibilité parallèle1.1- Expression générale

L'expression (A15-1) de la susceptibilité parallèle demeure formellement valable mais les intégrales P, Q, R et T s'écrivent ici :

$$P = \int dS \exp(-\beta K_z (S^z)^2) \operatorname{ch}^2(aS^z) , \quad (\text{A19-1})$$

$$Q = \int dS \exp(-\beta K_z (S^z)^2) \operatorname{sh}^2(aS^z) , \quad (\text{A19-2})$$

$$R = \int dS S^z \exp(-\beta K_z (S^z)^2) \operatorname{ch}(aS^z) \operatorname{sh}(aS^z) , \quad (\text{A19-3})$$

$$T = \int dS (S^z)^2 \exp(-\beta K_z (S^z)^2) \operatorname{ch}^2(aS^z) , \quad (\text{A19-4})$$

où le spin classique S peut s'orienter suivant toutes les directions de l'espace ($d=3$) et où a est donné par :

$$a = -\frac{\beta J}{2} . \quad (\text{A19-5})$$

En posant :

$$c = -\beta K_z , \quad (\text{A19-6})$$

et en définissant la quantité $I(x,y)$:

$$I(x,y) = \frac{\exp\left(-\frac{y^2}{x}\right)}{\sqrt{|x|}} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{x^k}{(2k+1) k!} \sum_{\epsilon=\pm 1} \left(1+\epsilon \frac{y}{x}\right)^{2k+1} , \quad (\text{A19-7})$$

nous avons :

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = \frac{1}{4} (I(c,a) \pm I(c,0)) , \quad (\text{A19-8})$$

$$R = -\frac{1}{4c} (a I(c,a) - \exp(c) \operatorname{sh}(2a)) , \quad (\text{A19-9})$$

$$T = \frac{1}{8c} \left(\left(-1 + \frac{2a^2}{c} \right) I(c,a) - I(c,0) + 2\exp(c) \left(1 + \operatorname{ch}(2a) - \frac{a}{c} \operatorname{sh}(2a) \right) \right) . \quad (\text{A19-10})$$

En ce qui concerne plus précisément le comportement de la susceptibilité parallèle à basse température, nous sommes conduits à examiner des intégrales du type :

$$J_n = \frac{1}{4} \int_0^1 dx x^n \exp(cx^2 - 2ax) . \quad (\text{A19-11})$$

Comme dans les études précédentes, nous nous intéressons seulement au cas où les couplages sont antiferromagnétiques ($J > 0, a < 0$). Dans ces conditions, l'étude de l'intégrale J_n à basse température est régie par le classement du paramètre d'anisotropie c par rapport à 0 et à a (c'est-à-dire de K_z par rapport à 0 et à J). L'intégrant est extremal pour :

$$x_0 = \frac{a}{c} \left(1 - \frac{nc}{2a^2} - \left(\frac{nc}{2a^2} \right)^2 + \dots \right) , \quad (\text{A19-12})$$

(maximum ou minimum selon que c est négatif ou positif).

Lorsque nous avons $c < a < 0$, x_0 appartient au segment $[0,1]$. Dans la limite des très basses températures, l'intégrand de J_n décroît très rapidement lorsque x s'éloigne de x_0 ; dans ces conditions, nous pouvons le remplacer par une expression qui en est voisine, uniquement à proximité de x_0 . Nous pouvons par exemple écrire :

$$J_n \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \int_0^1 dx A \exp(\lambda(x-x_0)^2) , \quad (\text{A19-13})$$

avec :

$$A = x_0^n \exp(-\lambda x_0^2) , \quad \lambda = \frac{ax_0^{-n}}{x_0^2} . \quad (\text{A19-14})$$

Nous pouvons alors développer J_n sous la forme :

$$J_n \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \left(-\frac{\pi}{c}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{a}{c}\right)^n \exp\left(-\frac{a^2}{c}x\right) \times \left(1 - \frac{n(n-1)}{4} \frac{c}{a^2} + \frac{n^2(27n^2-80n+33)}{96} \left(\frac{c}{a^2}\right)^2 + \dots\right) . \quad (\text{A19-15})$$

Lorsque nous avons $a < c$, l'extremum de la fonction à intégrer correspond à des valeurs de x extérieures au segment $[0,1]$. Toutefois, sur ce segment, la plus grande valeur de l'intégrand est obtenue pour $x=1$. C'est donc le voisinage de cette valeur qui contribue pour l'essentiel à l'intégrale J_n . Nous pouvons remplacer ici l'intégrand par un développement au voisinage de $x=1$. Nous obtenons alors pour J_n :

$$J_n \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\exp(c-2a)}{4(c-a)} \left(1 - \frac{n}{2(c-a)} - \frac{n(n-1)}{[2(c-a)]^2} + \dots\right) . \quad (\text{A19-16})$$

Dans le cas intermédiaire $c=a$, l'intégrand est maximum pour $x=1$

lorsque $n=0$ (les expressions (A19-13 et 14) restent valables) ; mais pour $n > 0$, il est maximum pour une valeur de x supérieure à 1, qui tend vers 1 lorsque T tend vers 0. C'est la raison pour laquelle l'expression (A19-16) ne peut pas être appliquée dans ce cas (comme on s'en rend aisément compte). Un traitement direct permet d'obtenir :

$$J_n \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \left(-\frac{\pi}{a} \right)^{\frac{1}{2}} \exp(-a) \left(1 + \frac{n}{\sqrt{-\pi a}} - \frac{n(n-1)}{4a} + \dots \right), \quad n \neq 0 \quad (\text{A19-17})$$

1.2- Discussion

$K_z < 0 < J/2$ ($a < 0 < c$) : le champ d'échange et l'anisotropie favorisent l'orientation des moments classiques suivant la direction de l'axe Oz

Dans ces conditions, en utilisant la relation (A19-16), nous avons à basse température :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\exp(c-2a)}{8(c-a)}, \quad (\text{A19-18})$$

$$R \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -P \left(1 - \frac{1}{2(c-a)} + \dots \right), \quad (\text{A19-19})$$

$$T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} P \left(1 - \frac{1}{c-a} + \frac{1}{2(c-a)^2} + \dots \right), \quad (\text{A19-20})$$

$$P-Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\exp(c)}{2c}. \quad (\text{A19-21})$$

L'expression (A15-1) de la susceptibilité parallèle s'écrit :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{c}{c-a} \left(r \left(1 - \frac{1}{2(c-a)} + \dots \right) - 1 \right)^2 \exp(-2a). \quad (\text{A19-22})$$

$r \neq 1$: les moments d'une même cellule n'ont pas la même amplitude

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{-2K_z}{J - 2K_z} (r-1)^2 \exp(\beta J) . \quad (\text{A19-23})$$

La susceptibilité parallèle diverge comme $\beta \exp(\beta J)$.

$r=1$: les moments ont même amplitude

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{-2K_z}{\beta (J - 2K_z)^2} \exp(\beta J) . \quad (\text{A19-24})$$

La susceptibilité diverge $\beta^{-1} \exp(\beta J)$. L'ensemble de ces comportements est illustré par les courbes des figures A19-1 et 2.

$0 < K_z < J/2$ ($a < c < 0$) : le champ d'échange tend à orienter les moments classiques suivant la direction de l'axe Oz et l'emporte encore sur l'anisotropie qui favorise leur orientation dans le plan xOy

P, Q, R et T sont toujours donnés par les relations (A19-18 à 20) ; mais nous avons :

$$P - Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \left(-\frac{\pi}{c} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (\text{A19-25})$$

La susceptibilité parallèle s'écrit maintenant sous la forme suivante :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{\left(r \left(1 - \frac{1}{2(c-a)} + \dots \right) - 1 \right)^2}{2\sqrt{-\pi c} \left(\frac{a}{c} - 1 \right)} \exp(c-2a) . \quad (\text{A19-26})$$

$r \neq 1$: les moments d'une même cellule n'ont pas la même amplitude

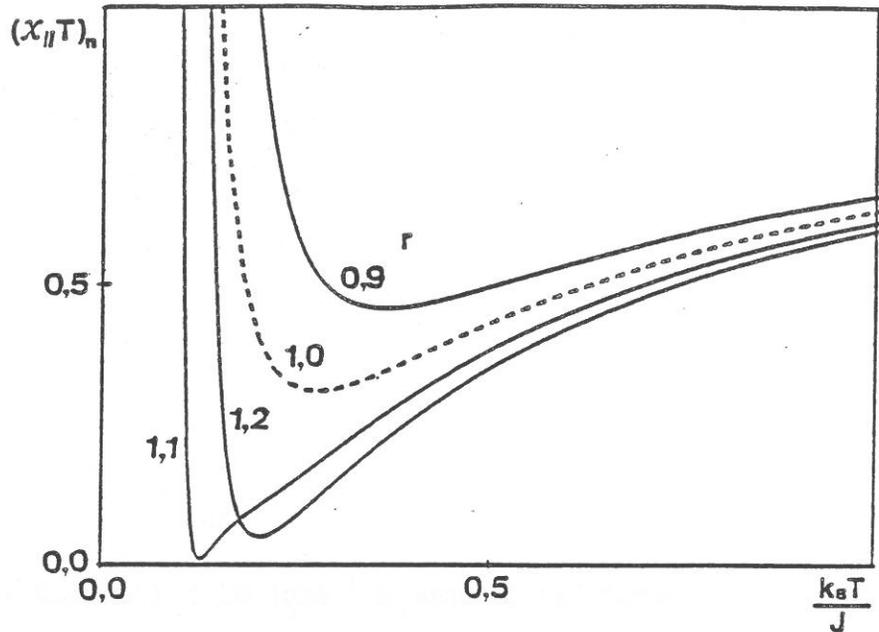


Fig.A19-1 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, pour diverses valeurs de r et dans le cas $K_z < 0 < J/2$ ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=-0,25$).

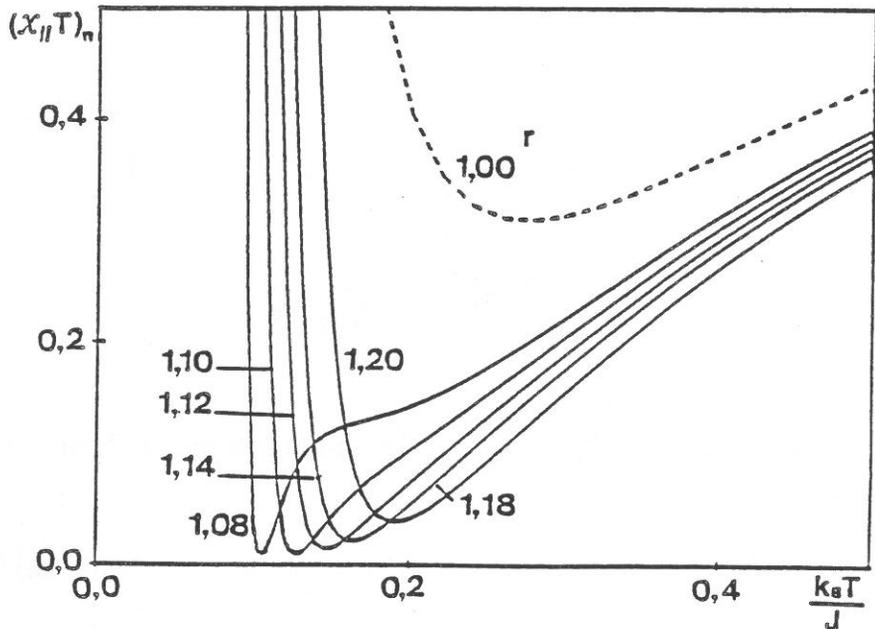


Fig.A19-2 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, au voisinage de la compensation et dans le cas $K_z < 0 < J/2$ ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=-0,25$).

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta^{\frac{1}{2}} \frac{\left(\frac{g}{2}\right)^2 \left(\frac{K_z}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}}{J-2K_z} (r-1)^2 \exp(\beta(J-K_z)). \quad (\text{A19-27})$$

La susceptibilité diverge comme $\beta^{1/2} \exp(\beta(J-K_z))$.

r=1: les moments ont même amplitude

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \left(\frac{g}{2}\right)^2 \left(\frac{K_z}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\exp(\beta(J-K_z))}{\beta^{\frac{3}{2}} (J-2K_z)^3}. \quad (\text{A19-28})$$

La susceptibilité diverge comme $\beta^{-3/2} \exp(\beta(J-K_z))$. Ces comportements sont illustrés par les courbes des figures A19-3 et 4.

$0 < K_z = J/2$ (a=c): le terme d'échange (qui favorise l'orientation des moments classiques suivant la direction de l'axe Oz) équilibre le terme d'anisotropie (qui favorise l'orientation de ces moments vers le plan xOy)

En utilisant la relation (A19-17), nous avons à basse température :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \left(-\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(-a), \quad (\text{A19-29})$$

$$R \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -P \left(1 + \frac{1}{\sqrt{-\pi a}} + \dots\right), \quad (\text{A19-30})$$

$$T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} P \left(1 - \frac{2}{\sqrt{-\pi a}} - \frac{1}{2a} \dots\right); \quad (\text{A19-31})$$

P-Q est toujours donné par (A19-25), en tenant compte que a=c. Dans ces

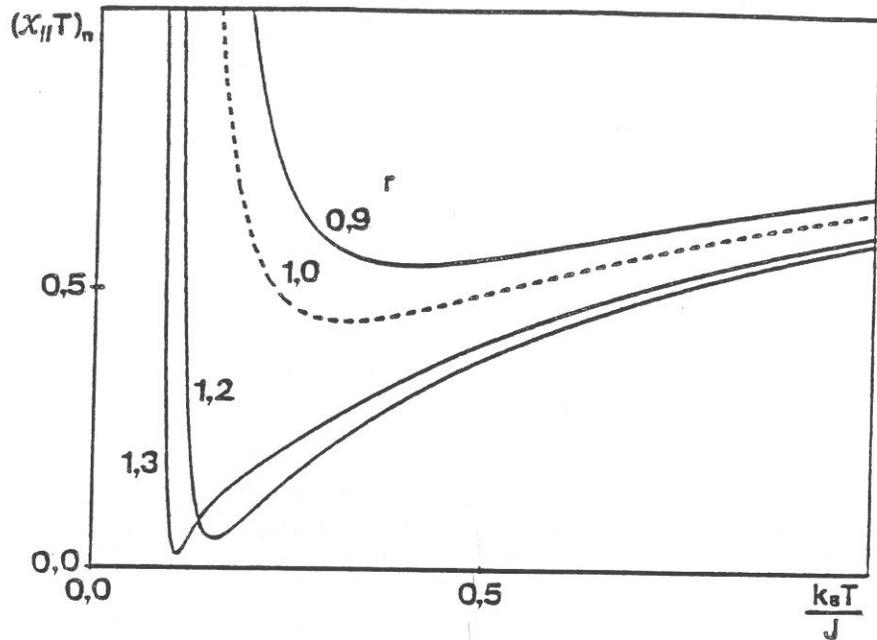


Fig.A19-3 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, pour diverses valeurs de r et dans le cas $0 < K_z < J/2$ ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=0,25$).

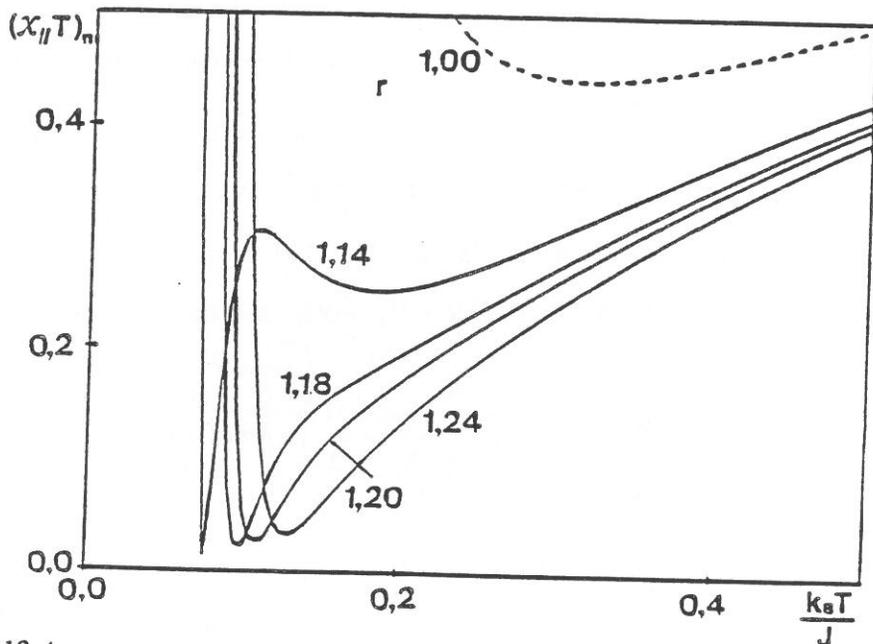


Fig.A19-4 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, au voisinage de la compensation et dans le cas $0 < K_z < J/2$ ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=0,25$).

conditions, l'expression (A15-1) de la susceptibilité parallèle s'écrit :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \left(r \left(1 + \frac{1}{\sqrt{-\pi a}} + \dots \right) - 1 \right)^2 \exp(-a) . \quad (\text{A19-32})$$

$r \neq 1$: les moments d'une même cellule n'ont pas la même amplitude

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 (r-1)^2 \exp\left(\frac{\beta J}{2}\right) . \quad (\text{A19-33})$$

La susceptibilité parallèle diverge comme $\beta \exp(\beta J/2)$.

$r=1$: les moments ont même amplitude

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{\pi J} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \exp\left(\frac{\beta J}{2}\right) . \quad (\text{A19-34})$$

La susceptibilité diverge comme $\exp(\beta J/2)$. Ces comportements sont illustrés par les courbes des figures A19-5 et 6.

$0 < J/2 < K_z$ ($c < a < 0$) : l'anisotropie est assez forte pour imposer aux mo-

ments classiques de faire un angle θ défini par :

$$\cos \theta = \frac{J}{2K_z} , \quad (\text{A19-35})$$

avec la direction Oz privilégiée par le couplage d'échange.

Dans ces conditions, en utilisant la relation (A19-13), nous avons à basse température :

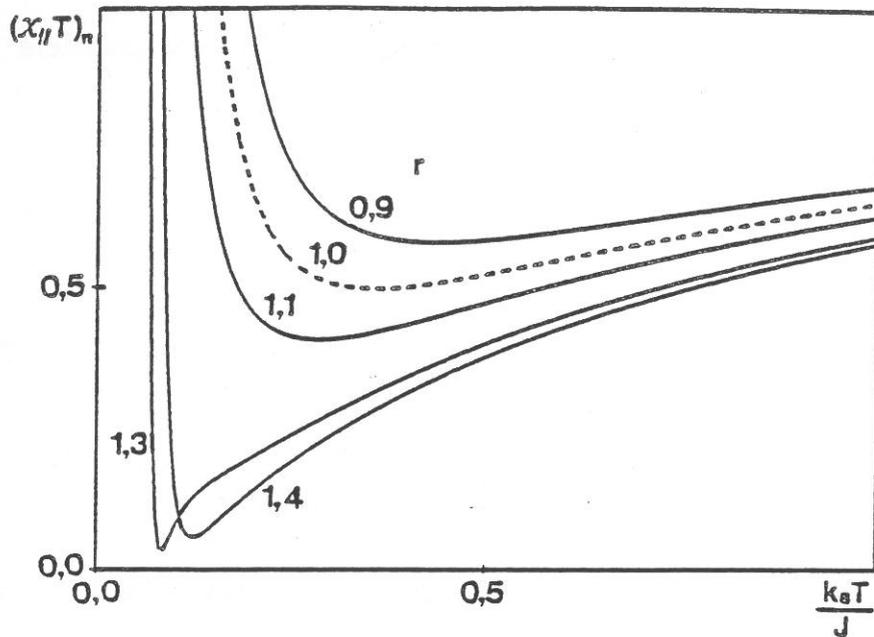


Fig.A19-5 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, pour diverses valeurs de r et dans le cas $K_z=J/2$ ($J>0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=0,50$).

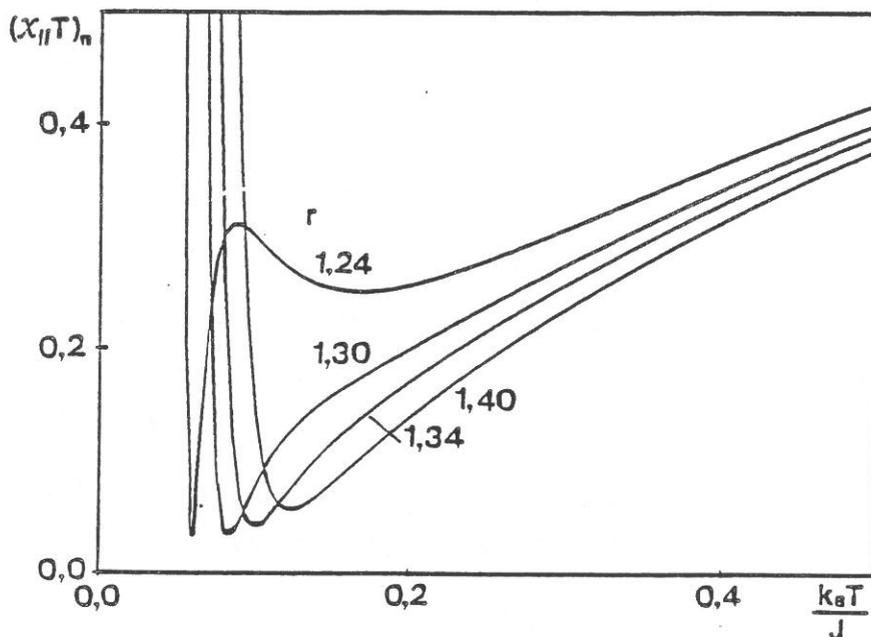


Fig.A19-6 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, au voisinage de la compensation et dans le cas $K_z=J/2$ ($J>0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=0,50$).

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \left(-\frac{\pi}{c} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{a^2}{c} \right), \quad (\text{A19-36})$$

$$R \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\frac{a}{c} P \left(1 - \frac{5}{24} \frac{c^2}{a^4} + \dots \right), \quad (\text{A19-37})$$

$$T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \left(\frac{a}{c} \right)^2 P \left(1 - \frac{c}{2a^2} - \frac{19}{24} \frac{c^2}{a^4} + \dots \right); \quad (\text{A19-38})$$

$P-Q$ est toujours donné par (A19-25). La susceptibilité parallèle s'écrit :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \left(\frac{a}{c} r \left(1 - \frac{5}{24} \frac{c^2}{a^4} + \dots \right) - 1 \right)^2 \exp\left(-\frac{a^2}{c} \right). \quad (\text{A19-39})$$

$r = 2K_z/J$:

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta \left(\frac{g}{2} \right)^2 \left(\frac{J}{2K_z} r - 1 \right)^2 \exp\left(\frac{\beta J^2}{4K_z} \right). \quad (\text{A19-40})$$

La susceptibilité parallèle diverge comme $\beta \exp(\beta J^2/4K_z)$.

$r = 2K_z/J$:

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \left(\frac{5}{12} \right)^2 \frac{K_z}{J} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\beta J^2}{4K_z} \right)}{\left(\frac{\beta J^2}{4K_z} \right)^3}. \quad (\text{A19-41})$$

La susceptibilité diverge comme $\exp(\beta J^2/4K_z)/(\beta J^2/4K_z)^3$.

Ces comportements sont illustrés par les courbes des figures A19-7 et 8.

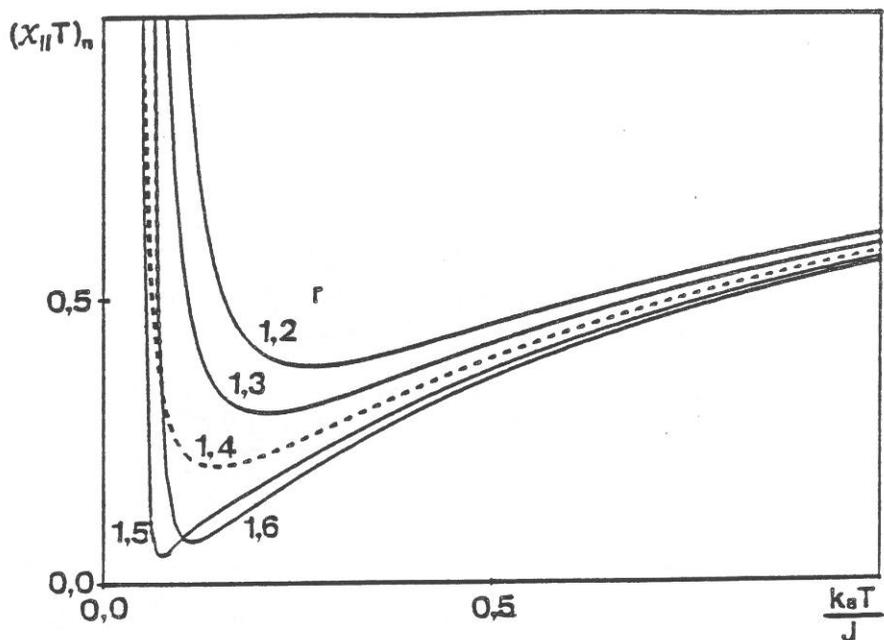


Fig.A19-7 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, pour diverses valeurs de r et dans le cas $K_z > J/2$ ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=0,70$).

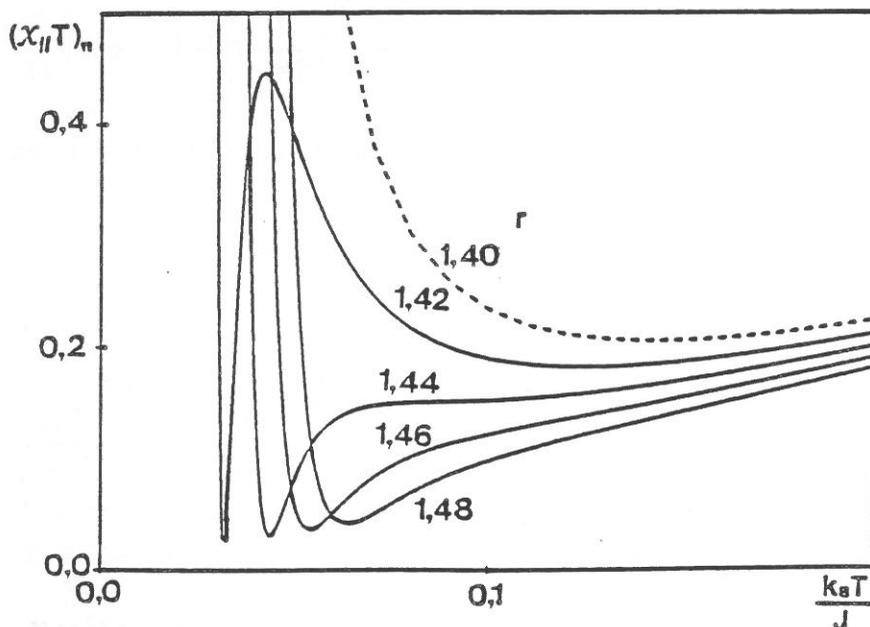


Fig.A19-8 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S, au voisinage de la compensation et dans le cas $K_z > J/2$ ($J > 0$, $g=2$, $d=3$, $K_z=0,70$).

2- Expression de l'aimantation parallèle

Nous procédons comme dans l'annexe 15 : la fonction de partition rapportée à une cellule est donnée par la valeur propre dominante $v_1(B)$ de la matrice (\mathcal{T}). En posant :

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix} = 2a \pm \beta r B \quad , \quad y = \beta r B \quad , \quad (\text{A19-42})$$

$$\mathcal{S} = \frac{1}{2} \left[I\left(c, \frac{x}{2}\right) \exp\left(\beta \frac{g}{2} B\right) + I\left(c, \frac{x'}{2}\right) \exp\left(-\beta \frac{g}{2} B\right) \right] \quad , \quad (\text{A19-43})$$

$$\mathcal{P} = \frac{1}{4} \left[I\left(c, \frac{x}{2}\right) I\left(c, \frac{x'}{2}\right) - \left\{ I\left(c, \frac{y}{2}\right) \right\}^2 \right] \quad , \quad (\text{A19-44})$$

où la fonction $I(c, w)$ est définie par (A19-7), les valeurs propres de (\mathcal{T}) s'écrivent :

$$\begin{pmatrix} v_1(B) \\ v_2(B) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{S} \pm \sqrt{\mathcal{S}^2 - 4\mathcal{P}} \right) \quad . \quad (\text{A19-45})$$

L'aimantation parallèle est donnée par :

$$\mathcal{M}_{//} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \text{Ln}(v_1(B))}{\partial B} \quad . \quad (\text{A19-46})$$

Le calcul de cette expression ne soulève pas de difficultés majeures. Pour étudier le comportement de l'aimantation parallèle à basse température, nous sommes conduits à rechercher les minima de l'énergie $\mathcal{E}_{\theta, \sigma}$ rapportée à une cellule

$$\mathcal{E}_{\theta, \sigma} = J\sigma \cos\theta + K_z \cos^2\theta - (\sigma + r \cos\theta) \frac{gB}{2} \quad , \quad \sigma = \pm 1 \quad , \quad (\text{A19-47})$$

où θ est l'angle que fait le spin S avec l'axe Oz , r le rapport des moments.

En définissant les quantités réduites :

$$k = \frac{K_z}{J} \quad , \quad b = \frac{gB}{2J} \quad , \quad (\text{A19-48})$$

la recherche du minimum de l'énergie réduite $\mathcal{E}_{\theta, \sigma}$ conduit à considérer, au zéro absolu :

$$\cos\theta = \pm 1 \quad , \quad \cos\theta' = \frac{rb-\sigma}{2k} \quad . \quad (\text{A19-49})$$

La recherche des zones de prédominances en fonction de k et b revient à déterminer la plus petite des quantités $\mathcal{E}_{0,1}$, $\mathcal{E}_{0,-1}$, $\mathcal{E}_{\pi,1}$, $\mathcal{E}_{\pi,-1}$, $\mathcal{E}_{\theta',1}$ et $\mathcal{E}_{\theta',-1}$. Le résultat de cette étude est résumé sur la figure A19-9. La figure A19-10 représente le diagramme des états de la chaîne, au zéro absolu, en fonction des paramètres k , r et b . Les variations de l'aimantation parallèle en fonction du champ réduit b correspondant aux diverses zones de la figure A19-9 sont représentées sur les figures A19-11 à 17.

3- Expression de la longueur de corrélation

Elle est toujours donnée par la relation (A1-15) ; compte tenu de la définition (A1-14) du rapport u et de la relation (A19-45), nous avons :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2} \frac{I(c,a)}{I(c,0)} \quad . \quad (\text{A19-50})$$

Nous pouvons dès lors écrire :

$K_z < 0 < J/2$ ($a < 0 < c$) :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{-2K_z}{J-2K_z} \exp(\beta J) \quad . \quad (\text{A19-51})$$

$0 < K_z < J/2$ ($a < c < 0$) :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \left(\frac{\beta K_z}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\exp(\beta(J - K_z))}{\beta(J - 2K_z)} \quad . \quad (\text{A19-52})$$

$0 < J/2 \leq K_z$ ($c \leq a < 0$) :

$$\xi \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \exp\left(\frac{\beta J^2}{4K_z}\right) \quad . \quad (\text{A19-53})$$

4- Expression de la susceptibilité perpendiculaire

Comme en l'absence d'anisotropie (annexe 14), la susceptibilité perpendiculaire se met sous la forme :

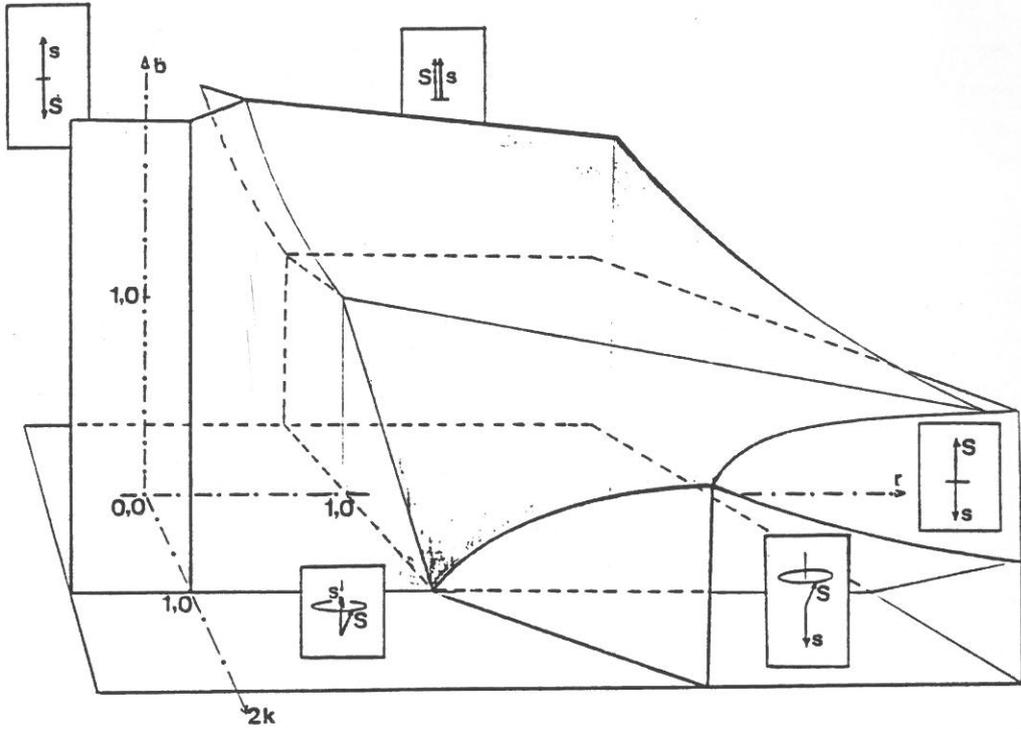


Fig.A19-10 : Diagramme de phase à $T=0$ K des états d'une chaîne $(S,1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S ($d=3$), en fonction de r , $2k$ et b .

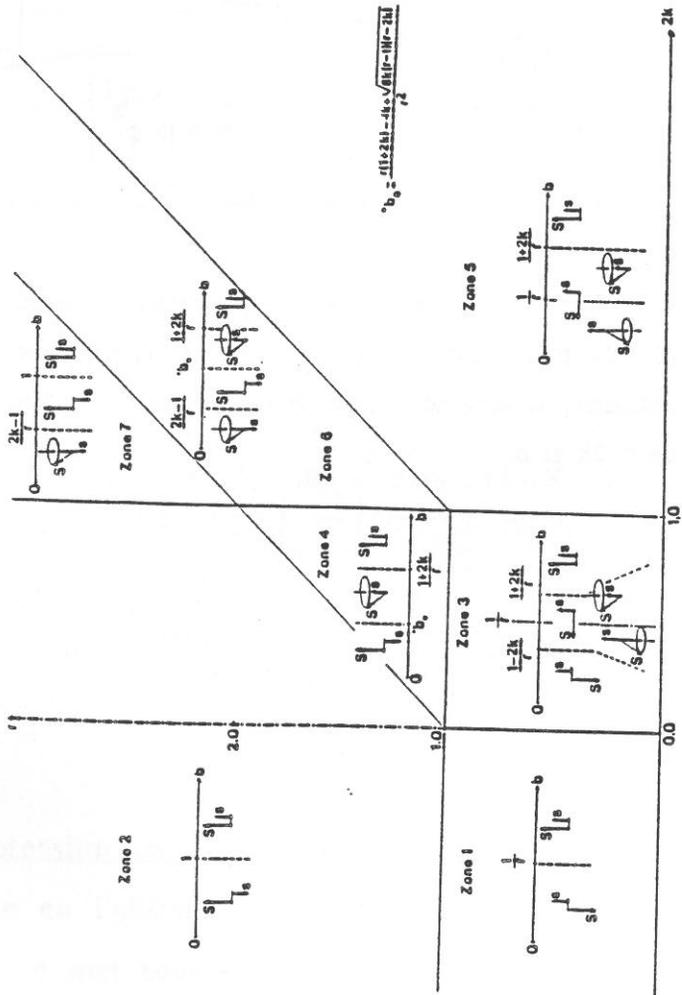


Fig.A19-9: Diagramme de phase à $T=0$ K des états d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction de r et 2k.

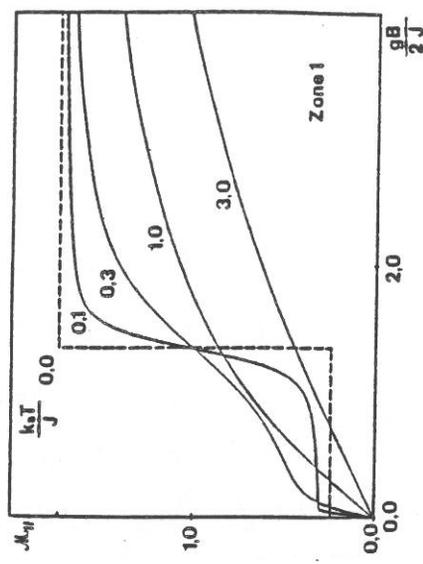


Fig.A19-11: Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction du champ réduit $gB/2J$ et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$; zone 1 : $K_z = -0.25$, $r=0.75$).

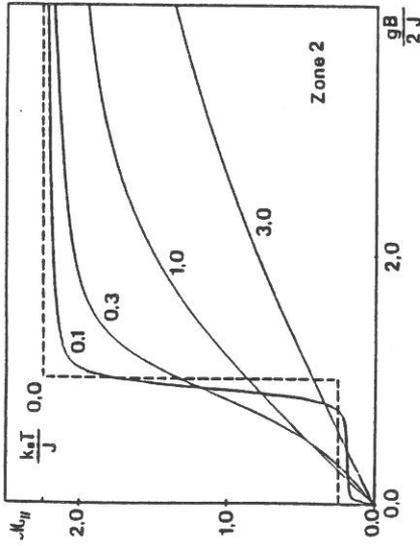


Fig.A19-12. Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S.1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction du champ réduit $gB/2J$ et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$; zone 2 : $K_z = -0.25$, $r=1.25$).

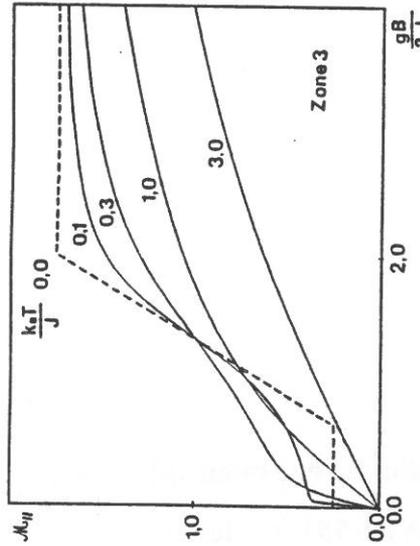


Fig.A19-13. Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S.1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction du champ réduit $gB/2J$ et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$; zone 3 : $K_z = 0.25$, $r=0.75$).

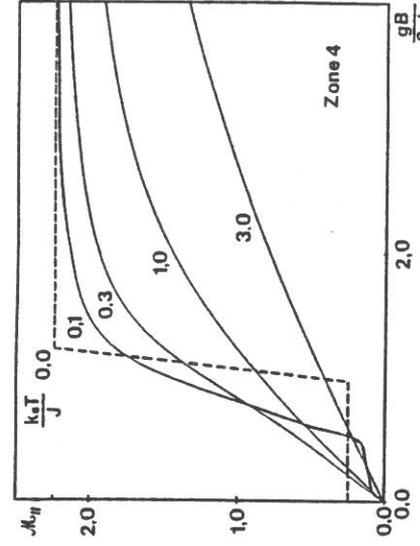


Fig.A19-14. Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S.1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction du champ réduit $gB/2J$ et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$; zone 4 : $K_z = 0.25$, $r=1.25$).

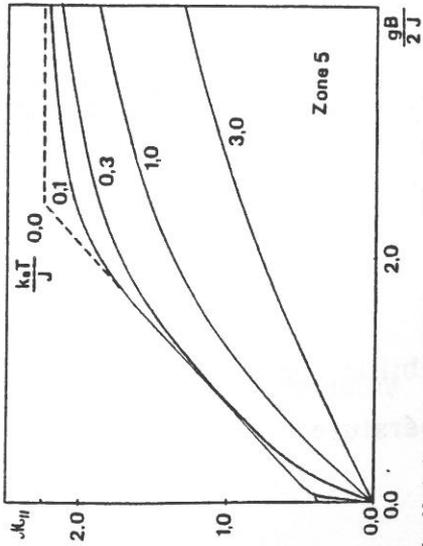


Fig.A19-15. Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S.1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction du champ réduit $gB/2J$ et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$; zone 5 : $K_z = 1.00$, $r=1.25$).

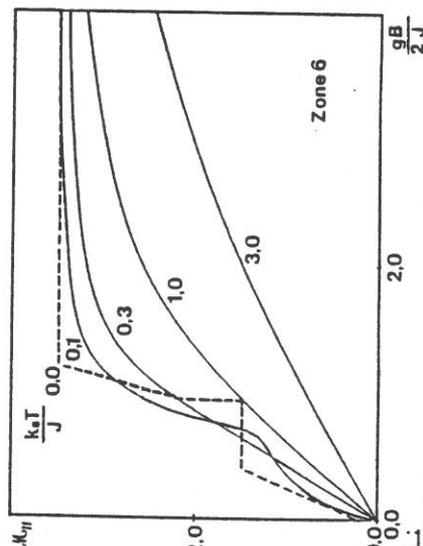


Fig.A19-16. Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S.1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction du champ réduit $gB/2J$ et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$; zone 6 : $K_z = 1.00$, $r=2.50$).

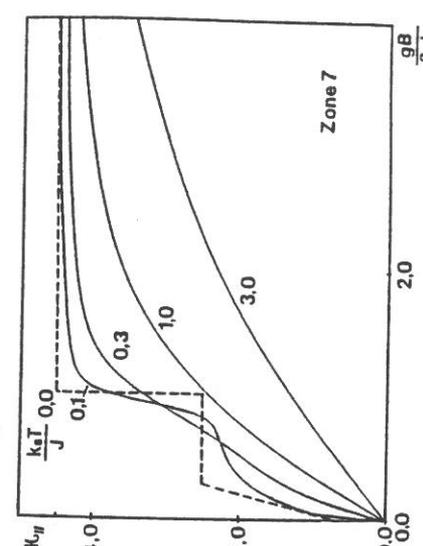


Fig.A19-17. Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S.1/2) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S (d=3), en fonction du champ réduit $gB/2J$ et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0$, $g=2$; zone 7 : $K_z = 1.00$, $r=3.50$).

$$\chi_{\perp} = \beta (M_c^2 X_{\perp}^c + M_q^2 X_{\perp}^q) , \quad (\text{A19-54})$$

où M_c et M_q sont les amplitudes des moments associés aux spins classiques et quantiques. X_{\perp}^c et X_{\perp}^q sont des fonctions sans dimension qui expriment l'essentiel dans la variation thermique des contributions correspondantes de la susceptibilité perpendiculaire. Nous avons :

$$X_{\perp}^c = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{T}{P} \right) , \quad (\text{A19-55})$$

$$X_{\perp}^q = \frac{U}{P^2} . \quad (\text{A19-56})$$

Les quantités P et T sont données par (A19-8 et 10) et U est défini par :

$$U = \iint dS dS' \exp(-\beta K_z \{(S^z)^2 + (S'^z)^2\}) \times \\ \times \text{ch}(aS^z) \frac{\text{sh}(a(S^z + S'^z))}{a(S^z + S'^z)} \text{ch}(aS'^z) . \quad (\text{A19-57})$$

Nous retrouvons l'expression (A14-15), enrichie d'une exponentielle liée au terme d'anisotropie. En utilisant la définition (A19-55) et les relations (A19-20, 31 et 38), la susceptibilité perpendiculaire classique s'écrit à basse température :

$K_z < 0 < J/2$ ($a < 0 < c$) et $0 < K_z < J/2$ ($a < c < 0$) :

$$\chi_{\perp}^c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{M_c^2}{J-2K_z} \left(1 - \frac{1}{J-2K_z} \frac{1}{\beta} + \dots \right) . \quad (\text{A19-58})$$

La susceptibilité perpendiculaire classique tend vers une constante à basse température.

$K_z = J/2$ ($c=a$) :

$$\chi_{\perp}^c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} M_c^2 \left(\frac{2\beta}{\pi J} \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{M_c^2}{J} + \dots \quad (\text{A19-59})$$

La susceptibilité perpendiculaire classique diverge comme $\beta^{1/2}$.

$0 < J/2 < K_z$ ($c < a < 0$) :

$$\chi_{\perp}^c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta M_c^2}{2} \left(1 - \left(\frac{J}{2K_z} \right)^2 \right) - \frac{M_c^2}{4K_z} + \dots \quad (\text{A19-60})$$

La susceptibilité perpendiculaire classique diverge en $1/T$.

Ces comportements sont illustrés par les courbes de la figure A19-18.

Pour étudier le comportement à basse température de la susceptibilité perpendiculaire quantique, nous sommes conduits à évaluer l'intégrale U définie par (A19-57) qui peut se mettre sous la forme :

$$U = \int_0^1 dy J^2(a, ay) \quad , \quad (\text{A19-61})$$

avec :

$$J(a, ay) = \int_0^1 dx \exp(cx^2) \operatorname{ch}(ax) \operatorname{ch}(ayx) \quad , \quad (\text{A19-62})$$

où x représente la composante S^z du spin S . A basse température, l'intégrale $J(a, ay)$ s'écrit :

$$J(a, ay) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \int_0^1 dx \exp(cx^2) [\exp(-a(1+y)) + \exp(-a(1-y))] \quad . \quad (\text{A19-63})$$

Lorsque nous avons $c \leq a < 0$, chacun des intégrands présente dans (A19-63) un extremum $x_{0,\epsilon}$ tel que :

$$x_{0,\varepsilon} = \frac{a}{2c} (1 + \varepsilon y) , \quad (\text{A19-64})$$

avec $\varepsilon=+1$ pour le premier intégrant et $\varepsilon=-1$ pour l'autre. Cet extremum correspond à une valeur de x qui se situe à l'intérieur du segment $[0,1]$. En utilisant la même technique que pour calculer celui de l'expression (A19-15), nous obtenons :

$$J(a,ay) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{4} \left(-\frac{\pi}{c} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\exp\left(-\frac{a^2}{4c} (1+y)^2 \right) + \exp\left(-\frac{a^2}{4c} (1-y)^2 \right) \right) ; \quad (\text{A19-65})$$

compte tenu de (A19-61), et en se plaçant à basse température :

$$U \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\frac{\pi}{16c} \int_0^1 dy \left(\exp\left(-\frac{a^2}{4c} (1+y)^2 \right) + \exp\left(-\frac{a^2}{4c} (1-y)^2 \right) \right) . \quad (\text{A19-66})$$

En remarquant que l'intégrant est maximum pour y voisin de 1, nous obtenons finalement :

$$U \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\pi}{32a^2} \exp\left(-\frac{2a^2}{c} \right) \left(1 + 4 \exp\left(\frac{3a^2}{2c} \right) + \dots \right) . \quad (\text{A19-67})$$

Lorsque nous avons $a < c < 0$ et $a < 0 < c$, l'extremum de la fonction correspond à une valeur de x située à l'extérieur du segment $[0,1]$. L'intégrant est encore extremal au voisinage de $y=1$. En utilisant la même technique que pour calculer J_n (A19-16), nous obtenons à basse température :

$$U \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\frac{1}{2a} \left(\frac{\exp(c-2a)}{8(c-a)} \right)^2 \left(1 + \frac{1}{c-a} + \dots \right) . \quad (\text{A19-68})$$

$K_z < 0 < J/2$ ($a < 0 < c$) et $0 < K_z < J/2$ ($a < c < 0$) :

A l'aide de (A19-31, 56 et 68), nous avons dans la même limite :

$$\chi_{\perp}^q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{J} \left(1 + \frac{1}{J-2K_z} \frac{1}{\beta} + \dots \right) . \quad (\text{A19-69})$$

La susceptibilité perpendiculaire quantique tend vers la constante $1/J$.

$0 < J/2 \leq K_z$ ($c \leq a < 0$) :

$$\chi_{\perp}^q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{2K_z}{J^2} \left(1 + 4 \exp\left(-\frac{3\beta J^2}{8K_z}\right) + \dots \right) . \quad (\text{A19-70})$$

La susceptibilité perpendiculaire quantique tend vers le rapport $2K_z/J$.

Ces comportements sont illustrés par les courbes de la figure A19-19.

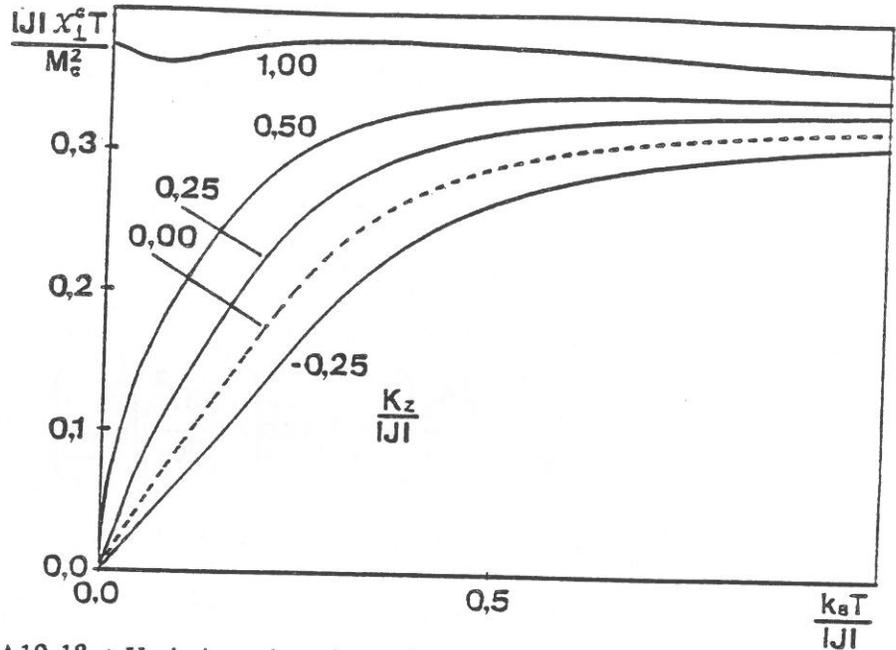


Fig.A19-18 : Variation thermique de la contribution classique à la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne $(S, 1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S ($d=3$), pour diverses valeurs du rapport K_z/J (M_c représente l'amplitude du moment associé au spin classique).

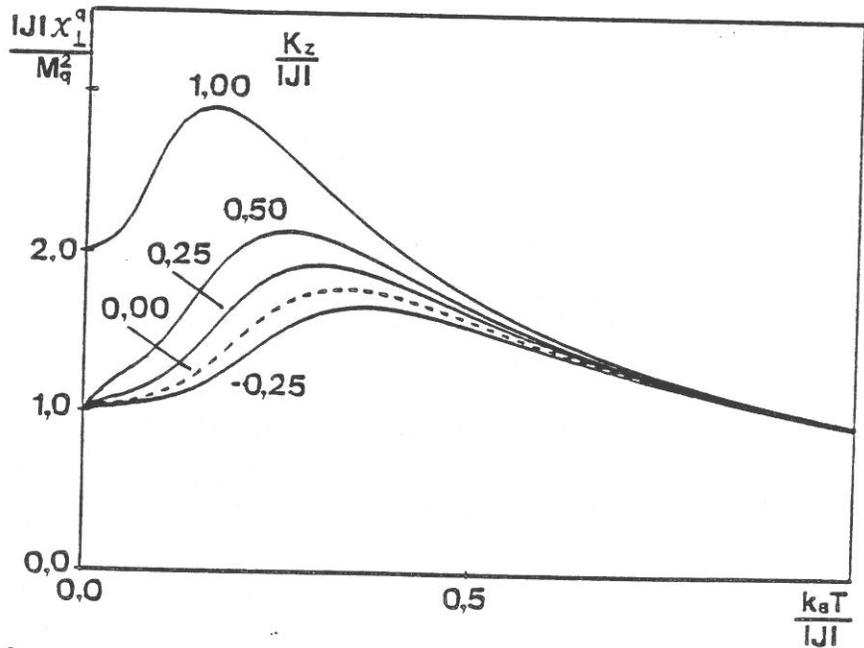


Fig.A19-19 : Variation thermique de la contribution quantique à la susceptibilité perpendiculaire d'une chaîne $(S, 1/2)$ présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin S ($d=3$), pour diverses valeurs du rapport K_z/J (M_q représente l'amplitude du moment associé au spin quantique).

Annexe 20

**CHAINE ALEATOIRE ALTERNEE (S,1) DE LONGUEUR FINIE,
PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z ET UNE ANISOTROPIE AXIALE
(LE LONG DE L'AXE OZ), SUR LE SPIN 1.
FONCTION DE PARTITION EN PRESENCE D'UN CHAMP B
PARALLELE A L'AXE O Z
CORRELATIONS EN CHAMP NUL.
EXPRESSION DE LA SUSCEPTIBILITE PARALLELE
DE LA CHAINE REGULIERE INFINIE**

Nous allons procéder comme dans l'annexe 12 pour établir l'expression de la fonction de partition en champ B non nul ($\parallel Oz$). Pour une chaîne commençant à la cellule 0 et se terminant à la cellule N, nous avons :

$$Z_N(B) = \int dS_0 \text{Tr}_{s_0} \int dS_1 \text{Tr}_{s_1} \dots \int dS_i \text{Tr}_{s_i} \dots \int dS_N \text{Tr}_{s_N} \\ \times \exp \left(-\beta \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[\tilde{H}_k(S_k^z, S_{k+1}^z, s_k) + \tilde{H}_k^{\text{mag.}} + H_k^{\text{anis.}} \right] \right. \right. \\ \left. \left. + \tilde{H}_N(S_N^z, 0, s_N^z) + \tilde{H}_N^{\text{mag.}} + H_N^{\text{anis.}} \right\} \right), \quad (\text{A20-1})$$

où \tilde{H}_k , $\tilde{H}_k^{\text{mag.}}$ et $H_k^{\text{anis.}}$ sont donnés par les relations (III-26, 27 et 60) (avec S_{N+1}^z nul) et où $\int dS_i$ et Tr_{s_i} ont la même signification que dans l'annexe 3.

Compte tenu de la commutativité de ces opérateurs, nous pouvons écrire :

$$Z_N(B) = \int dS_0 \exp(-\beta \tilde{H}_0^{\text{mag.}}) \text{Tr}_{s_0} \dots \int dS_i \exp(-\beta \tilde{H}_i^{\text{mag.}}) \text{Tr}_{s_i} \dots \\ \times \int dS_N \exp(-\beta \tilde{H}_N^{\text{mag.}}) \text{Tr}_{s_N} \prod_{k=0}^N \exp(-\beta [\tilde{H}_k(S_k^z, S_{k+1}^z, S_k^z) + H_k^{\text{anis.}}]). \quad (\text{A20-2})$$

Pour développer cette expression, nous sommes conduits à poser :

$$Z_N(B) = \sum_{m_N = -\sigma}^{+\sigma} Z_N^{m_N}(B) \quad , \quad \sigma = 1 \quad , \quad (\text{A20-3})$$

avec :

$$Z_N^{m_N}(B) = \int dS_0 \exp(b_0 S_0^z) \text{Tr}_{s_0} \dots \int dS_i \exp(b_i S_i^z) \text{Tr}_{s_i} \dots \\ \times \int dS_N \exp(b_N S_N^z) \text{Tr}_{s_N} \sum_{m_{N-1} = -\sigma}^{+\sigma} \exp(\beta (g_{N-1} m_{N-1} B - k_z m_{N-1}^2)) \\ \times \int dS_{N-1} \exp((a_{N-1,+} m_{N-1} + b_{N-1}) S_{N-1}^z) \\ \times \prod_{k=0}^{N-2} \exp(-\beta [\tilde{H}_k(S_k^z, S_{k+1}^z, S_k^z) + H_k^{\text{anis.}}]) \exp(\beta (g_N m_N B - k_z m_N^2)) \\ \times \int dS_N \exp((a_{N-1,-} m_{N-1} + a_{N,+} m_N + b_N) S_N^z) \quad , \quad (\text{A20-4})$$

où nous avons :

$$a_{i,\pm} = -\beta J_{i,\pm} \quad , \quad b_i = \beta G_i B \quad . \quad (\text{A20-5})$$

En définissant $Z_{N-1}^{m_{N-1}}(B)$ comme nous avons défini $Z_N^{m_N}(B)$, c'est-à-dire pour une chaîne se terminant à la cellule $N-1$, nous pouvons écrire :

$$Z_N^{m_N}(B) = \sum_{m_{N-1} = -\sigma}^{+\sigma} (\mathcal{J}_{N, m_N, m_{N-1}}) Z_{N-1}^{m_{N-1}}(B) \quad , \quad (\text{A20-6})$$

où nous avons posé :

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{J}_N)_{m_N m_{N-1}} &= \exp\left(\beta \left(g_N m_N B - k_z m_N^2\right)\right) \\
 &\times \int dS_N \exp\left((a_{N-1,-} m_{N-1} + a_{N,+} m_N + b_N) S_N^z\right) . \quad (\text{A20-7})
 \end{aligned}$$

Tout calcul effectué, il vient :

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{J}_N)_{m_N m_{N-1}} &= \exp(\beta g_N m_N B) \\
 &\times \left(\delta(m_N^2, 1) \left[\delta(m_{N-1}^2, 1) \tilde{P}_N + \delta(m_{N-1}, 0) E_N \tilde{S}_{1,N} + m_{N-1} \tilde{R}_N \right] \right. \\
 &\quad + \delta(m_{N-1}^2, 1) \left(\delta(m_N, 0) \tilde{S}'_{1,N} + m_N \tilde{R}'_N \right) \\
 &\quad + m_N \delta(m_{N-1}, 0) E_N \tilde{S}_{2,N} + m_{N-1} \delta(m_N, 0) \tilde{S}'_{2,N} \\
 &\quad \left. + m_N m_{N-1} \tilde{Q}_N + \delta(m_N, 0) \delta(m_{N-1}, 0) \tilde{C}_N \right) . \quad (\text{A20-8})
 \end{aligned}$$

δ renvoie à la fonction de Dirac et nous avons posé :

$$E_i = \exp(-\beta k_{z,i}) , \quad (\text{A20-9})$$

$$\tilde{P}_i = E_i \int dS_i \operatorname{ch}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{ch}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{ch}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-10})$$

$$\tilde{Q}_i = E_i \int dS_i \operatorname{sh}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{ch}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-11})$$

$$\tilde{R}_i = E_i \int dS_i \operatorname{sh}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{ch}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{sh}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-12})$$

$$\tilde{R}'_i = E_i \int dS_i \operatorname{ch}(a_{i-1,-} S_i^z) \operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{sh}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-13})$$

$$\tilde{S}_{1,i} = \int dS_i \operatorname{ch}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{ch}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-14})$$



$$\tilde{S}_{2,i} = \int dS_i \operatorname{sh}(a_{i,+} S_i^z) \operatorname{sh}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-15})$$

$$\tilde{S}'_{1,i} = \int dS_i \operatorname{ch}(a_{i,-} S_i^z) \operatorname{ch}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-16})$$

$$\tilde{S}'_{2,i} = \int dS_i \operatorname{sh}(a_{i,-} S_i^z) \operatorname{sh}(b_i S_i^z) , \quad (\text{A20-17})$$

$$\tilde{C}_i = \int dS_i \operatorname{ch}(b_i S_i^z) . \quad (\text{A20-18})$$

$(\mathcal{T})_{m_N m_{N-1}}$ apparaît donc comme l'élément courant d'une matrice de transfert (\mathcal{T}) de dimension 3×3 ; en répétant le procédé, nous avons :

$$Z_N(B) = \prod_{i=1}^N (\mathcal{T}_i) Z_0(B) , \quad (\text{A20-19})$$

où le vecteur $Z_0(B)$ se définit comme le vecteur $Z_N(B)$ et a pour composante courante :

$$Z_0^{m_0}(B) = \exp(\beta g_0 m_0 B) \left(\delta(m_0^2, 1) E \tilde{S}_{1,0} + \delta(m_0, 0) \tilde{C}_0 + m_0 E \tilde{S}_{2,0} \right) . \quad (\text{A20-20})$$

Pour examiner la fonction de partition $Z_N(B)$, il faut mettre chaque matrice (\mathcal{T}_i) (de dimension 3×3) sous la forme :

$$(\mathcal{T}_i) = (\mathcal{S}_i) (\mathcal{D}_i) (\mathcal{S}_i)^{-1} , \quad (\text{A20-21})$$

où (\mathcal{D}_i) est la matrice diagonale associée à (\mathcal{T}_i) dont les valeurs propres $v_{i,1}$, $v_{i,2}$ et $v_{i,3}$ sont dans l'ordre des modules décroissants. Le produit des matrices (\mathcal{T}_i) s'écrit alors :

$$\prod_{i=1}^N (\mathcal{T}_i) = (\mathcal{S}_N) (\mathcal{D}_N) (\mathcal{S}_N)^{-1} \dots (\mathcal{S}_i) (\mathcal{D}_i) (\mathcal{S}_i)^{-1} (\mathcal{S}_{i-1}) (\mathcal{D}_{i-1}) (\mathcal{S}_{i-1})^{-1} \dots \\ \times (\mathcal{S}_1) (\mathcal{D}_1) (\mathcal{S}_1)^{-1} . \quad (\text{A20-22})$$



Comme il n'y a pas de corrélation entre les paramètres relatifs à des indices distincts, les matrices $(\mathcal{S}_{i-1})^{-1}$ et (\mathcal{S}_i) ne sont pas en général inverses l'une de l'autre. En conséquence, nous ne pouvons pas faire apparaître un produit de matrices diagonales dans (A20-22) et nous ne pouvons pas exprimer $Z_N(B)$ à l'aide du produit des valeurs propres dominantes. Il est donc impossible, dans le cas où la chaîne est aléatoire, d'obtenir une expression littérale simple de la fonction de partition $Z_N(B)$ ainsi que de l'aimantation parallèle. Cette impossibilité demeure même en champ nul de sorte que l'on ne peut pas obtenir non plus une expression simple pour la susceptibilité parallèle.

Lorsqu'il n'y a plus d'aléas sur les paramètres constitutifs de la chaîne, cette difficulté disparaît et l'on peut exprimer la fonction de partition (quelle que soit la valeur de B) sous la forme du produit des valeurs propres dominantes : il devient dès lors possible d'obtenir des expressions littérales pour l'aimantation parallèle, les corrélations en champ nul et la susceptibilité parallèle. En l'absence d'aléas, l'indice de site qui affecte les diverses grandeurs physiques est superflu. D'autre part, les intégrales \tilde{R} et \tilde{R}' , \tilde{S}_1 et \tilde{S}'_1 , \tilde{S}_2 et \tilde{S}'_2 sont égales entre elles. En posant :

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix} = 2a \pm b \quad , \quad (\text{A20-23})$$

$$\begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix} = a \pm b \quad , \quad (\text{A20-24})$$

l'intégration des relations (A20-10 à 18) conduit à :

$$\begin{pmatrix} \tilde{P} \\ \tilde{Q} \end{pmatrix} = \frac{EA}{4} [\mathcal{J}_\nu(x) + \mathcal{J}_\nu(x') \pm 2 \mathcal{J}_\nu(b)] \quad , \quad (\text{A20-25})$$

$$\tilde{R} = \frac{EA}{4} [\mathcal{J}_\nu(x) - \mathcal{J}_\nu(x')] , \quad (\text{A20-26})$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{S}_1 \\ \tilde{S}_2 \end{pmatrix} = \frac{A}{4} [\mathcal{J}_\nu(y) \pm \mathcal{J}_\nu(y')] , \quad (\text{A20-27})$$

$$C = A \mathcal{J}_\nu(b) , \quad (\text{A20-28})$$

où A , ν et $\mathcal{J}_k(u)$ sont définis par les relations (A12-23, 24 et 25). La remarque faite en annexe 12, concernant le cas des valeurs non entières de ν lorsque l'argument u est négatif, reste toujours valable.

En appelant F la valeur en champ nul de l'intégrale \tilde{F} (rel.A20-25 à 28) la matrice ($\mathcal{T}(0)$) peut se mettre sous la forme :

$$(\mathcal{T}(0)) = \begin{pmatrix} P+Q & ES_1 & P-Q \\ S_1 & C & S_1 \\ P-Q & ES_1 & P+Q \end{pmatrix} , \quad (\text{A20-29})$$

avec :

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = \frac{EA}{2} [\mathcal{J}_\nu(2a) \pm \mathcal{J}_\nu(0)] , \quad (\text{A20-30})$$

$$S_1 = A \mathcal{J}_\nu(a) , \quad (\text{A20-31})$$

$$C = A \mathcal{J}_\nu(0) = 1 . \quad (\text{A20-32})$$

Les valeurs propres de la matrice ($\mathcal{T}(0)$) sont données par :

$$\begin{pmatrix} v_1(0) \\ v_3(0) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (2P + C \pm \sqrt{\Delta}) , \quad (\text{A20-33})$$

$$v_2(0) = 2Q , \quad (\text{A20-34})$$

avec :

$$\Delta = (2P-C)^2 + 8ES_1^2 . \quad (\text{A20-35})$$

En effet, la matrice ($\mathcal{T}(0)$) n'est pas symétrique mais elle peut se mettre sous forme diagonale à l'aide de la matrice (\mathcal{S}) telle que :

$$(\mathcal{S}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{c'}{E\sqrt{2}} & \frac{E^2c}{\sqrt{2}} \\ 0 & c & c' \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{c'}{E\sqrt{2}} & \frac{E^2c}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (\text{A20-36})$$

avec :

$$c = \frac{1}{E} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{2P-C}{\sqrt{\Delta}} \right)}, \quad c' = -\sqrt{\frac{E}{2} \left(1 + \frac{2P-C}{\sqrt{\Delta}} \right)}. \quad (\text{A20-37})$$

Nous en déduisons facilement à l'aide des relations (A20-3, 19, 21, 33 à 37) la fonction de partition $Z_N(B)$:

$$Z_N(0) = E \left(c - \frac{c'}{E} \right) (EcC - c'S_1\sqrt{2}) v_1^N(0) - (c' + E^2c) \left(\frac{c'}{E} C + cES_1\sqrt{2} \right) v_3^N(0). \quad (\text{A20-38})$$

Dans le cas où la chaîne devient infinie, nous avons :

$$Z_N(0) \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} E \left(c - \frac{c'}{E} \right) (EcC - c'ES_1\sqrt{2}) v_1^N(0). \quad (\text{A20-39})$$

Pour évaluer les corrélations $\langle S_i^z S_j^z \rangle$, $\langle S_i^z s_j^z \rangle$, $\langle s_i^z S_j^z \rangle$ et $\langle s_i^z s_j^z \rangle$ en champ nul, nous posons :

$$U_i^0 = 1, \quad U_i^1 = S_i^z, \quad U_i^2 = s_i^z \quad (\text{A20-40})$$

et :

$$\begin{aligned}
 U_{ijN}^{\alpha\alpha'} = & \int dS_0 \operatorname{Tr}_{s_0} \int dS_1 \operatorname{Tr}_{s_1} \dots \int dS_{i-1} \operatorname{Tr}_{s_{i-1}} \int dS_i \operatorname{Tr}_{s_i} U_i^\alpha \int dS_{i+1} \operatorname{Tr}_{s_{i+1}} \\
 & \times \int dS_{j-1} \operatorname{Tr}_{s_{j-1}} \int dS_j \operatorname{Tr}_{s_j} U_j^{\alpha'} \int dS_{j+1} \operatorname{Tr}_{s_{j+1}} \dots \int dS_N \operatorname{Tr}_{s_N} \\
 & \times \prod_{i=0}^N \exp\left(-\beta \left[H_i^{\text{éch.}} + H_i^{\text{anis.}} \right]\right), \quad (\text{A20-41})
 \end{aligned}$$

(nous remarquons que U_{ijN}^{00} est la fonction de partition (A20-45)). Les corrélations s'écrivent alors :

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{11}}{U_{ijN}^{00}}, \quad (\text{A20-42})$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{12}}{U_{ijN}^{00}}, \quad (\text{A20-43})$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{21}}{U_{ijN}^{00}}, \quad (\text{A20-44})$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{U_{ijN}^{22}}{U_{ijN}^{00}}. \quad (\text{A20-45})$$

En procédant comme pour le calcul de $Z_N(0)$, nous pouvons écrire :

$$U_{ijN}^{11} = \sum_{m_N = -\sigma}^{+\sigma} U_{ijN}^{11 m_N}, \quad (\text{A20-46})$$

où l'on a posé :

$$\begin{aligned}
U_{ijN}^{11 m_N} &= \sum_{m_0} \dots \sum_{m_i} \dots \sum_{m_j} \dots \sum_{m_{N-1}} \exp(-\beta k_z m_0^2) \int dS_0 \exp(am_0 S_0^z) \\
&\quad \times \exp(-\beta k_z m_1^2) \int dS_1 \exp(a(m_0+m_1)S_1^z) \dots \\
&\quad \times \exp(-\beta k_z m_i^2) \int dS_i S_i^z \exp(a(m_{i-1}+m_i)S_i^z) \dots \\
&\quad \times \exp(-\beta k_z m_j^2) \int dS_j S_j^z \exp(a(m_{j-1}+m_j)S_j^z) \dots \\
&\quad \times \exp(-\beta k_z m_N^2) \int dS_N \exp(a(m_{N-1}+m_N)S_N^z) . \quad (A20-47)
\end{aligned}$$

Nous avons :

$$U_{ijN}^{11} = \prod_{k_1=j+1}^N (\mathcal{T}_{k_1}^1(0)) (\mathcal{T}_j^1) \prod_{k_2=i+1}^{j-1} (\mathcal{T}_{k_2}^1(0)) (\mathcal{T}_i^1) \prod_{k_3=1}^{i-1} (\mathcal{T}_{k_3}^1(0)) Z_0(0) , \quad (A20-48)$$

où $Z_0(0)$ est le vecteur de composante courante $Z_0^{m_0}(0)$ (rel.A20-20) et où (\mathcal{T}_k^1) est la matrice d'élément courant :

$$(\mathcal{T}_k^1)_{m_k m_{k-1}} = \exp(-\beta k_k m_k^2) \int dS_k S_k^z \exp(a(m_{k-1}+m_k)S_k^z) , \quad (A20-49)$$

ou encore :

$$\begin{aligned}
(\mathcal{T}_k^1)_{m_k m_{k-1}} &= \left(\delta(m_k^2, 1) m_{k-1} + \delta(m_{k-1}^2, 1) m_k \right) R_1 \\
&\quad + (\delta(m_k, 0) m_{k-1} + E \delta(m_{k-1}, 0) m_k) V , \quad (A20-50)
\end{aligned}$$

avec :

$$R_1 = E \int dS S^z \operatorname{ch}(aS^z) \operatorname{sh}(aS^z) , \quad (A20-51)$$

$$V = \int dS S^z \operatorname{sh}(aS^z) ; \quad (\text{A20-52})$$

après intégration, ces quantités prennent la forme :

$$R_1 = \frac{EA}{2} 2a \mathcal{J}_{\nu+1}(2a) , \quad (\text{A20-53})$$

$$V = A a \mathcal{J}_{\nu+1}(a) , \quad (\text{A20-54})$$

avec $A, \tilde{\nu}$ et $\mathcal{J}_k(u)$ définis par les relations (A12-23, 24 et 25). En faisant un changement de base à l'aide de la matrice (\mathcal{S}) pour accéder à la base propre, nous avons :

$$U_{ijN}^{11} = (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{N-j} (\mathcal{S})^{-1} (\mathcal{J}_j^1) (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{j-i-1} (\mathcal{S})^{-1} (\mathcal{J}_i^1) (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{i-1} (\mathcal{S})^{-1} \mathbf{Z}_0(0) , \quad (\text{A20-55})$$

où la matrice (\mathcal{J}^1) est donnée par :

$$(\mathcal{J}^1) = \begin{pmatrix} 2R_1 & EV & 0 \\ V & 0 & -V \\ 0 & -EV & -2R_1 \end{pmatrix} , \quad (\text{A20-56})$$

Nous en déduisons :

$$U_{ijN}^{11} = v_2(0)^{j-i-1} \left(X_1 v_1(0)^{N-j} + X_2 v_3(0)^{N-j} \right) \times \\ \times \left(X_3 v_1(0)^{i-1} + X_4 v_3(0)^{i-1} \right) , \quad (\text{A20-57})$$

avec :

$$X_1 = \left(c - \frac{c'}{E} \right) (cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1) , \quad (\text{A20-58})$$

$$X_2 = \frac{1}{E} (c' + E^2 c) (c'V \sqrt{2} + 2cER_1) , \quad (\text{A20-59})$$

$$X_3 = (EcC - c'S_1\sqrt{2}) (cE^2V\sqrt{2} - 2c'R_1) , \quad (A20-60)$$

$$X_4 = (c'C + cE^2S_1\sqrt{2}) (c'V\sqrt{2} + 2cER_1) . \quad (A20-61)$$

Nous pouvons exprimer maintenant la corrélation $\langle S_i^z S_j^z \rangle$: elle apparaît sous la forme d'une fraction rationnelle par rapport aux valeurs propres en champ nul, $v_1(0)$, $v_2(0)$ et $v_3(0)$ définies par (A20-36 et 37). Dans la limite des chaînes infinies, nous avons :

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(cE^2V\sqrt{2} - 2c'R_1)^2}{E v_1(0)^2} \left(\frac{v_2(0)}{v_1(0)} \right)^{j-i-1} . \quad (A20-62)$$

Le calcul de l'auto-corrélation $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ s'effectue de façon analogue, mais avec un seul "pivot", en i . En définissant de même un vecteur U_{iiN}^{11} comme nous avons défini le vecteur U_{ijN}^{11} (rel.A20-46), il vient :

$$U_{iiN}^{11} = \prod_{k_1=i+1}^N (\mathcal{T}_{k_1}^{(0)}) (\mathcal{T}_i^{\prime 1}) \prod_{k_2=1}^{i-1} (\mathcal{T}_{k_2}^{(0)}) Z_0(0) , \quad (A20-63)$$

où $(\mathcal{T}_i^{\prime 1})$ est la matrice d'élément courant :

$$(\mathcal{T}_i^{\prime 1})_{m_i m_{i-1}} = \exp(-\beta k_i m_i^2) \int dS_i (S_i^z)^2 \exp(a(m_{i-1} + m_i) S_i^z) , \quad (A20-64)$$

ou encore :

$$\begin{aligned} (\mathcal{T}_i^{\prime 1}) = & 2 \delta(m_i m_{i-1}, 1) T + \left(\delta(m_i, 0) \delta(m_{i-1}^2, 1) + E \delta(m_{i-1}, 0) \delta(m_i^2, 1) \right) W \\ & + (E (\delta(m_i m_{i-1}, -1) - \delta(m_i m_{i-1}, 1)) + \delta(m_i, 0) \delta(m_{i-1}, 0)) D . \end{aligned} \quad (A20-65)$$

avec :

$$T = E \int dS (S^z)^2 \text{ch}^2(aS^z) , \quad (A20-66)$$

$$W = \int dS (S^z)^2 \operatorname{ch}(aS^z) , \quad (\text{A20-67})$$

$$D = \int dS (S^z)^2 , \quad (\text{A20-68})$$

après intégration, ces quantités prennent la forme :

$$T = \frac{EA}{4(\nu+1)} [(2\nu+1) (2a)^2 \mathcal{J}_{\nu+2}(2a) + \mathcal{J}_{\nu}(2a) + \mathcal{J}_{\nu}(0)] , \quad (\text{A20-69})$$

$$W = \frac{A}{2(\nu+1)} [(2\nu+1) a^2 \mathcal{J}_{\nu+2}(a) + \mathcal{J}_{\nu}(a)] , \quad (\text{A20-70})$$

$$D = \frac{1}{2(\nu+1)} . \quad (\text{A20-71})$$

En faisant un changement de base (toujours avec la matrice donnée par la relation (A20-39)), nous avons :

$$U_{iiN}^{11} = (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{N-i} (\mathcal{S})^{-1} (\mathcal{T}'_i) (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{i-1} (\mathcal{S})^{-1} \mathbf{Z}_0(0) , \quad (\text{A20-72})$$

où la matrice (\mathcal{T}'_i) s'écrit :

$$(\mathcal{T}'_i) = \begin{pmatrix} 2T-D & EW & ED \\ W & D & W \\ ED & EW & 2T-D \end{pmatrix} . \quad (\text{A20-73})$$

Tous calculs effectués, nous obtenons :

$$U_{iiN}^{11} = X'_1 \left(X'_2 v_1(0)^{N-1} - X'_3 v_1(0)^{i-1} v_3(0)^{N-i} \right) \\ + X'_4 \left(X'_5 v_3(0)^{N-1} - X'_6 v_1(0)^{N-i} v_3(0)^{i-1} \right) , \quad (\text{A20-74})$$

avec :

$$X'_1 = E (EcC - c'S_1 \sqrt{2}) , \quad (\text{A20-75})$$

$$X'_2 = \frac{1}{E} \left(c - \frac{c'}{E} \right) (2c'^2 T - 2cc'E^2 W \sqrt{2} + (Ec)^2 ED) , \quad (\text{A20-76})$$

$$X'_3 = \frac{1}{E^2} (c' + E^2 c) (Ecc' (2T-D) - (E(Ec)^2 - c'^2) W \sqrt{2}) , \quad (\text{A20-77})$$

$$X'_4 = - \frac{1}{E} (c'C + cE^2 S_1 \sqrt{2}) , \quad (\text{A20-78})$$

$$X'_5 = \frac{1}{E} (c' + E^2 c) (2E(E^2 c)^2 T - 2cc'E^2 W \sqrt{2} - c'^2 D) , \quad (\text{A20-79})$$

$$X'_6 = \left(c - \frac{c'}{E} \right) (E^2 cc' (2T-D) + (Ec'^2 - (E^2 c)^2) w \sqrt{2}) . \quad (\text{A20-80})$$

Lorsque la chaîne est de longueur finie, l'expression de l'auto-corrélation est extrêmement compliquée. Dans la limite d'une chaîne de longueur infinie, nous avons simplement :

$$\langle (S_i^z)^2 \rangle_{N \rightarrow +\infty} \sim \frac{2c'^2 T - 2cc'E^2 W \sqrt{2} + (Ec)^2 ED}{E v_1(0)} . \quad (\text{A20-81})$$

Le calcul de la corrélation $\langle S_i^z s_j^z \rangle$ nécessite l'évaluation de l'expression :

$$\begin{aligned} U_{ijN}^{12 m_N} &= \sum_{m_0} \dots \sum_{m_i} \dots \sum_{m_j} \dots \sum_{m_{N-1}} \exp(-\beta k_z m_0^2) \int dS_0 \exp(am_0 S_0^z) \\ &\times \exp(-\beta k_z m_1^2) \int dS_1 \exp(a(m_0+m_1) S_1^z) \dots \\ &\times \exp(-\beta k_z m_i^2) \int dS_i S_i^z \exp(a(m_{i-1}+m_i) S_i^z) \dots \\ &\times \exp(-\beta k_z m_j^2) m_j \int dS_j \exp(a(m_{j-1}+m_j) S_j^z) \dots \\ &\times \exp(-\beta k_z m_N^2) \int dS_N \exp(a(m_{N-1}+m_N) S_N^z) , \quad (\text{A20-82}) \end{aligned}$$

où $U_{ijN}^{12 m_N}$ se définit comme $U_{ijN}^{11 m_N}$ (rel.A20-46). Nous introduisons de même le vecteur U_{ijN}^{12} :

$$U_{ijN}^{12} = \prod_{k_1=j+1}^N (\mathcal{T}_{k_1}^2(0)) (\mathcal{T}_j^2) \prod_{k_2=i+1}^{j-1} (\mathcal{T}_{k_2}^2(0)) (\mathcal{T}_i^1) \prod_{k_3=1}^{i-1} (\mathcal{T}_{k_3}^2(0)) Z_0(0), \quad (\text{A20-83})$$

où (\mathcal{T}_k^2) est la matrice d'élément courant :

$$(\mathcal{T}_k^2)_{m_k m_{k-1}} = m_k \exp(-\beta k m_k^2) \int dS_k \exp(a(m_{k-1} + m_k) S_k^z), \quad (\text{A20-84})$$

ou encore :

$$\begin{aligned} (\mathcal{T}_k^2)_{m_k m_{k-1}} = m_k & \left(\delta(m_k^2, 1) \delta(m_{k-1}^2, 1) P + m_k m_{k-1} Q \right. \\ & \left. + \left(E \delta(m_k^2, 1) \delta(m_{k-1}, 0) + \delta(m_{k-1}^2, 1) \delta(m_k, 0) \right) S_1 \right). \quad (\text{A20-85}) \end{aligned}$$

En procédant comme pour le calcul de U_{ijN}^{11} et U_{iiN}^{11} , nous avons :

$$U_{ijN}^{12} = (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{N-j} (\mathcal{S})^{-1} (\mathcal{T}_j^2) (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{j-i-1} (\mathcal{S})^{-1} (\mathcal{T}_i^1) (\mathcal{S})(\mathcal{D})^{i-1} (\mathcal{S})^{-1} Z_0(0), \quad (\text{A20-86})$$

où la matrice (\mathcal{T}^2) vaut :

$$(\mathcal{T}^2) = \begin{pmatrix} P + Q & ES_1 & P - Q \\ 0 & 0 & 0 \\ - (P - Q) & - ES_1 & - (P + Q) \end{pmatrix}. \quad (\text{A20-87})$$

Tous calculs effectués, il vient :

$$\begin{aligned} U_{ijN}^{12} = v_2(0)^{j-i} & \left(X''_1 v_1(0)^{N-j} + X''_2 v_3(0)^{N-j} \right) x \\ & x \left(X_3 v_1(0)^{i-1} + X_4 v_3(0)^{i-1} \right), \quad (\text{A20-88}) \end{aligned}$$

où X_3 et X_4 sont définis par les relations (A20-60 et 61), X''_1 et X''_2 par :

$$X''_1 = -c' \left(c - \frac{c'}{E} \right), \quad X''_2 = c (c' + E^2 c) . \quad (\text{A20-89})$$

Dans le cas d'une chaîne infinie U_{ijN}^{12} prend une forme plus simple et, à l'aide de la relation (A20-43), nous avons :

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} - \frac{c' v_2(0) (cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1)}{E v_1(0)^2} \left(\frac{v_2(0)}{v_1(0)} \right)^{j-i-1} . \quad (\text{A20-90})$$

Le calcul de la corrélation $\langle S_i^z S_i^z \rangle$ se déduit aisément de celui effectué pour obtenir $\langle S_i^z S_j^z \rangle$: dans l'expression de U_{ijN}^{12} intervenant au numérateur, il suffit de remplacer $(v_2(0)/v_1(0))^{j-i}$ par 1 et dans le premier facteur l'exposant $N-j$ par $N-i$. Dans le cas de la chaîne infinie, nous avons alors :

$$\langle S_i^z S_i^z \rangle \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} - \frac{c' (cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1)}{E v_1(0)} . \quad (\text{A20-91})$$

Un cheminement analogue permet de calculer U_{ijN}^{21} et U_{ijN}^{22} :

$$U_{ijN}^{21} = v_2(0)^{j-i-1} \left(X_1 v_1(0)^{N-j} + X_2 v_3(0)^{N-j} \right) \\ \times \left(X''_3 v_1(0)^{i-1} + X''_4 v_3(0)^{i-1} \right), \quad (\text{A20-92})$$

où X_1 et X_2 sont définis par les relations (A20-58 et 59), X''_3 et X''_4 par :

$$X''_3 = (EcC - c'S_1 \sqrt{2}) (cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P), \quad (\text{A20-93})$$

$$X''_4 = -\frac{1}{E} (c'C - cE^2 S_1 \sqrt{2}) (c'ES_1 \sqrt{2} + 2E^2 cP) . \quad (\text{A20-94})$$

$$U_{ijN}^{22} = v_2(0)^{j-i} \left(X''_1 v_1(0)^{N-j} + X''_2 v_3(0)^{N-j} \right) \\ \times \left(X''_3 v_1(0)^{i-1} + X''_4 v_3(0)^{i-1} \right), \quad (\text{A20-95})$$

où X''_1 , X''_2 , X''_3 et X''_4 sont définis par les relations (A20-89, 93 et 94). En se plaçant dans le cas d'une chaîne infinie et en utilisant les relations (A20-44 et 45), nous avons :

$$\langle s_i^z s_j^z \rangle \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1) (cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P)}{E v_1(0)^2} \left(\frac{v_2(0)}{v_1(0)} \right)^{j-i-1}, \quad (\text{A20-96})$$

$$\langle s_i^z s_j^z \rangle \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} - \frac{c' v_2(0) (cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P)}{E v_1(0)^2} \left(\frac{v_2(0)}{v_1(0)} \right)^{j-i-1}. \quad (\text{A20-97})$$

L'expression de l'auto-corrélation $\langle (s_i^z)^2 \rangle$ se déduit de la corrélation $\langle s_i^z s_j^z \rangle$ de la même manière que nous avons déduit $\langle S_i^z s_i^z \rangle$ de $\langle S_i^z s_j^z \rangle$:

$$\langle (s_i^z)^2 \rangle \underset{N \rightarrow +\infty}{\sim} - \frac{c' (cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P)}{E v_1(0)}. \quad (\text{A20-98})$$

En partant de l'expression (II-13), la susceptibilité parallèle peut se mettre sous la forme :

$$\chi_{//} = \beta (A_1 + A_2 + A_3 + A_4), \quad (\text{A20-99})$$

avec :

$$A_1 = G^2 \frac{2c^2 T - 2cc'E^2 W \sqrt{2} + (Ec)^2 ED}{E v_1(0)}, \quad (\text{A20-100})$$

$$A_2 = 2G^2 \frac{(cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1)^2}{E v_1(0)^2} Y, \quad (\text{A20-101})$$

$$A_3 = 2gG \frac{cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1}{E v_1(0)^2} (-c' (v_2(0) Y + v_1(0)) + (cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P) Y), \quad (\text{A20-102})$$

$$A_4 = -g^2 \frac{c' (cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P)}{E v_1(0)^2} (2v_2(0) Y + v_1(0)), \quad (\text{A20-103})$$

où nous avons posé :

$$Y = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N \sum_{j>i} \left(\frac{v_2(0)}{v_1(0)} \right)^{j-i-1} . \quad (\text{A20-104})$$

En utilisant la relation (A4-10) où l'on a supprimé les barres de moyenne puisque la chaîne est régulière, nous avons simplement :

$$Y = \frac{1}{1 - \frac{v_2(0)}{v_1(0)}} . \quad (\text{A20-105})$$

Dans ces conditions, la susceptibilité parallèle s'écrit :

$$\begin{aligned} \chi_{//} = \beta g^2 & \left(r^2 \frac{2c'^2 T - 2cc'E^2 W \sqrt{2} + (Ec)^2 ED}{E v_1(0)} \right. \\ & + \frac{1}{E v_1(0) (v_1(0) - v_2(0))} \left\{ 2r^2 (cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1)^2 \right. \\ & \quad + 2r (cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1) (-c' (2P + v_1(0)) + cE^2 S_1 \sqrt{2}) \\ & \quad \left. \left. - c' (v_1(0) + v_2(0)) (cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P) \right\} \right) , \quad (\text{A20-106}) \end{aligned}$$

où nous avons posé :

$$r = \frac{G}{g} . \quad (\text{A20-107})$$

Annexe 21

**CHAINE REGULIERE (S,1) INFINIE, PRESENTANT
UN COUPLAGE Z-Z ET UNE ANISOTROPIE AXIALE
(LE LONG DE L'AXE OZ), SUR LE SPIN 1.**

**COMPORTEMENT A BASSE TEMPERATURE DE LA SUSCEPTIBILITE
ET DE L'AIMANTATION PARALLELES, DE LA LONGUEUR DE
CORRELATION ET DE LA SUSCEPTIBILITE PERPENDICULAIRE**

1- Etude de la susceptibilité parallèle

En procédant comme dans l'annexe 20, nous avons :

$$X_1 = \frac{2c'^2 T - 2cc'E^2 W \sqrt{2} + (Ec)^2 ED}{E v_1(0)}, \quad (\text{A21-1})$$

$$X_2 = \frac{(cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1)^2}{E v_1(0)}, \quad (\text{A21-2})$$

$$X_3 = \frac{(cE^2 V \sqrt{2} - 2c'R_1)(cE^2 S_1 \sqrt{2} - c'(2P + v_1(0)))}{E v_1(0)}, \quad (\text{A21-3})$$

$$X_4 = - \frac{c'(v_1(0) + v_2(0))(cE^2 S_1 \sqrt{2} - 2c'P)}{E v_1(0)}, \quad (\text{A21-4})$$

de sorte que la susceptibilité parallèle s'écrit :

$$\chi_{//} = \beta g^2 \left(r^2 X_1 + \frac{2r^2 X_2 + 2r X_3 + X_4}{v_1(0) - v_2(0)} \right), \quad (\text{A21-5})$$

où r représente le rapport G/g des moments magnétiques de la cellule élémentaire.

A basse température, l'argument des diverses fonctions $\mathcal{J}_k(x)$ (présentes dans les quantités P , v_2 , R_1 , T , S_1 , V et W) tend vers l'infini de sorte que nous pouvons utiliser leurs développements asymptotiques (A15-5) qui se déduisent simplement de ceux des fonctions de Bessel modifiées $I_k(x)$. Nous obtenons ainsi :

$$P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(2|a| - k)}{|2a|^{\nu + \frac{1}{2}}} \times \left(1 - \frac{4\nu^2 - 1}{1! 16|a|} + \frac{(4\nu^2 - 1)(4\nu^2 - 9)}{2! (16a)^2} + \dots \right), \quad (\text{A21-6})$$

$$R_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{J}{|J|} P \left(1 - \frac{2\nu + 1}{2|a|} - \frac{(4\nu^2 - 1)(4\nu^2 - 9)}{(16a)^2} + \dots \right), \quad (\text{A21-7})$$

$$T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} P \left(1 - \frac{2\nu + 1}{2|a|} + \frac{(2\nu + 3)^2 (2\nu + 1)^2 (2\nu - 7)}{2(\nu + 1) (16a)^2} + \dots \right), \quad (\text{A21-8})$$

$$S_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} W \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(|a|)}{|a|^{\nu + \frac{1}{2}}}, \quad (\text{A21-9})$$

$$V \underset{T \rightarrow 0}{\sim} - \frac{J}{|J|} S_1, \quad (\text{A21-10})$$

avec :

$$a = -\beta J, \quad k = \beta k_z. \quad (\text{A21-11})$$

Lorsque d vaut 1 ($\nu = -1/2$), les divers développements asymptotiques se réduisent au premier terme dans les expressions (A21-7 à 9). Dans ces

conditions, nous remplaçons la fonction $\mathcal{J}_k(x)$ par la fonction hyperbolique correspondante. Mais, quelle que soit la valeur de d , c'est le classement de k par rapport à $2|a|$ (k_z par rapport à $2|J|$) qui conditionne l'étude à basse température. Dans tout ce qui suit, nous allons limiter notre étude au cas des couplages antiferromagnétiques ($J > 0$, $a < 0$).

$k_z < 2J$ ($k < -2a$) : le terme d'échange (qui favorise l'orientation des moments quantiques suivant l'axe Oz) tend à l'emporter sur le terme d'anisotropie, quel que soit le signe de k_z

Les quantités P , Q , R_1 et T (données par (A21-6 à 8)) divergent plus rapidement que les quantités S_1 , V et W (données par (A21-9 et 10)). Dans ces conditions, nous avons à basse température, d'après les relations (A20-30 à 37) :

$$v_1(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} v_2(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\Delta} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2P, \quad v_1(0) - v_2(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2E, \quad (\text{A21-12})$$

$$c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{S_1}{P\sqrt{2E}}, \quad c' \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\sqrt{E}, \quad (\text{A21-13})$$

où E est donné par (A20-9). Lorsque d vaut 1 ($\nu = -1/2$), les fonctions $\mathcal{J}_k(x)$ ($k = -1/2, 1/2, 3/2$) s'expriment simplement au moyen des fonctions hyperboliques. Tous calculs effectués, nous avons :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{\beta g^2}{2} \left((r-1)^2 \exp(2|a|) + r^2 \left(-1 + \frac{2}{E} \right) - \frac{3r}{E} + 1 + \frac{1}{E} \right. \\ \left. + \exp(-2|a|) \left(r^2 \left(1 - \frac{16}{E} + \frac{4}{E^2} \right) + 2r \left(1 + \frac{6}{E} - \frac{2}{E^2} \right) + 1 + \frac{8}{E} \right) \right). \quad (\text{A21-14})$$

Lorsque d est supérieur à 1, nous avons :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2\beta g^2 \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(2|a|)}{|2a|^{\nu+\frac{1}{2}}} \left(r \left(1 - \frac{2\nu+1}{4|a|} + \dots \right) - 1 \right)^2. \quad (\text{A21-15})$$

$r \neq 1$: les moments d'une même cellule n'ont pas la même amplitude

Quel que soit d , le comportement dominant (de la susceptibilité parallèle) est donné par :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{Ag^2}{J\sqrt{2\pi}} (r-1)^2 \frac{\exp(2\beta J)}{(2\beta J)^{\frac{d-3}{2}}}. \quad (\text{A21-16})$$

La susceptibilité diverge en $\exp(2\beta J)/(2\beta J)^{(d-3)/2}$.

$r=1$: les moments ont la même amplitude

Le premier terme des développements (A21-14 et 15) s'annule et l'expression du terme dominant dépend de la valeur de la dimension d :

$d=1$:

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta g^2 \exp(-2\beta J) (1 + 2 \exp(\beta k_z)), \quad d=1. \quad (\text{A21-17})$$

La susceptibilité parallèle tend vers 0 au zéro absolu.

$d>1$:

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{Ag^2 (d-1)^2 \exp(2\beta J)}{4J\sqrt{2\pi} (2\beta J)^{\frac{d+1}{2}}}, \quad d>1. \quad (\text{A21-18})$$

La susceptibilité parallèle diverge au zéro absolu comme $\exp(2\beta J)/(2\beta J)^{(d+1)/2}$.

$k_z=2J$ ($k=-2a$) : le terme d'échange (qui favorise l'orientation des moments quantiques suivant la direction de l'axe Oz) équilibre le terme d'anisotropie (qui favorise l'orientation de ces moments dans le plan xOy)

La dimensionalité de l'espace accessible au spin classique joue ici un rôle quelle que soit la valeur de r :

$d=1$:

Nous avons :

$$2P = 2T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2Q \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{1}{2}, \quad 2R_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -2P, \quad (\text{A21-19})$$

$$\sqrt{ES_1} = \sqrt{EW} \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{1}{2}, \quad \sqrt{EV} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\sqrt{ES_1}, \quad (\text{A21-20})$$

$$v_1(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\Delta} \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{3}{2}, \quad v_1(0) - v_2(0) \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 1, \quad (\text{A21-21})$$

$$c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{E} \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad c' \underset{T \rightarrow 0}{\sim} -\sqrt{\frac{E}{3}}. \quad (\text{A21-22})$$

Tous calculs effectués, la susceptibilité parallèle, à basse température, se met sous la forme suivante :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta g^2 \left(2r(r-1) + \frac{2}{3} \right), \quad d=1. \quad (\text{A21-23})$$

Le produit $\chi_{//}T$ tend vers une limite finie dont la valeur dépend de r .

$d>1$:

Nous avons :

$$2P \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2Q \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2R_1 \underset{T \rightarrow 0}{\sim} 2T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 0, \quad (\text{A21-24})$$

$$\sqrt{ES_1} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{EV} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{EW} \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 0, \quad (\text{A21-25})$$

$$v_1(0) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\Delta} \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 1, \quad v_1(0) - v_2(0) = 2E, \quad (\text{A21-26})$$

$$c \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{E}, \quad c' \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 0. \quad (\text{A21-27})$$

Dans ces conditions, la susceptibilité parallèle, à basse température, se met sous la forme :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta g^2 \frac{r^2}{d}, \quad d > 1. \quad (\text{A21-28})$$

Le produit $\chi_{//} T$ tend vers une constante (dépendant de d).

$2J < k_z$ ($-2a < k$): l'anisotropie (qui favorise l'orientation des moments quantiques dans le plan xOy) tend à l'emporter sur le terme d'échange (qui favorise leur orientation suivant la direction de l'axe Oz)

Les relations (A21-24 à 26) sont maintenant valables, quelle que soit la valeur de d ; la susceptibilité parallèle, à basse température, se met sous la forme unique :

$$\chi_{//} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \beta g^2 \frac{r^2}{d}. \quad (\text{A21-29})$$

L'ensemble de ces comportements est illustré par les courbes des figures A21-1 à 4.

2- Expression de l'aimantation parallèle

La fonction de partition rapportée à une cellule est donnée par la valeur propre dominante $v_1(B)$ de la matrice (\mathcal{T}) qui, en champ non nul, est solution d'une équation du troisième degré (solution de Cardan). Pour alléger cette étude, nous ne donnerons pas son expression, d'autant que, sur le plan numérique, nous l'avons obtenue par un programme de diagonalisation. L'aimantation est donnée par :

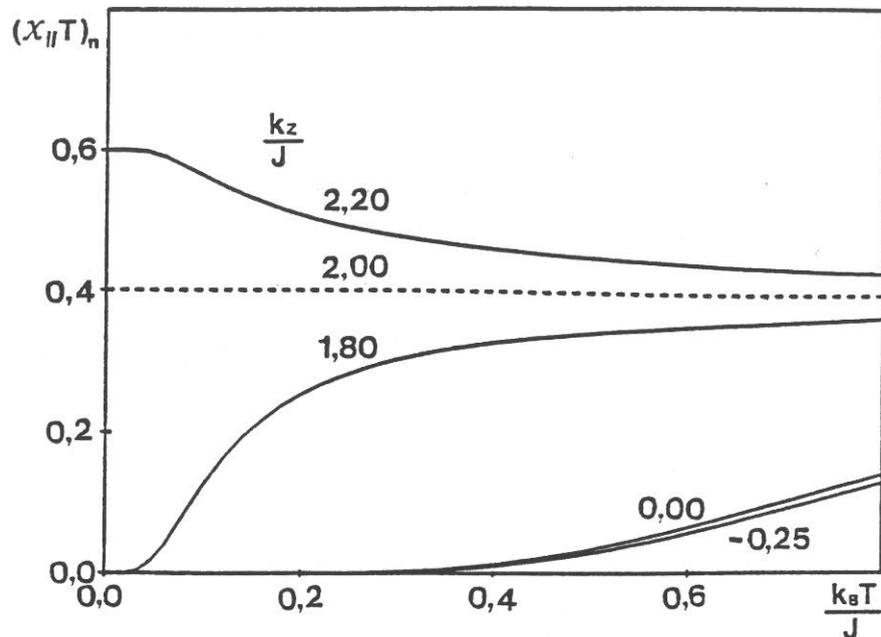


Fig.A21-1 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin1, pour diverses valeurs de k_z et à la compensation ($J > 0$, $g=1$, $d=1$, $r=1$).

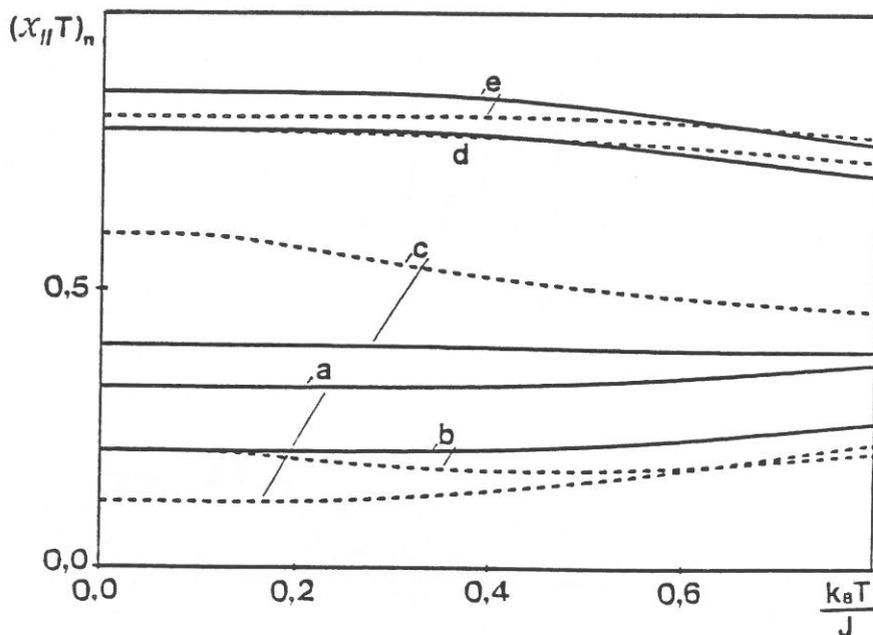


Fig.A21-2 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin1, pour diverses valeurs de k_z et de r ($J > 0$, $g=1$, $d=1$; a : $r=0,300$; b : $r=0,423$; c : $r=1,000$; d : $r=1,577$; e : $r=1,700$; tireté : $k_z=2,0$; trait plein : $k_z=2,5$).

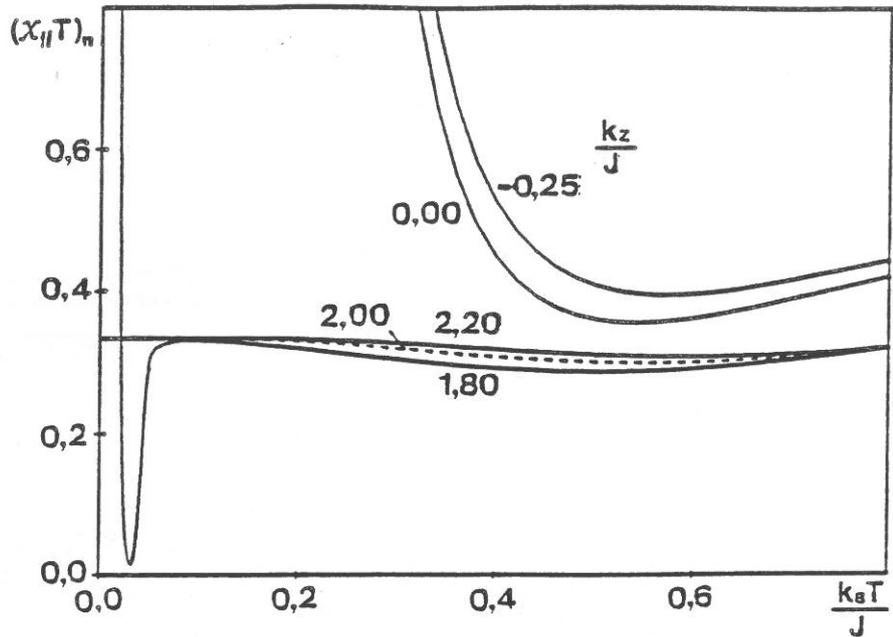


Fig.A21-3 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, pour diverses valeurs de k_z et à la compensation ($J > 0$, $g=1$, $d=3$, $r=1$).

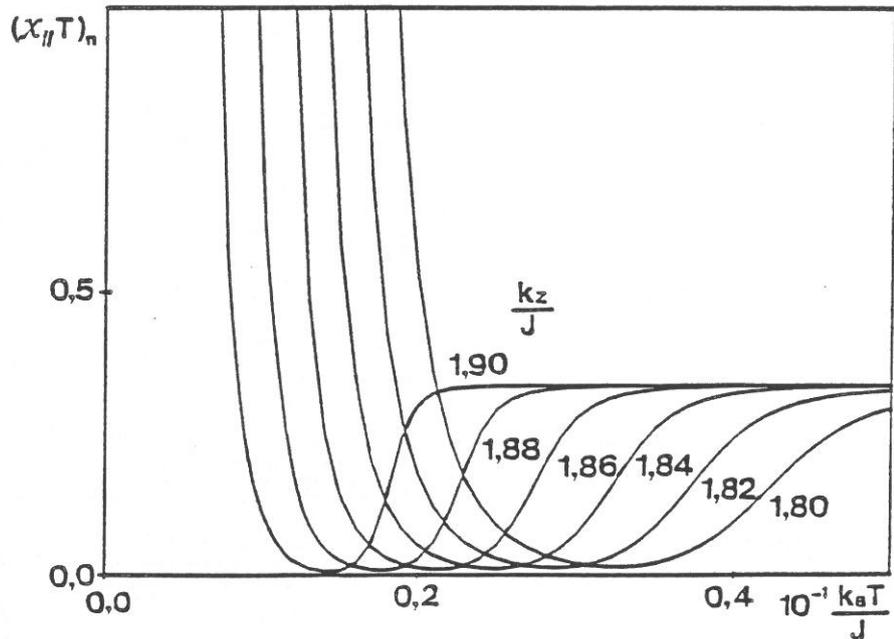


Fig.A21-4 : Variation thermique du produit $(\chi_{||}T)_n$ d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, pour diverses valeurs de k_z et au voisinage de la compensation ($J > 0$, $g=1$, $d=3$, $r=1$).

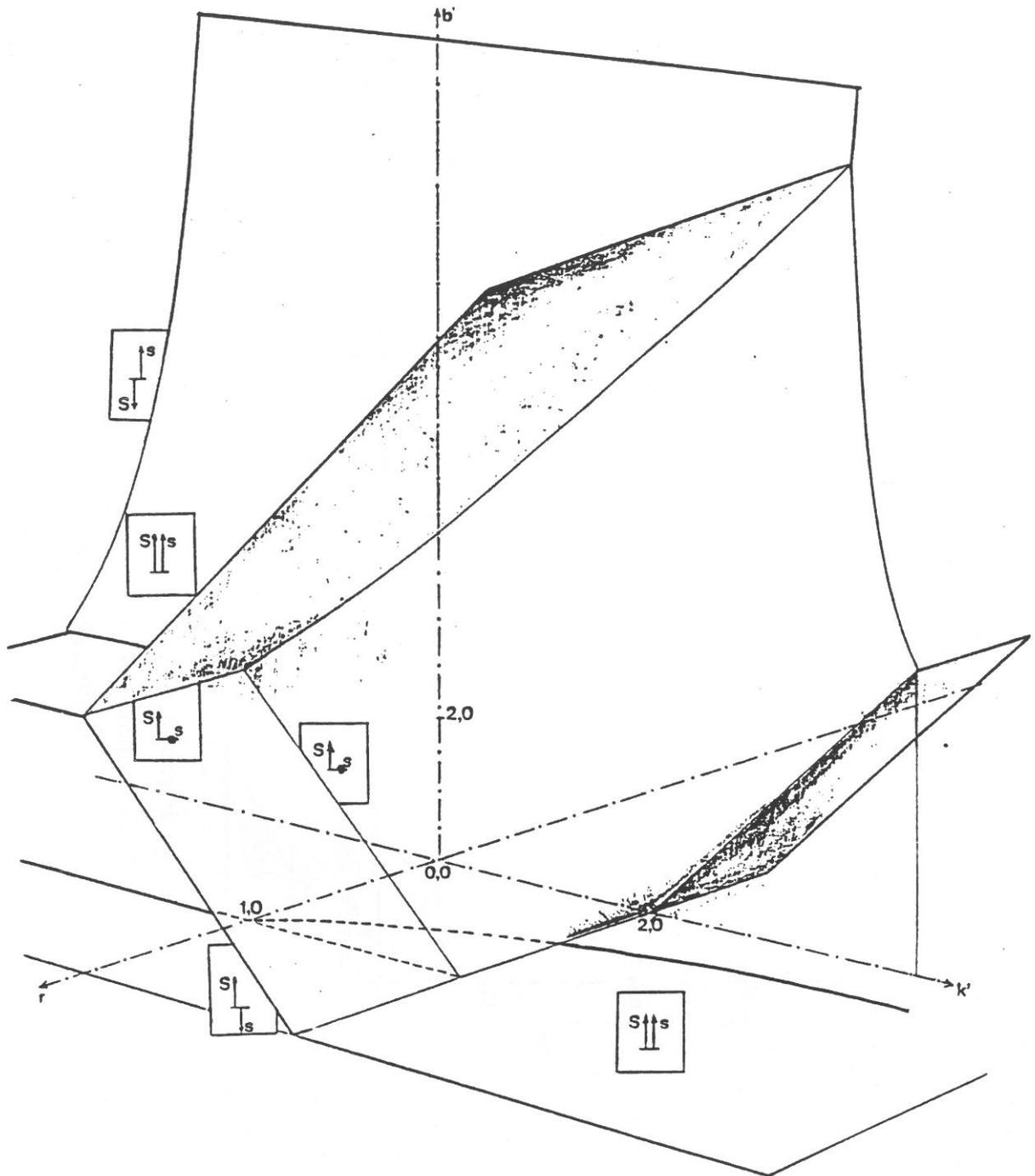


Fig.A21-6 : Diagramme de phase à $T=0$ K des états d'une chaîne $(S,1)$ présentant un couplage $z-z$ et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, en fonction de r , k' et b' .

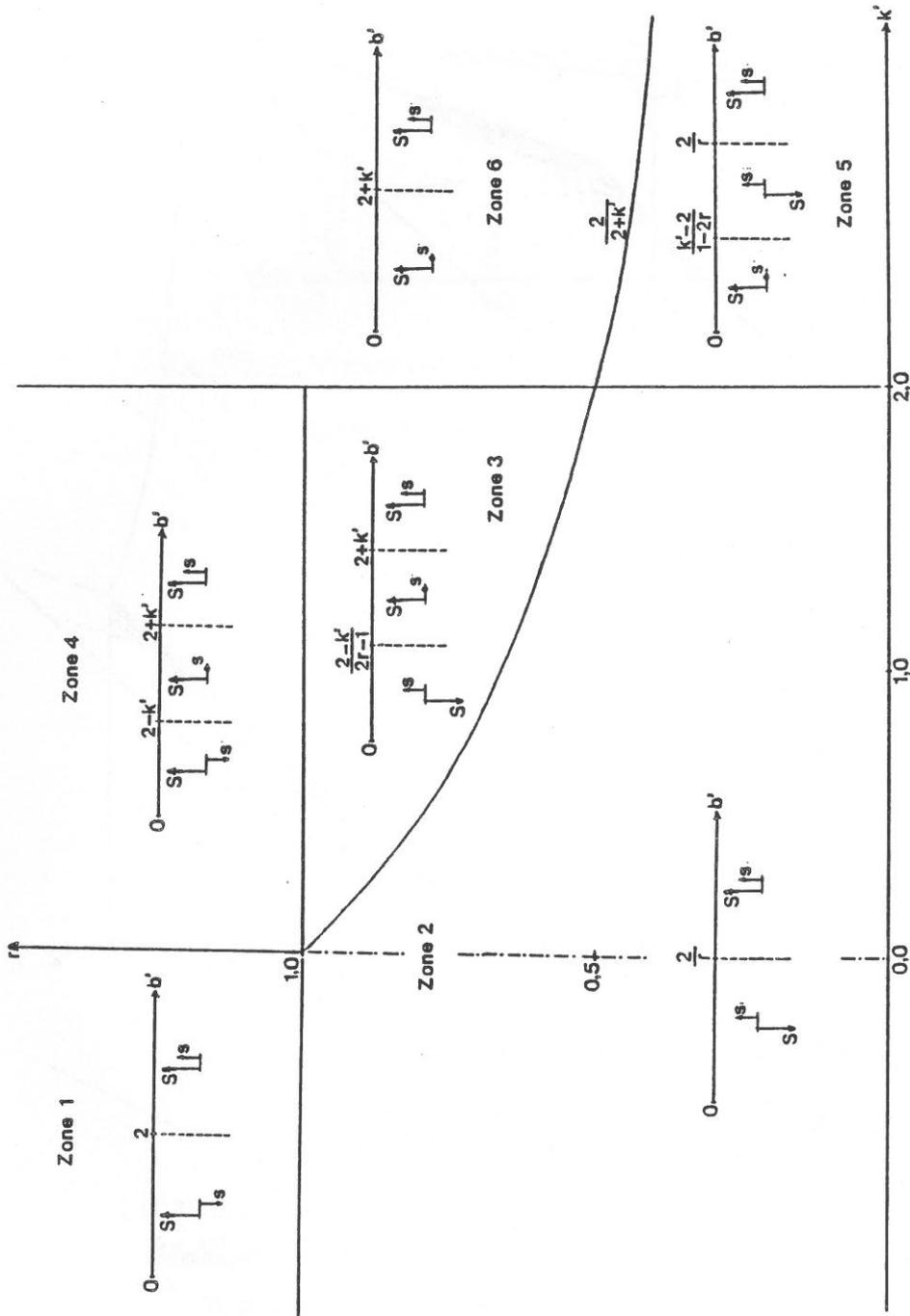


Fig.A21-5: Diagramme de phase à $T=0$ K des états d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, en fonction de r et k' .

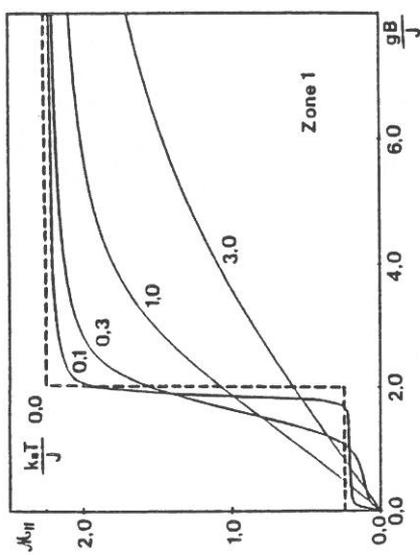


Fig.A21-7: Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, en fonction du champ réduit gB/J et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0, g=1, d=3$; zone 1 : $k_z=0,50, r=1,25$).

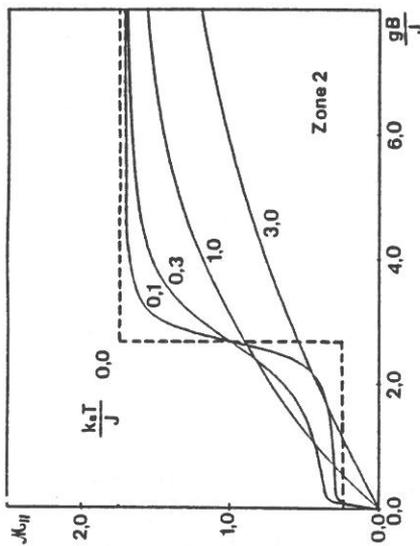


Fig.A21-8: Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, en fonction du champ réduit gB/J et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0, g=1, d=3$; zone 2 : $k_z=0,50, r=0,75$).

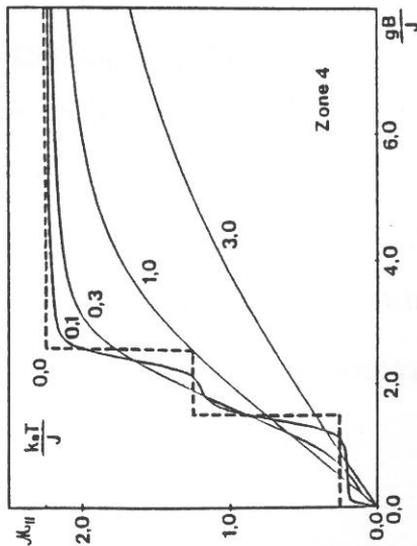


Fig.A21-10: Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, en fonction du champ réduit gB/J et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0, g=1, d=3$; zone 4 : $k_z=0,50, r=1,25$).

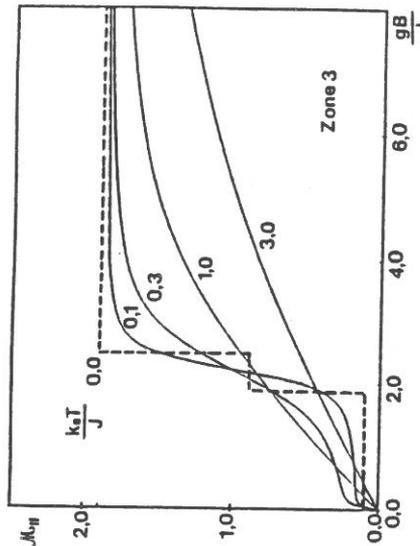


Fig.A21-9: Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, en fonction du champ réduit gB/J et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0, g=1, d=3$; zone 3 : $k_z=0,50, r=0,90$).

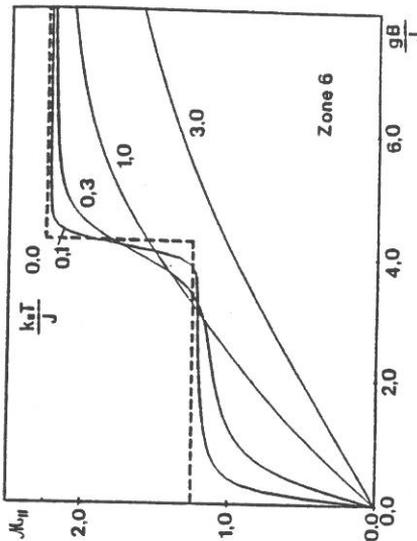


Fig.A21-12: Variation de l'aimantation parallèle d'une chaîne (S,1) présentant un couplage z-z et une anisotropie uniaxiale (le long de Oz) sur le spin 1, en fonction du champ réduit gB/J et pour diverses valeurs du rapport $k_B T/J$ ($J > 0, g=1, d=3$; zone 6 : $k_z=2,25, r=1,25$).

$$\mathcal{M}_{//} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \text{Ln}(v_1(B))}{\partial B} . \quad (\text{A21-30})$$

Le calcul de cette expression ne pose pas non plus de difficultés. Pour étudier le comportement de l'aimantation parallèle à basse température, nous sommes conduits à rechercher (comme dans l'annexe 19) le minimum de l'énergie $\mathcal{E}_{\theta, \sigma}$ rapportée à une cellule :

$$\mathcal{E}_{\theta, \sigma} = 2J\sigma \cos\theta + k_z \sigma^2 - (\sigma + r \cos\theta) gB , \quad \sigma = 0, \pm 1 , \quad (\text{A21-31})$$

en fonction de l'angle θ que fait le spin S avec l'axe Oz . En définissant les quantités réduites :

$$k' = \frac{k_z}{J} , \quad b' = \frac{gB}{J} , \quad (\text{A21-32})$$

la recherche du minimum de cette énergie réduite conduit à considérer, au zéro absolu, les racines :

$$\cos\theta = \pm 1 . \quad (\text{A21-33})$$

Le résultat de cette étude est résumé sur la figure A21-5. La figure A21-6 représente le diagramme des états du système, au zéro absolu, en fonction des paramètres k' , r et b' . Les figures A21-7 à 12 représentent, pour les diverses zones et à diverses températures réduites, les variations de l'aimantation.

3- Etude de la longueur de corrélation

La matrice (\mathcal{T}) n'étant plus symétrique en présence d'anisotropie sur le spin quantique, il n'est pas possible d'obtenir la longueur de corrélation en utilisant la méthode employée dans l'annexe 1. En revanche, la définition (I-50) demeure valable. Lorsque k_z est inférieur à $2J$, à basse température, nous avons :

$$\xi \underset{\tau \rightarrow 0}{\sim} \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(2\beta J)}{(2\beta J)^{\frac{d-1}{2}}} . \quad (\text{A21-34})$$

Lorsque k_z est supérieur ou égal à $2J$, la longueur de corrélation tend vers 0 au zéro absolu.

Annexe 22

CHAÎNE ($s', 1/2$) DE TYPE A, PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z.

ETUDE DE LA SUSCEPTIBILITE PARALLELE

Nous définissons le vecteur Z_N relatif à une chaîne de N cellules élémentaires, dont la composante d'indice courant quadruple (μ_{2i-1}, μ_{2i}) , (μ_{2i-2}, μ_{2i-3}) représente la contribution à la fonction de partition de tous les états tels que les spins s_{2i-1} , s_{2i} , s_{2i-2} et s_{2i-3} aient pour composante z les valeurs μ_{2i-1} , μ_{2i} , μ_{2i-2} et μ_{2i-3} . En suivant le procédé présenté en détail à propos de la chaîne simple (cf annexe 9), nous montrons immédiatement que l'élément courant de la matrice de transfert (\mathcal{T}) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{T})_{(\mu_{2i-1}, \mu_{2i}), (\mu_{2i-2}, \mu_{2i-3})} &= \exp(\beta g B (\mu_{2i-1} + \mu_{2i})) \times \\
 &\times \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\beta}{2} (2s+1) [J_1 (\mu_{2i-2} + \mu_{2i}) + J_2 \mu_{2i-1} - GB]\right)}{\operatorname{sh}\left(\frac{\beta}{2} [J_1 (\mu_{2i-2} + \mu_{2i}) + J_2 \mu_{2i-1} - GB]\right)} \times \\
 &\times \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\beta}{2} (2s+1) [J_1 (\mu_{2i-1} + \mu_{2i-3}) + J_2 \mu_{2i-2} - GB]\right)}{\operatorname{sh}\left(\frac{\beta}{2} [J_1 (\mu_{2i-1} + \mu_{2i-3}) + J_2 \mu_{2i-2} - GB]\right)}. \quad (\text{A22-1})
 \end{aligned}$$

Nous sommes conduits à chercher l'expression des valeurs propres, et plus particulièrement celle de la valeur propre de plus grand module

pour la matrice (\mathcal{T}). L'examen des propriétés de symétrie de cette matrice par rapport au changement de B en - B montre qu'une transformation unitaire de matrice :

$$(\mathcal{U}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A22-2})$$

permet de la mettre sous la forme :

$$(\tilde{\mathcal{T}}) = \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{C} & \mathcal{D} \end{pmatrix} \quad (\text{A22-3})$$

où \mathcal{A} et \mathcal{D} sont des matrices 2x2 paires en B, et \mathcal{B} et \mathcal{C} des matrices de même taille impaires en B. Ainsi, en l'absence de champ, la recherche des valeurs propres se ramène à la résolution de deux équations du deuxième degré. Soit $x_1(0)$ la valeur propre de plus grand module ainsi déterminée. Il est toujours possible de développer jusqu'au second ordre en B les coefficients des sous-matrices \mathcal{A} et \mathcal{D} . En ne retenant, d'autre part, que le premier terme (linéaire en B) des coefficients des sous-matrices \mathcal{C} et \mathcal{D} , nous pouvons obtenir une expression valable, au deuxième ordre en B, du polynôme caractéristique :

$$P(x, B) = x^4 + \left(a + \frac{a''}{2} B^2 \right) x^3 + \left(b + \frac{b''}{2} B^2 \right) x^2 + \left(c + \frac{c''}{2} B^2 \right) x + d + \frac{d''}{2} B^2 \quad (\text{A22-4})$$

Malgré la présence de termes linéaires en B dans les coefficients de la matrice ($\tilde{\mathcal{T}}$), le polynôme caractéristique est en définitive pair par rapport à B ; en effet, les propriétés de la chaîne ne sont pas modifiées si on change le sens d'application du champ. La susceptibilité magnétique est directement liée à la dérivée seconde de la fonction de partition par rapport au champ ; en champ nul :

$$\chi_{//} = \frac{1}{\beta x_1(0)} \left(\frac{d^2 x_1}{dB^2} \right)_{B=0} . \quad (\text{A22-5})$$

En écrivant que la différentielle de $P(x,B)$ est nulle, nous obtenons immédiatement :

$$\left(\frac{d^2 x_1}{dB^2} \right)_{B=0} = - \frac{a'' x_1^3(0) + b'' x_1^2(0) + c'' x_1(0) + d''}{4x_1^3(0) + 3a x_1^2(0) + 2b x_1(0) + c} . \quad (\text{A22-6})$$

L'écriture détaillée de cette dérivée seconde en fonction de la température et des paramètres physiques de base ne présente pas de difficultés de principe, mais conduit à une expression extrêmement complexe, que nous ne reproduirons pas ici. C'est néanmoins sur cette expression et sur les diagrammes de la figure III-75 (qui précise l'état de la chaîne au zéro absolu en fonction des signes des deux interactions d'échange) que se fonde la discussion qui suit.

Lorsque les interactions J_1 et J_2 sont toutes deux négatives, les moments ont tendance à tous s'orienter dans le même sens à basse température et la susceptibilité parallèle diverge à l'approche du zéro absolu :

$$\chi_{//T} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} (1+r)^2 \exp(-2\beta J_1 s') . \quad (\text{A22-7})$$

Lorsque les interactions J_1 et J_2 sont toutes deux positives, les moments portés par les spins s' ont tendance à s'orienter en sens inverse des moments portés par les spins $1/2$; dans ces conditions, la chaîne présente un moment magnétique total non nul au zéro absolu à moins que le rapport r soit égal à l'unité. Si r est différent de l'unité, la susceptibilité diverge exponentiellement à l'approche du zéro absolu :

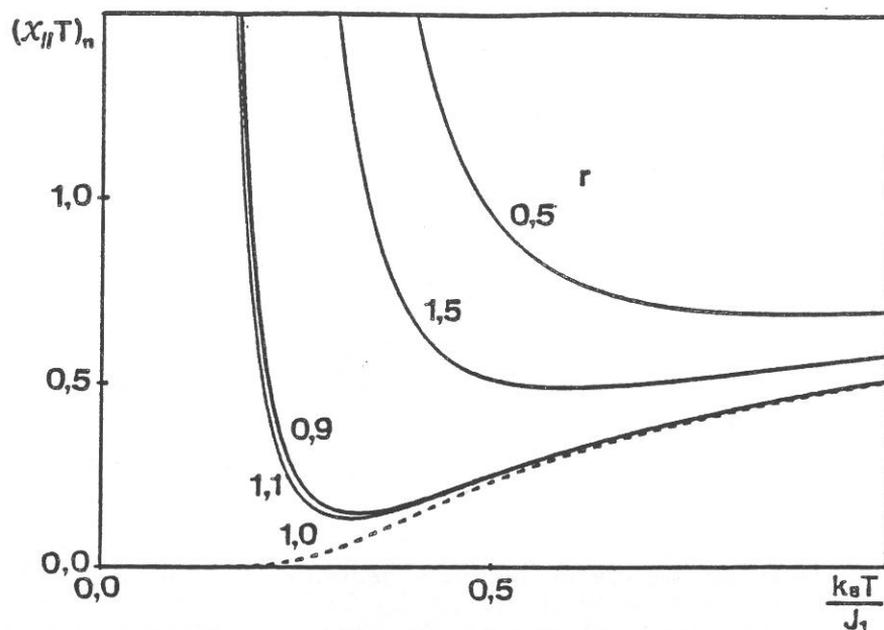


Fig.A22-1 : Variation thermique du produit $(x_{II}/T)_n$ d'une chaîne de type A (1/2,1/2) pour diverses valeurs de r ($J_1 > 0, J_1 = J_2$).

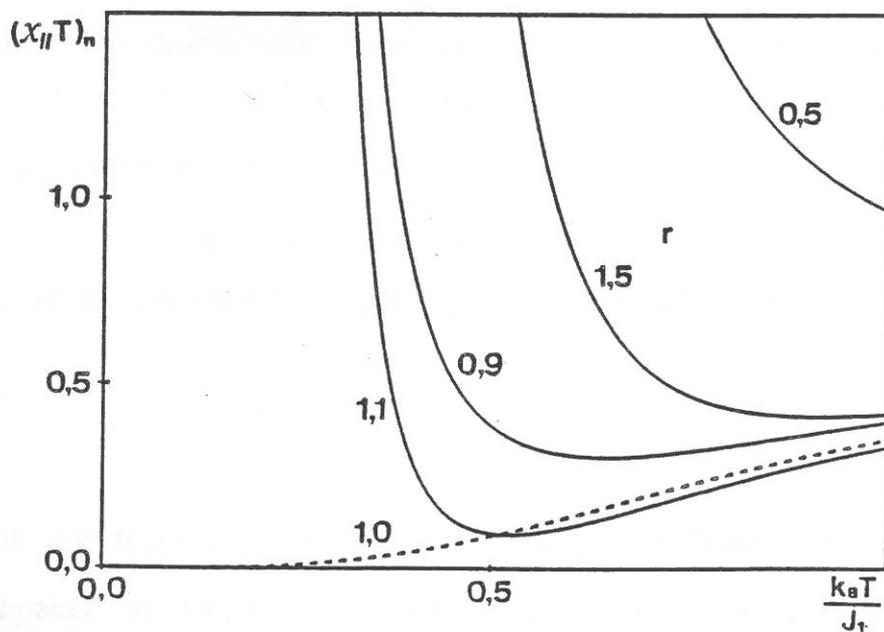


Fig.A22-2 : Variation thermique du produit $(x_{II}/T)_n$ d'une chaîne de type A (1,1/2) pour diverses valeurs de r ($J_1 > 0, J_1 = J_2$).

$$\chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} (1-r)^2 \exp(2\beta J_1 s') . \quad (\text{A22-8})$$

Les figures A22-1 et 2 illustrent ce comportement pour $J_1=J_2=1K$ dans le cas des chaînes $(1/2,1/2)$ et $(1,1/2)$.

Lorsque r est égal à l'unité, ce terme dominant présent dans (A22-8) disparaît et le nouveau terme dominant devient :

$$\chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{2}{s^2} \exp\left(2\beta \left[J_1(s'-1) - \frac{J_2}{2} \right] \right) . \quad (\text{A22-9})$$

Nous devons encore distinguer les cas suivants :

$s' \leq 1$:

$$\chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 0 , \quad r = 1 . \quad (\text{A22-10})$$

(voir les courbes relatives à $r=1$ sur les figures A22-1 et 2).

$s' > 1$: le comportement dépend du rapport J_2/J_1

$$\frac{J_2}{J_1} < 2(s'-1) \quad \chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} +\infty , \quad r = 1 , \quad (\text{A22-11})$$

$$\frac{J_2}{J_1} = 2(s'-1) \quad \chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{2}{s'^2} , \quad r = 1 , \quad (\text{A22-12})$$

$$\frac{J_2}{J_1} > 2(s'-1) \quad \chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 0 , \quad r = 1 . \quad (\text{A22-13})$$

Ces trois types de comportement sont illustrés par les courbes des figures A22-3 à 6, tracées pour $s'=1/2, 1, 3/2$ et 2 (dans ces deux derniers cas, la valeur critique du rapport J_2/J_1 vaut respectivement 1 et 2).

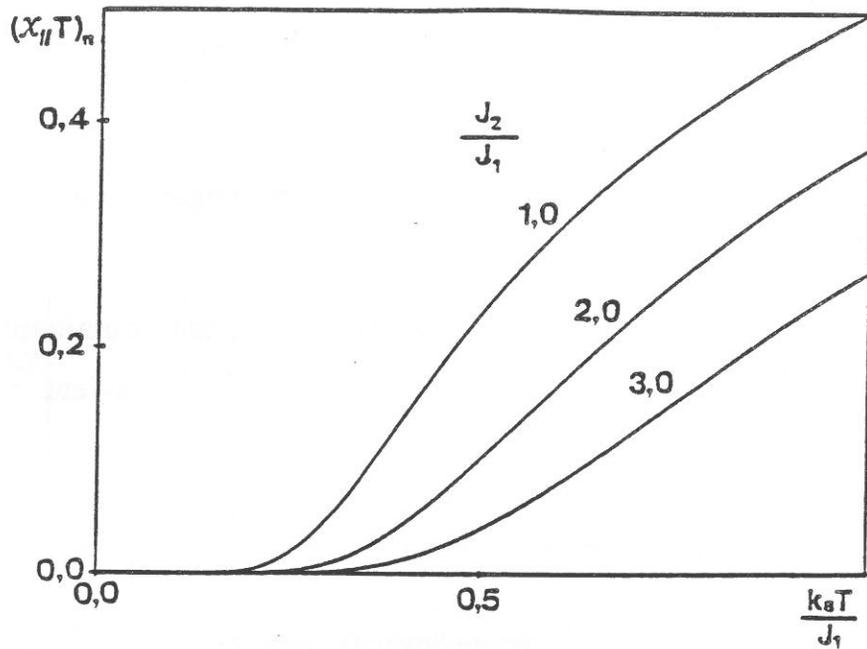


Fig.A22-3 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne de type A (1/2,1/2) pour diverses valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

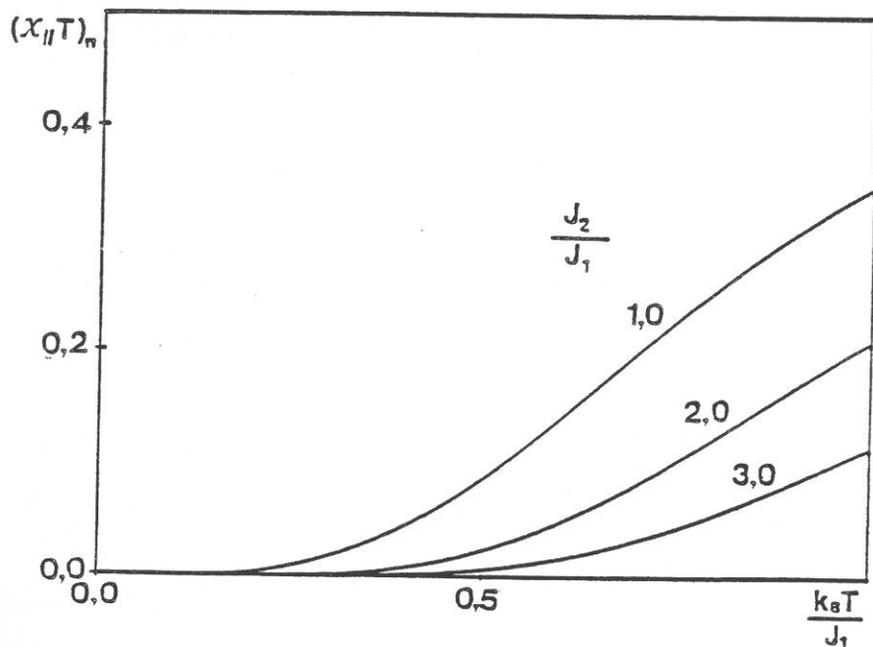


Fig.A22-4 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne de type A (1,1/2) pour diverses valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

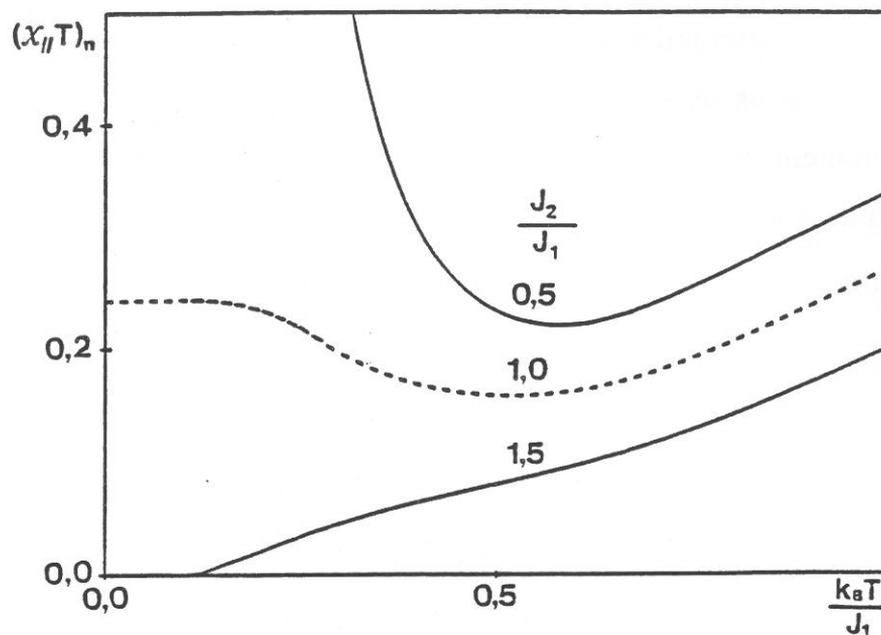


Fig.A22-5 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (3/2,1/2) pour diverses valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

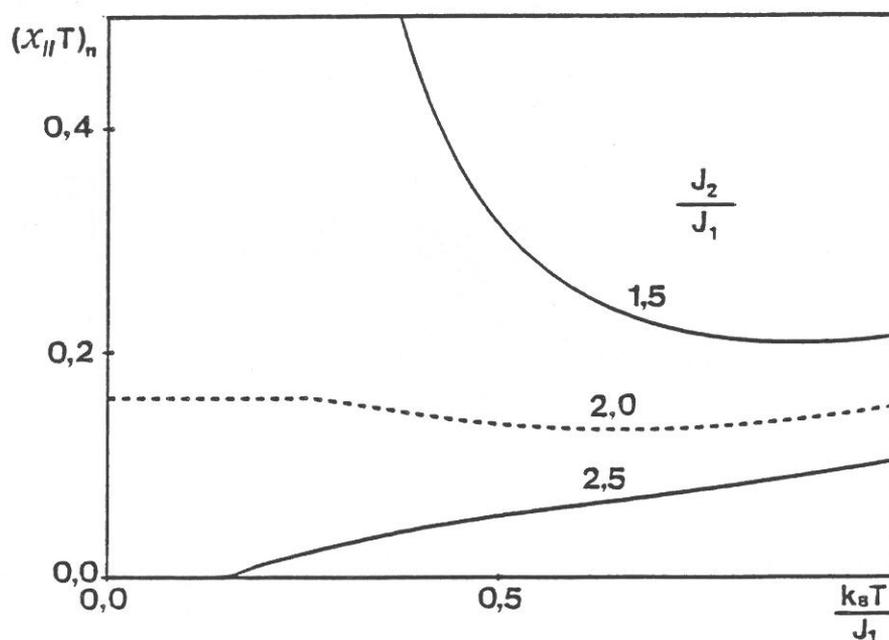


Fig.A22-6 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (2,1/2) pour diverses valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

Lorsque les interactions sont de signes opposés, le sous-réseau des spins $1/2$ et le sous-réseau des spins s' sont séparément antiferromagnétiques. Le moment total de la chaîne dans son état fondamental est donc nul quelle que soit la valeur de r . Il n'a pas été possible d'obtenir, de façon littérale, une expression à basse température du produit $\chi_{//}T$ en raison de la complexité des expressions des coefficients du polynôme caractéristique. Cependant, une étude numérique a pu être réalisée. L'étude détaillée de l'expression (A22-6) montre que le produit $\chi_{//}T$ décroît exponentiellement vers 0 avec la température selon une loi liée de façon prépondérante au module de l'interaction J_1 et au carré du moment magnétique associé à une paire. Ce terme disparaît lui-même lorsque les moments portés par les deux types de spin sont égaux. Dans ce cas, la décroissance est encore accentuée à l'approche du zéro absolu. Ces comportements sont illustrés par les courbes des figures A22-7 et 8 ($r \neq 1$) et A22-9 à 13 ($r=1$).

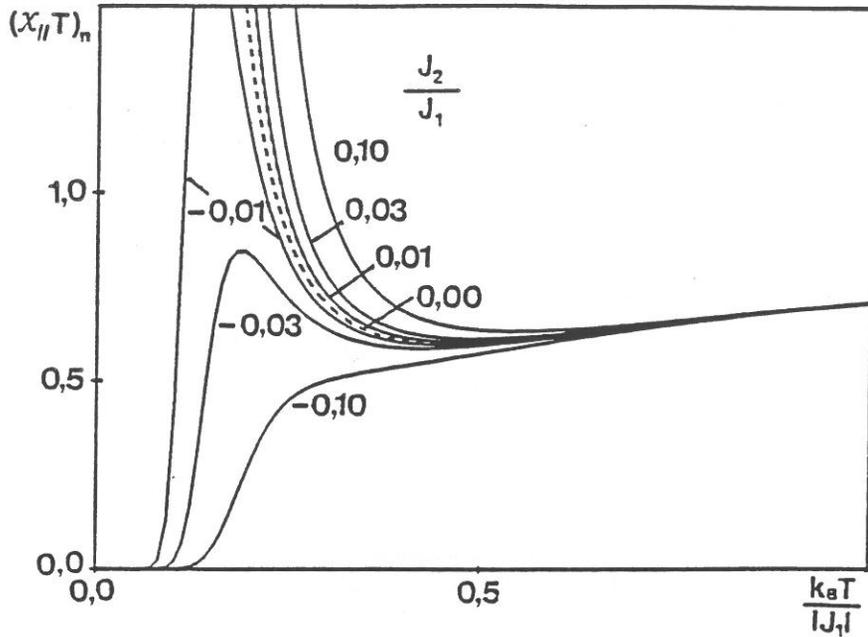


Fig.A22-7 : Variation thermique du produit $(X_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (1/2,1/2) pour de faibles valeurs du rapport J_2/J_1 ($J_1 > 0$, $r=2$).

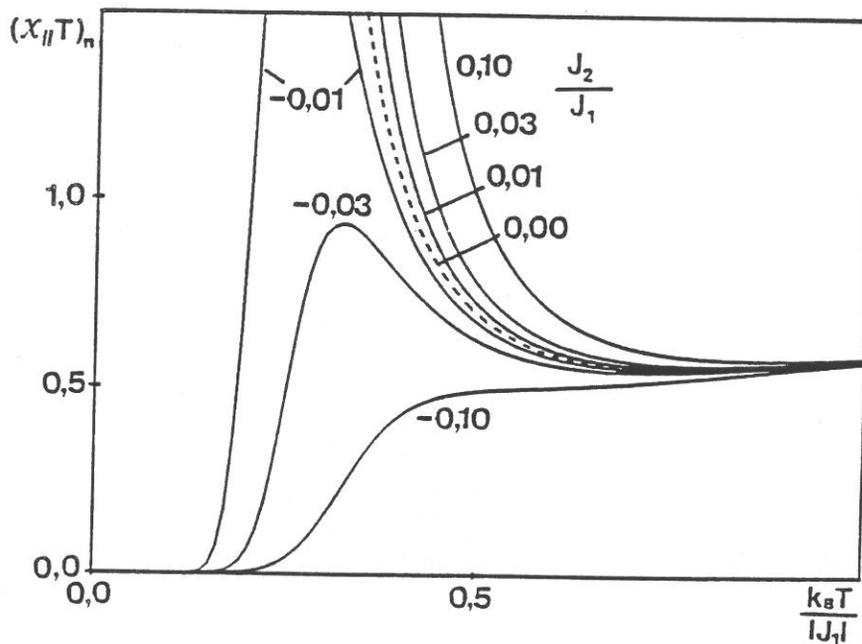


Fig.A22-8 : Variation thermique du produit $(X_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (1,1/2) pour de faibles valeurs du rapport J_2/J_1 ($J_1 > 0$, $r=2$).

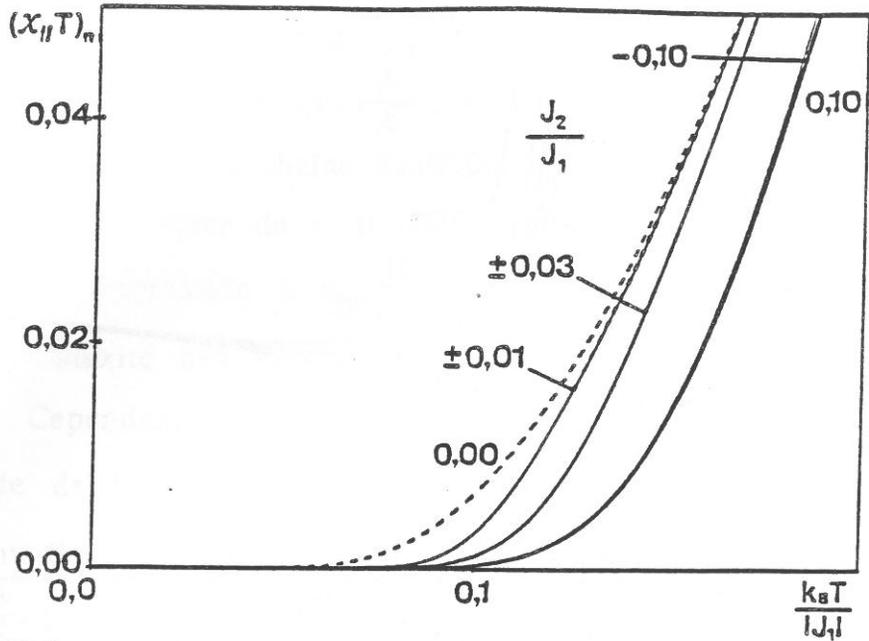


Fig.A22-9 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (1/2,1/2) pour de faibles valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

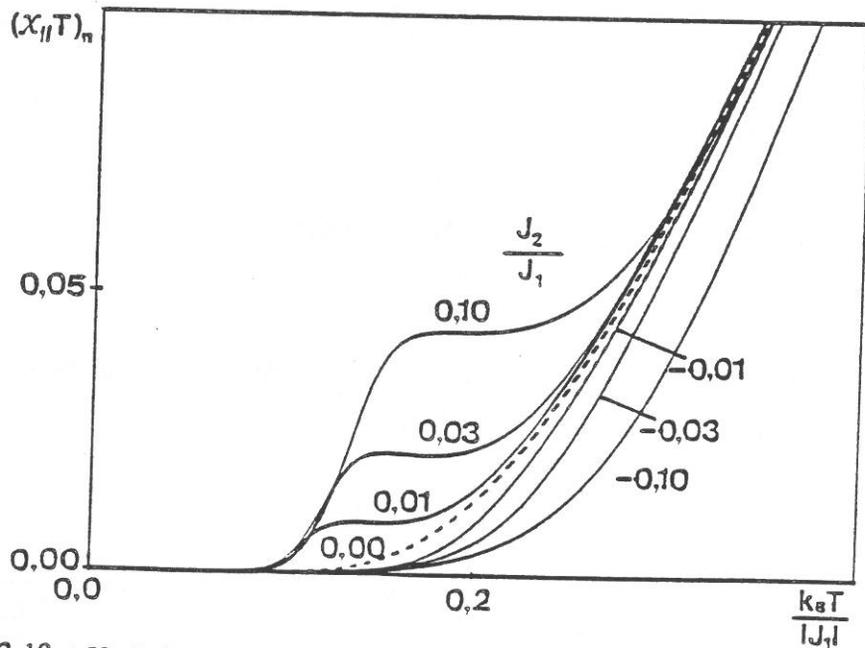


Fig.A22-10 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (1,1/2) pour de faibles valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

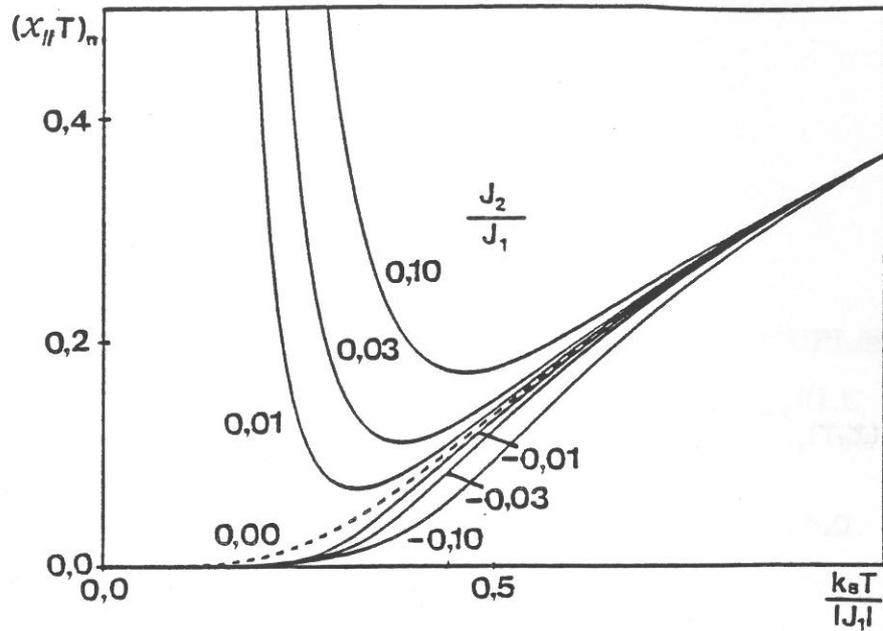


Fig.A22-11 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (3/2,1/2) pour de faibles valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

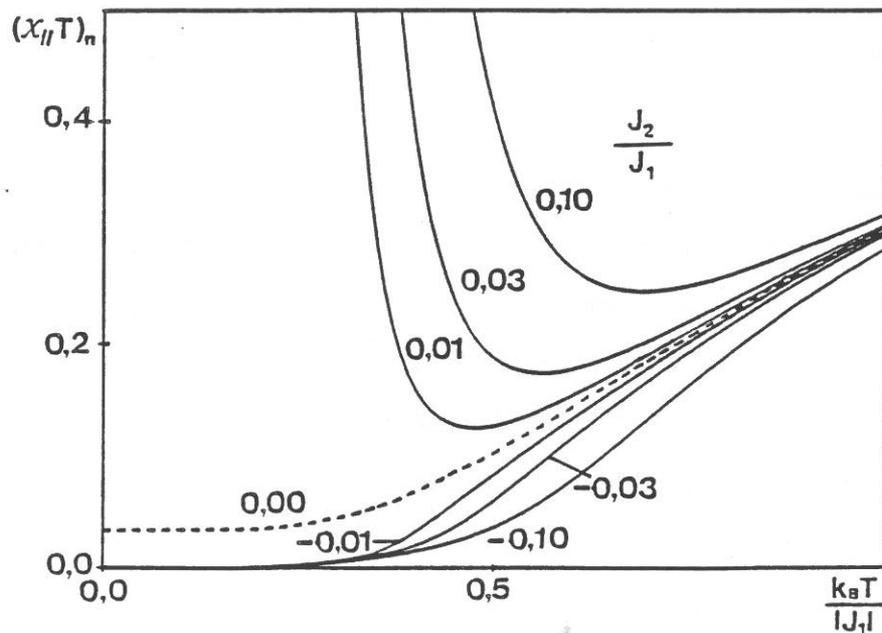


Fig.A22-12 : Variation thermique du produit $(x_{II}T)_n$ d'une chaîne de type A (2,1/2) pour de faibles valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

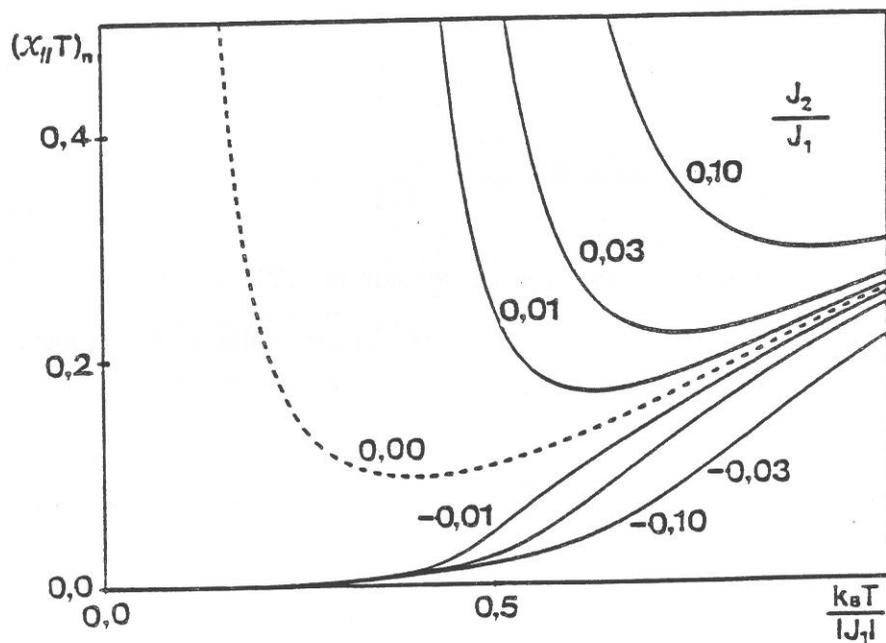


Fig.A22-13 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne de type A (5/2,1/2) pour de faibles valeurs du rapport J_2/J_1 , à la compensation ($J_1 > 0$, $r=1$).

Annexe 23

**CHAINE (1/2,1/2) DE TYPE B PRESENTANT UN COUPLAGE Z-Z.
ETUDE DE LA SUSCEPTIBILITE PARALLELE**

Nous procédons comme dans l'annexe 22. Compte tenu de la définition de la cellule courante i (voir fig.III-79), nous définissons le vecteur Z_N , relatif à une chaîne de N cellules élémentaires, dont la composante courante d'indice double (μ_i, μ'_i) représente la contribution à la fonction de partition de tous les états tels que les spins s_i et s'_i aient pour composantes z les valeurs μ_i et μ'_i . L'élément courant de la matrice de transfert (\mathcal{T}) s'écrit ici :

$$(\mathcal{T})_{\mu_i \mu'_i} = \exp \left(-\beta \left\{ J_1 (\mu_i \mu_{i+1} + \mu'_i \mu'_{i+1}) + J_2 \mu'_i (\mu_i + \mu_{i+1}) - \frac{g}{2} (\mu_i + \mu'_i) B \right\} \right), \quad (\text{A23-1})$$

(le facteur de Landé g sera désormais pris égal à 2). Nous sommes conduits à chercher l'expression des valeurs propres, et plus particulièrement celle de la valeur propre de plus grand module de la matrice (\mathcal{T}). En utilisant la même transformation unitaire (dont la matrice est donnée par (A22-2)), nous pouvons de même mettre la matrice (\mathcal{T}) sous la forme définie par (A22-3). La recherche des valeurs propres en champ faible conduit à un polynôme caractéristique (voir A22-4) dont les coefficients prennent ici une forme simple. En posant

$$u = \exp\left(-\frac{\beta}{2} J_1\right), \quad v = \exp\left(-\frac{\beta}{2} J_2\right), \quad (\text{A23-2})$$

ces coefficients s'écrivent :

$$a'' = -2\beta^2 uv, \quad b'' = 4\beta^2 (u^2 - 1), \quad (\text{A23-3})$$

$$c'' = -2\beta^2 uv^{-1} (u^2 + u^{-2} - 2), \quad d'' = 0, \quad (\text{A23-4})$$

$$a = -2u (v + v^{-1}), \quad b = 4(u^2 - 1) + u^2 (v^2 + v^{-2}) - 2u^{-2}, \quad (\text{A23-5})$$

$$c = -2u (u^2 + u^{-2} - 2)(v + v^{-1}), \quad d = (u^2 + u^{-2} - 2)^2. \quad (\text{A23-6})$$

En remarquant que le coefficient d'' est nul, la susceptibilité parallèle s'écrit (cf. A22-5 et 6) :

$$\chi_{//} = -\frac{1}{\beta} \frac{a'' x_1^2(0) + b'' x_1(0) + c''}{4x_1^3(0) + 3a x_1^2(0) + 2b x_1(0) + c}, \quad (\text{A23-7})$$

où $x_1(0)$, la valeur propre de plus grand module exprimée en champ nul, s'écrit :

$$x_1(0) = \frac{1}{2} \left(u (v + v^{-1}) + 2u^{-1} + \sqrt{u(v + v^{-1} + 2)(u(v + v^{-1} - 2) + 4u^{-1})} \right). \quad (\text{A23-8})$$

L'étude du comportement de la susceptibilité parallèle à basse température est basée sur la nature des signes des interactions J_1 et J_2 ainsi que sur le classement du rapport $|J_2|/|J_1|$ par rapport à la valeur 2 (sauf dans le cas où J_1 est négative et J_2 positive). Nous avons obtenu (en excluant le cas où J_1 et J_2 sont toutes deux négatives) :

$J_1 > 0, J_2 > 0$:

$$\frac{J_2}{J_1} < 2 \quad \chi_{//}^T \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \exp\left(\frac{\beta}{2} (J_2 - 2J_1)\right) \underset{T \rightarrow 0}{\rightarrow} 0, \quad (\text{A23-9})$$

$$\frac{J_2}{J_1} = 2 \quad \chi_{//}^T \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{2c^3 - (3c^2 + c + 1)} (= 0,085) , \quad c = \frac{3 + \sqrt{5}}{2} , \quad (\text{A23-10})$$

$$\frac{J_2}{J_1} > 2 \quad \chi_{//}^T \underset{\tau \rightarrow 0}{\sim} \exp\left(\frac{\beta}{2} (2J_1 - J_2)\right) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} 0 . \quad (\text{A23-11})$$

Ces comportements sont illustrés par les courbes de la figure A23-1.

$J_1 > 0, J_2 < 0$:

$$\frac{|J_2|}{J_1} < 2 \quad \chi_{//}^T \underset{\tau \rightarrow 0}{\sim} \exp\left(-\frac{\beta}{4} (2J_1 + J_2)\right) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} 0 , \quad (\text{A23-12})$$

$$\frac{|J_2|}{J_1} = 2 \quad \chi_{//}^T \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} \frac{c^2}{2c^3 - (3c^2 + c + 1)} (= 0,583) , \quad c = \frac{3 + \sqrt{5}}{2} , \quad (\text{A23-13})$$

$$\frac{|J_2|}{J_1} > 2 \quad \chi_{//}^T \underset{\tau \rightarrow 0}{\sim} \exp\left(-\frac{\beta}{2} (2J_1 + J_2)\right) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} +\infty . \quad (\text{A23-14})$$

Ces comportements sont illustrés par les courbes de la figure A23-2.

$J_1 < 0, J_2 > 0$:

$$\chi_{//}^T \underset{\tau \rightarrow 0}{\sim} \exp(\beta J_1) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} 0 . \quad (\text{A23-15})$$

Ces comportements sont illustrés par les courbes de la figure A23-3.

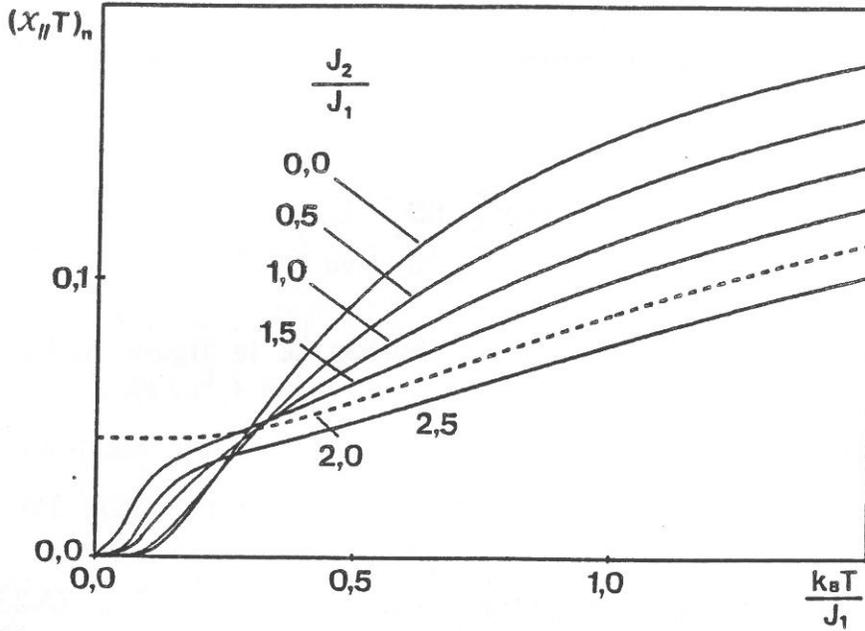


Fig.A23-1 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne de type B $(1/2, 1/2)$ pour diverses valeurs du rapport J_2/J_1 ($J_1 > 0$).

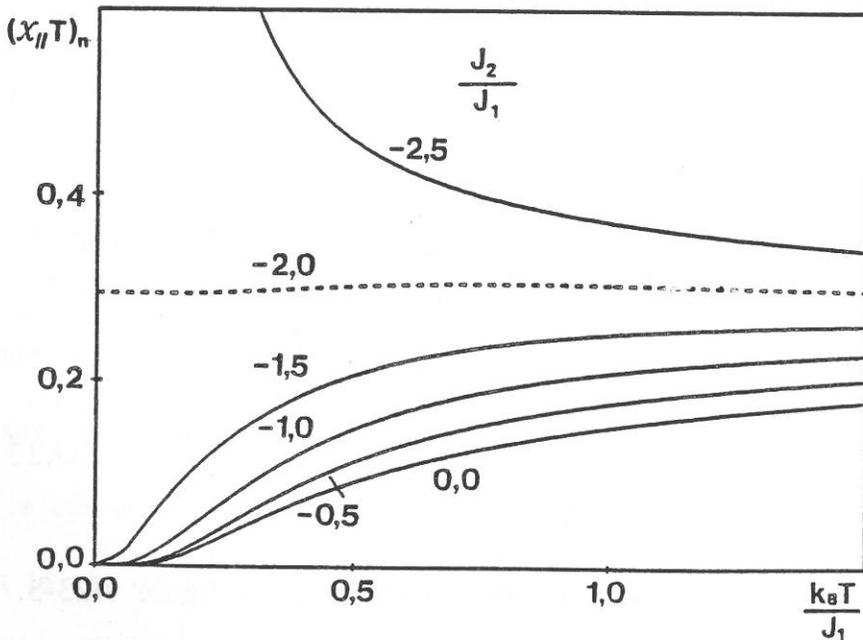


Fig.A23-2 : Variation thermique du produit $(x_{//}T)_n$ d'une chaîne de type B $(1/2, 1/2)$ pour diverses valeurs du rapport J_2/J_1 ($J_1 > 0$).

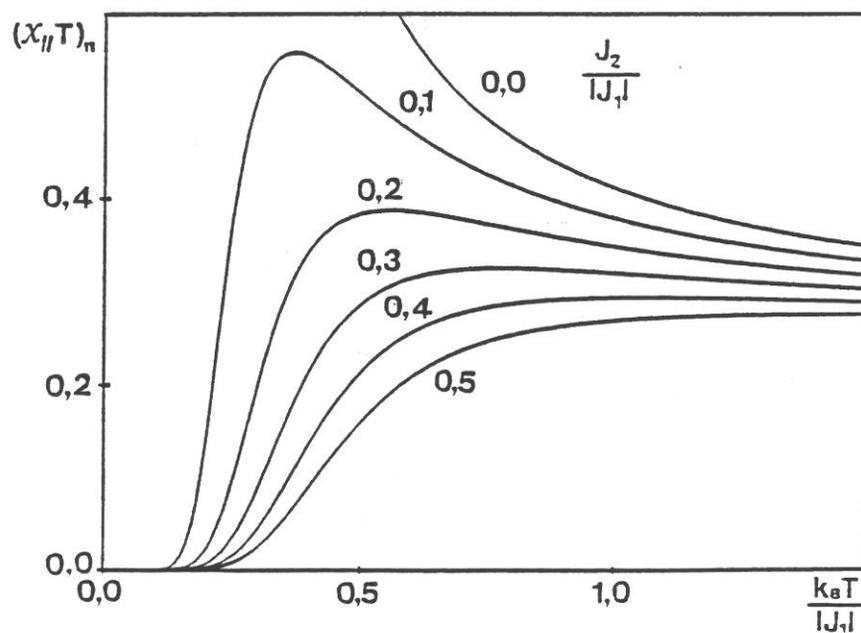


Fig.A23-3 : Variation thermique du produit $(\chi_{//}T)_n$ d'une chaîne de type B $(1/2, 1/2)$ pour diverses valeurs du rapport $J_2/|J_1|$ ($J_1 < 0$).



Vu et approuvé

TALENCE, le

Le Président de l'Université
de Bordeaux I