

République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة الجبلاي بونعامة خميس مليانة
Université Djilali Bounaâma de Khemis Miliana
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière



Mémoire de fin d'étude
En vue de l'obtention d'un diplôme de **MASTER EN PHYSIQUE**
Spécialité: Physique théorique

Sur le Thème :

Étude du modèle de Blum-Emery-Griffiths à spin (3/2) frustré sur un réseau triangulaire par la méthode du champ moyen

Soutenu publiquement le 06/07/2019 devant le jury composé de

Mr R. FERMOUS	MCB	à l'UDBKM	Président
Mr M. YEZLI	MCB	à l'UDBKM	Encadreur
M ^{elle} R. REDAOUIA	MAA	à l'UDBKM	Examinatrice

Présenté par :

- ✓ BENAIDA RIHAB
- ✓ BELAID NESERINE

Année universitaire : 2018 / 2019

Résumé :

Le modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 antiferromagnétique a été étudié sur réseau triangulaire frustré par la méthode exacte de la mécanique statistique sous champ cristallin. Les calculs numériques ont fait apparaître de nouvelles phases dégénérées comme phases thermiquement stables dans des diagrammes de phase des états fondamentaux avec existence des transitions du premier ordre. Une étude du modèle avec la méthode du champ moyen a donné les différentes équations self-consistantes.

Mots clés : le modèle de Blume- Emery-Griffiths, spin-3/2, diagramme de phase des états fondamentaux, la méthode du champ moyen.

Abstract :

The spin-3/2 antiferromagnetic Blume-Emery-Griffiths model was studied on a triangular lattice frustrated by the exact method of statistical mechanics under crystalline field. Numerical calculations have revealed new degenerate phases as thermally stable phases in ground states phase diagrams with the existence of first-order transitions. A study of the model with the mean field method gave the different self-consistent equations.

Keywords : The Blume-Emery-Griffiths model, spin-3/2, Ground states phase diagrams, Mean field method.

الملخص :

تمت دراسة نموذج المضاد الكهرومغناطيسي **Blume-Emery-Griffiths spin-3/2** على شبكة ثلاثية مثلية محبطة من الطريقة الدقيقة للميكانيكا الإحصائية تحت حقل D . كشفت العمليات الحسابية العددية عن مراحل انحطاط جديدة كمرحلة مستقرة حرارياً في مخططات طورية للحالات الأساسية مع وجود انتقالات من الدرجة الأولى. أعطت دراسة للنموذج باستخدام طريقة الحقل المتوسط معادلات مختلفة متسقة ذاتياً.

الكلمات المفتاحية : نموذج **Blume-Emery-Griffiths spin-3/2** ، مخطط طور الحالات الأساسية ، متوسط طريقة الحقل.

TABLE DES FIGURES

1.1	Illustration d'un aimant comme un ensemble de dipôles magnétiques localisés à l'intérieur de la substance.	3
1.2	La variation de l'aimantation M en fonction de la température à champ externe nul.	3
1.3	Illustration du phénomène d'hystérésis (le cycle d'hystérésis)	4
1.4	Illustration des configurations électroniques dans le fer et le titane	7
1.5	Matériau diamagnétique	8
1.6	Alignement des électrons en présence d'un champ magnétique dans le cas d'un matériau paramagnétique.	9
1.7	Un aimant	10
1.8	Un Clou à base de fer	10
1.9	Orientation des électrons lors d'une application d'un champ magnétique pour un matériau antiferromagnétique	11
1.10	Le moment magnétique total de l'échantillon n'est pas nul dans le cas d'un matériau ferrimagnétique	12
1.11	(a) diagramme de phase d'un ferromagnétique simple	15
1.12	(b) Courbe d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique à différentes températures	15
1.13	Exemple de diagramme de phase montrant un point tricritique pour un d'un matériau antiferromagnétique.	16
1.14	Schéma représente les différentes transitions de phases	17
1.15	Diagramme (pression, température) montrant les domaines d'existence de trois phases (solide, liquide, gaz).	17
1.16	Comportement du paramètre d'ordre m à la transition du second et du premier ordre.	22
2.1	Schéma de l'algorithme standard de la méthode de MC	28
2.2	Exemple d'une courbe fermée non uniforme.	29
2.3	Distribution uniforme d'un nombre N de point dans notre Rectangle	29
3.1	Les onze réseaux archimédiens	40
3.2	(a) : Frustration due à la compétition entre plusieurs couplages, $J_1 > 0$ et $J_2 > 0$. (b) : Frustration géométrique, $J > 0$	40
3.3	Le réseau triangulaire antiferromagnétique frustré	41
3.4	Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $ J_1 = 1$ et $J_2 = -0.25$	43
3.5	Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $ J_1 = 1$ et $J_2 = 0$	44
3.6	Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $ J_1 = 1$ et $J_2 = 0.25$	45

Table des matières

Introduction	5
1 Généralités sur le magnétisme de la matière condensée	8
1.1 Introduction	8
1.2 Le Comportement de L'aimantation	9
1.3 La limite thermodynamique	12
1.4 La susceptibilité magnétique	13
1.5 Les métaux de transition	14
1.6 La classification des substances magnétique	15
1.6.1 Matériaux diamagnétiques	15
1.6.2 Le paramagnétisme	16
1.6.3 Le ferromagnétisme	17
1.6.4 L'antiferromagnétisme	18
1.6.5 Le ferrimagnétisme	19
1.6.6 Autres formes de magnétisme	20
1.7 L'hamiltonien du système	21
1.8 Généralités sur les transitions de phase	22
1.8.1 Types de transitions de phase:	24
1.9 Transition ferromagnétisme-paramagnétisme	25
1.10 Classification des transitions de phase	26
1.10.1 Classification d'Ehrenfest (1880-1933)	27
1.10.2 Classification de Landau (1908-1968)	28
1.11 les phénomènes critiques	29
1.11.1 L'exposant critique	30
1.11.2 Exemples de quelques exposants critiques	32
1.12 conclusion	33

2	Modèles théoriques usuels	34
2.1	Les méthodes exactes	34
2.1.1	La méthode de Monté Carlo	34
2.1.2	La méthode de la matrice de transfère	39
2.1.3	Les verres de spin	40
2.2	Les méthodes approximatives	41
2.2.1	La méthode du champ moyen de Weiss	41
2.2.2	La théorie du champ moyen effectif corrélé	43
3	Étude du modèle de Blum-Emery-Griffiths à spin (3/2) antiferromagnétique sur réseau triangulaire	45
3.1	Introduction	45
3.2	Définition de modèle du Blume-Emery-Griffiths (BEG)	46
3.3	Introduction du spin 3/2	47
3.4	Les Terres rares	48
3.5	Les différents réseaux utilisés	48
3.6	Frustration	50
3.7	Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 anti-ferro frustré sur un réseau triangulaire avec le premier voisin	51
3.7.1	L'hamiltonien du modèle	51
3.7.2	Diagramme de phases à l'état fondamental $T=0$	51
3.7.3	La méthode du champ moyen $T \neq 0$	54
3.7.4	Résultats Analytiques	56
	Conclusion	58

Introduction

Ce travail de mémoire est basé sur une branche de la physique appelée la physique statistique, faisant référence aux travaux de L. Boltzmann qui ont fondé la mécanique statistique revenant aux années **1870 à 1900**.

Cette approche de la physique statistique est pertinente quand le nombre des constituants d'un système physique est suffisamment grand pour que calculer des moyennes sur eux soit plus ou moins intéressant que de les étudier individuellement. Par exemple dans un verre d'eau, il y a environ 10^{29} molécules; stocker les positions de chacune de ces molécules nécessiterait au moins cent milliards de disques durs d'ordinateurs courants de **100 Go**, c'est à dire bien plus que le nombre d'humains présents sur la terre, donc on ne peut calculer que des propriétés moyennes ou typiques, il devient donc très cher ou même humainement impossible de les étudier isolément.

La mécanique statistique est l'un des domaines essentiels de la physique moderne. Elle est à la base de nombreux développements actuels dans la science des matériaux, pour lesquels une approche classique macroscopique est inadaptée.

Le magnétisme est un domaine de la physique de la matière condensée qui ne cesse de nous surprendre par sa grande variété de phénomènes, souvent liés à l'émergence de nouveaux types de matériaux.

Les réseaux de spins ont un intérêt particulier en physique de la matière condensée et spécialement dans l'étude du magnétisme. Les modèles de spins sont définis par des variables de spins placées aux nœuds d'un réseau, pris comme un ensemble de sites (ou nœuds) reliés par des liens. Les propriétés de ces modèles sur réseau sont étudiées en utilisant des méthodes bien connues de la mécanique statistique d'équilibre, tels que la méthode exacte, la technique du groupe de renormalisation, l'approximation du champ moyen...

La mécanique statistique met l'accent aussi sur un aspect spectaculaire des phénomènes physiques : le comportement global de l'ensemble des constituants d'un système semble complètement détaché des lois qui les régissent. Les lois du mouvement microscopique des

molécules d'eau sont strictement les mêmes à **99°C** et à **101°C**, mais on a l'impression d'avoir affaire à deux corps différents (un liquide et un gaz), régis par des lois différentes. Comment croire alors qu'un changement aussi faible de température ait une conséquence aussi grande sur le comportement macroscopique de la matière?

Un type de comportement macroscopique est appelé traditionnellement une phase et le passage de l'un à l'autre est une transition de phase. Une partie de la tâche de la physique statistique est de recenser, caractériser et classer ces phases.

L'étude des transitions de phase qui apparaissent dans un système physique, a reçu spécialement une attention particulière des scientifiques durant des années. Un intérêt particulier a été consacré aux phénomènes associés au point critique qui se manifeste dans les transitions liquide-vapeur et dans les systèmes ferromagnétique (point de Curie).

Du fait de leurs nombreuses applications technologiques, les matériaux magnétiques ont, à l'échelle mondiale, une importance économique très grande comparable à celle des semi-conducteurs. Les recherches dans des laboratoires des pays industrialisés ont permis de réaliser la synthèse de nouveaux matériaux magnétiques aux performances de plus en plus élevées.

Le lanthane et les lanthanides forment une série de quinze éléments métalliques de propriétés chimiques très semblables, que l'on désigne aussi plus communément sous le nom, d'ailleurs impropre, de "terres rares".

Les terres rares ont des propriétés magnétiques exceptionnelles, leur aimantation à saturation est très supérieure à celle du fer, cependant l'ordre magnétique n'existe qu'à des températures inférieures à celles de l'ambiante. A température ambiante, les terres rares sont donc paramagnétiques ou diamagnétiques. Afin d'augmenter les températures de Curie et d'utiliser les terres rares pour leurs propriétés magnétiques, on a cherché à associer les terres rares avec des éléments comme le fer, le cobalt ou le nickel présentant de bonnes propriétés magnétiques et des températures de Curie élevées ($T_C > 500^\circ\text{C}$). Cela a débouché sur les alliages terres rares/métaux de transition et sur l'industrialisation des aimants samarium/cobalt ($T_C > 700^\circ\text{C}$) dont les produits d'énergie volumique sont supérieurs à **0,16MJ/m³** contre des valeurs ne dépassant pas **30 à 50 kJ/m³** pour les ferrites ou les alliages Al-Ni-Co. Cela a permis une miniaturisation mise à profit dans de nombreux dispositifs (par exemple dans l'audiovisuel pour la mise au point d'écouteurs miniatures avec les baladeurs).

Ce mémoire est composé de trois chapitres principaux :

Dans le premier chapitre, nous avons commencé par une introduction générale dans laquelle nous avons parlé du magnétisme. Nous avons parlé aussi de l'importance des matériaux du fait de ses différentes applications technologiques. Ensuite, nous avons rappelé quelques notions des systèmes magnétiques. Nous avons mis en évidence les différents états magnétiques qui apparaissent à partir des transitions de phase où nous avons présenté les critères de classification ramenant à la théorie des phénomènes critiques.

Dans le second chapitre, nous développerons certaines théories usuelles. Nous avons classé ces dernières en deux classes : les théories exactes (de Monte-Carlo, la matrice de transfert), et les théories approximatives (du champ moyen de Weiss, du champ moyen effectif corrélé).

Dans le troisième chapitre, nous avons présenté notre travail de fond. Il a été consacré à l'étude de l'état fondamental du modèle de Blume-Emery-Griffths où nous avons considéré un système triangulaire frustré avec introduction du spin $3/2$. Nous avons exposé notre étude sur le modèle et donner, bien sur les interprétations nécessaires.

Finalement, nous avons terminé notre travail par une conclusion générale faisant le point sur notre travail de recherches et par la suite donner les perspectives dans l'avenir.

1

Généralités sur le magnétisme de la matière condensée

1.1 Introduction

Le magnétisme fait partie de ces énergies mystérieuses (comme électricité ou la lumière), dont on observe les effets sans en connaître les causes[1].

Comme dans notre univers il ne semble pas exister d'effets sans cause, nous devons admettre que le magnétisme est une réalité sans avoir la possibilité d'expliquer d'où il vient ni comment il fonctionne[1].

Le terme "magnétisme" provient du nom Magnésia : région de la Thessalie, d'où est extraite la magnétite ; Il s'agit de cristaux contenant du fer naturellement aimanté. Mais la découverte du magnétisme par les chinois fut probablement antérieure, et il est reconnu qu'ils furent les premiers à l'utiliser à des fins pratiques. Jusqu'au XVIIe siècle, l'interprétation du magnétisme fut d'ordre métaphysique, voire religieux dans la vision animiste de l'univers. La première application du magnétisme fut une boussole inventée environ 4000 ans av. J-C. en chine pour trouver le chemin vers l'harmonie, C'est grâce à son aimant s'alignant sur le champ magnétique terrestre, que la boussole indique toujours le nord.

Le mot de magnétisme veut dire l'ensemble des phénomènes qui ont lieu au cœur et autour de matériaux aimantés, que cette aimantation soit naturelle ou qu'elle soit le résultat d'un champ d'induction électrique ou magnétique[2]. Le magnétisme est toujours associé au mouvement de charges électriques, qu'il soit à l'échelle macroscopique comme le champ magnétique créé par un courant électrique, ou bien à l'échelle microscopique ou atomique (champs magnétiques résultant des mouvements d'électrons dans les réseaux cristallins, ou dans les atomes suite par exemple à l'interaction spin-orbite)[2].

Les applications du magnétisme sont nombreuses, de l'informatique à la médecine en passant par la physique des particules au niveau de l'atome c'est du niveau microscopique.

1.2 Le Comportement de L'aimantation

L'aimantation (\mathbf{M}) est une grandeur physique qui caractérise les corps et les substances magnétiques[3]. Elle a pour origine l'existence d'une densité de moments magnétiques microscopiques portés par les électrons au sein de la matière (courants ampériens imaginés par Ampère)[3]. On distingue l'aimantation permanente (aimant) de l'aimantation induite, provoquée par un champ magnétique extérieur ou un courant (induction, électroaimant). L'intensité d'aimantation est reliée au champ magnétique \mathbf{B} et à son excitation \mathbf{H} par la relation:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) \quad (1.1)$$

où μ_0 est la perméabilité du vide[3].

Beaucoup de travaux prennent cette grandeur comme une propriété la plus représentative du magnétisme. Mais d'autres auteurs aiment analyser le comportement de la susceptibilité magnétique. Ce choix est fait sans aucun effet sur la récolte des informations qui concernent les substances magnétiques parce que les deux grandeurs physiques sont reliées par une loi naturelle est simple[3].

Les milieux magnétiques ont des propriétés magnétiques qui peuvent être influencées par des facteurs internes ou externes[3]. Les excitations extérieures qui ont des effets importants sont surtout la température \mathbf{T} à travers l'énergie thermique ($\mathbf{K}_B \cdot \mathbf{T}$) qui est une excitation scalaire et le champ magnétique extérieur \mathbf{B}_{ext} qui est une excitation vectorielle défini à travers l'énergie magnétique ($\vec{\mu} \cdot \vec{\mathbf{B}}_{ext}$)

Pour se donner une idée sur les effets de ses deux excitations sur l'aimantation, nous allons assimiler l'aimant à un ensemble de dipôle magnétique situé dans la substance en comparaison avec les substances ferroélectriques comme représenté sur la figure [1.1].

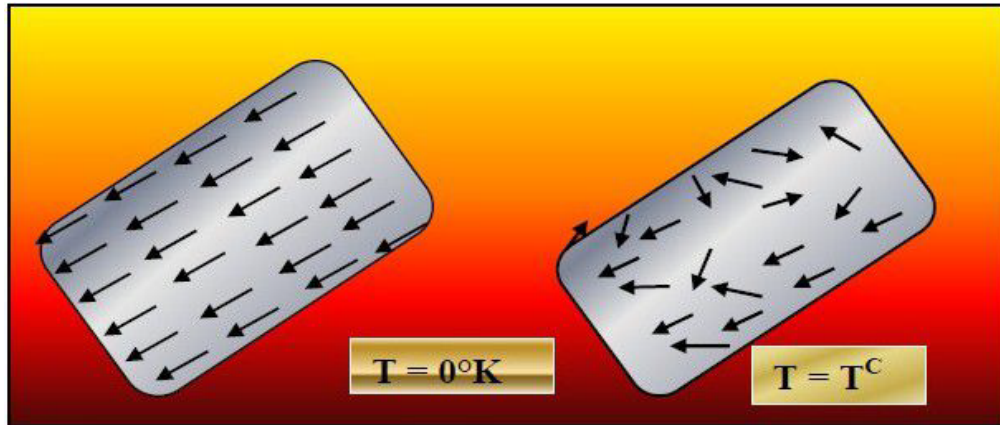


Fig 1.1: Illustration d'un aimant comme un ensemble de dipôles magnétiques

Le rôle de l'aimantation est semblable à celui de la polarisation électrique. Elle apparaît comme une moyenne statistique sur les différents dipôles magnétiques dans la direction de l'aimantation[3].

L'excitation thermique étant une excitation scalaire, elle s'oppose donc à tout alignement des moments magnétiques suivant une direction privilégiée[3]. Donc, son effet consiste à désorienter les dipôles magnétiques dans tous les chemins et les directions de l'espace réel. Par conséquence immédiate, l'aimantation \mathbf{M} va décroître jusqu'à sa disparition totale pour une température critique T_C (elle s'appelle aussi température de Curie). Ce processus est illustré par la figure [1.2]. Nous assistons donc à une transition de phase ferromagnétique-paramagnétique[3].

Est quand le champ magnétique extérieur permanent est présent, l'aimantation décroît sous l'effet de la température mais ne s'annule réellement qu'à l'infini.

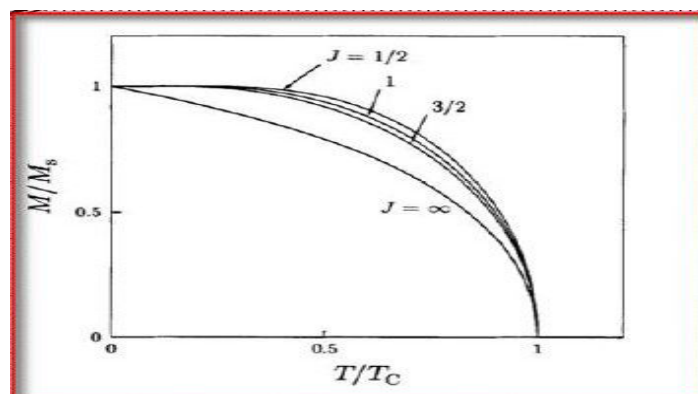


Fig 1.2: La variation de l'aimantation M en fonction de la température à champ extérieur nul

Le tableau (1.1) nous donne quelques températures critiques des différents matériaux ferromagnétiques[3].

Solides	$T_C(^{\circ}\text{K})$	Solides	$T_C(^{\circ}\text{K})$
Fe	1043	UH ₃	180
Ni	627.2	EuO	77
Co	1388	CrTe	336
Gd	292.5	MnAs	318
CrO ₂	386.5	Cu ₂ MnAl	630
CrBr ₃	32.56	ZrZn ₂	35
EuS	16.5	GdCl ₃	2.2

Tableau(1.1): les températures critiques(de curie) de certaines substances ferromagnétiques.

La propriété ferromagnétique des aimants peut être aussi artificielle : la substance initialement paramagnétique est sur un effet de champ magnétique extérieur relativement intense pour que cette dernière reste aimantée quand le champ magnétique extérieur sera éteint[3]. C'est une aimantation artificielle qui est bien illustrée par la courbe d'hystérésis (hystérésis: un aimant peut être fait à partir d'un matériau ferromagnétique non aimanté) qui représente la variation de l'aimantation d'une substance soumis à un champ magnétique extérieur [3].

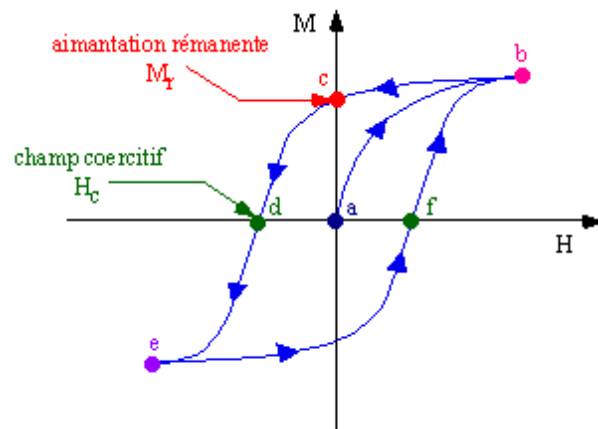


Fig 1.3: Illustration du phénomène d'hystérésis(ou le cycle d'héstérisis)

Pour chaque cycle d'hystérésis décrit dans l'intervalle $[+\hat{H},-\hat{H}]$, on peut définir au moins deux points qu'on remarque dans le cycle :

-L'aimantation rémanente \mathbf{M}_r ou bien induction rémanente \mathbf{B}_r : aimantation qui subsiste après suppression du champ magnétique extérieur \mathbf{H} (le champ magnétique dans le matériau en champ d'excitation nul) [3].

-L'aimantation à saturation \mathbf{M}_s : spécifique à tout matériau, et correspond à l'état où il n'existe plus de structure en domaines dans le système[3].

-Le champ coercitif \mathbf{H}_c : point correspondant au champ d'excitation pour lequel l'aimantation s'annule [3].

1.3 La limite thermodynamique

La limite thermodynamique, ou limite macroscopique, d'un système en mécanique statistique est la limite pour un grand nombre N de particules (par exemple, des atomes ou des molécules) où le volume est supposé croître proportionnellement au nombre de particules. La limite thermodynamique est définie comme la limite d'un système avec un grand volume, avec la densité de particules maintenue fixe. Cette limite a certains avantages[4]. D'abord les calculs analytiques sont plus faciles, les corrections de taille finie présentent très souvent des difficultés sérieuses. Ensuite les fonctions thermodynamiques ne développent de vraies singularités que dans cette limite. Pour des tailles finies, ces fonctions ne possèdent que de grands maxima et ainsi les transitions de phase sont arrondies[4].

En physique statistique, la limite thermodynamique est la limite mathématique conjointe où :

- le nombre de particules N du système considéré tend vers l'infini.

$$N \rightarrow \infty$$

-le volume V du système considéré tend vers l'infini.

$$V \rightarrow \infty$$

-La densité de particules $P=N/V$ du système considéré reste constante.

$$\frac{N}{V} = cst$$

1.4 La susceptibilité magnétique

La grandeur qui résume les propriétés magnétiques d'une substance est la susceptibilité magnétique χ_m définie comme suit: Un échantillon, placé dans un champ magnétique homogène (\vec{H}), acquiert une aimantation \mathbf{M} qui dépend du champ magnétique appliqué et de la température[4].

Par définition susceptibilité magnétique χ_m est donnée par la relation suivante:

$$\chi_m = \mathbf{M} / \mathbf{H} \quad (1.2)$$

où:

\mathbf{M} est l'aimantation c'est à dire un champ impliqué dans un angle solide, et \mathbf{H} est le champ induit.

Donc la susceptibilité magnétique a été exprimée par le rapport (\mathbf{M} / \mathbf{H}) est bien un angle solide.

Unité **S.I** = stéradian (**sr**), mais comme stupidement beaucoup de gens considèrent l'angle sans dimension, on trouve abusivement χ_m exprimée par un simple nombre.

Si l'échantillon est isotrope du point de vue magnétique, χ_m se réduit à une grandeur scalaire. Si le champ magnétique est petit, χ_m devient indépendant du champ et :

$$\chi_m = \frac{M}{H} = \frac{\langle \vec{m} \rangle}{H} N \quad (1.3)$$

Où: $\langle \vec{m} \rangle$ est le moment magnétique moyen par molécule et N est le nombre d'Avogadro.

Lorsqu'il n'y a pas d'échange de chaleur avec le milieu extérieur au durant l'expérience, on dit que la susceptibilité est adiabatique.

Ce paramètre est très différent suivant la nature du matériau à considérer (dia-, para-, ferri-, ferromagnétique) et peut varier ou non en fonction du champ appliqué[4]. Il peut présenter un comportement spécifique à température élevée (dans la région dite de Curie). La susceptibilité varie, en valeur, de 10^{-6} pour les matériaux les plus faiblement magnétiques à 10^6 pour les plus facilement aimantables, mais elle varie également en signe. Une susceptibilité positive implique que l'aimantation est du même sens que l'excitation et la renforce au sein du matériau. A l'inverse, une susceptibilité négative implique une aimantation opposée au champ et qui le diminue. Enfin, une susceptibilité faible ($\chi_m < 1$), implique que le champ extérieur domine, alors que pour une susceptibilité forte ($\chi_m > 1$), le champ créé par le matériau amplifie significativement le champ extérieur.

1.5 Les métaux de transition

Les éléments de transition sont comme suit :

Sc, Ti, V, Cr, Mn; Fe;Co;Ni;Cu;Zn	$Z = 21 \text{ à } 30$
Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag,Cd	$Z = 39 \text{ à } 48$
La, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au;Hg	$Z = 57, 72 \text{ à } 80$

Les éléments de transition représentent une large fraction de la classification périodique[5]. Ils constituent essentiellement le bloc **d** du tableau périodique (la couche **d** est incomplète), ils sont les éléments des groupes 3 à 12 du tableau périodique y compris la plupart des lanthanides et des actinides. Ils sont solides dans les conditions normales de température et de pression, avec une masse volumique et une température de fusion élevées[5].

Leurs métaux et alliages possèdent des propriétés mécaniques, électriques, magnétiques (telles que le ferromagnétisme et la supraconductivité) remarquables utilisés dans la vie quotidienne comme le fer, le cuivre, le zinc . . . etc[5].

Les métaux de transitions ont une distribution électronique particulière : leurs couches électroniques **nd** ne sont pas satisfaites complètement alors que les couches d'ordre supérieur (**n+1**)**s** ont été rempli[5]. Dans le cas du fer et du titane sont parmi eux les plus abondants et les plus utilisés, les configurations électroniques sont données par la figure (1.4). La présence d'électrons singuliers ou célibataires non appariés est à l'origine du ferromagnétisme naturel dans la nature.

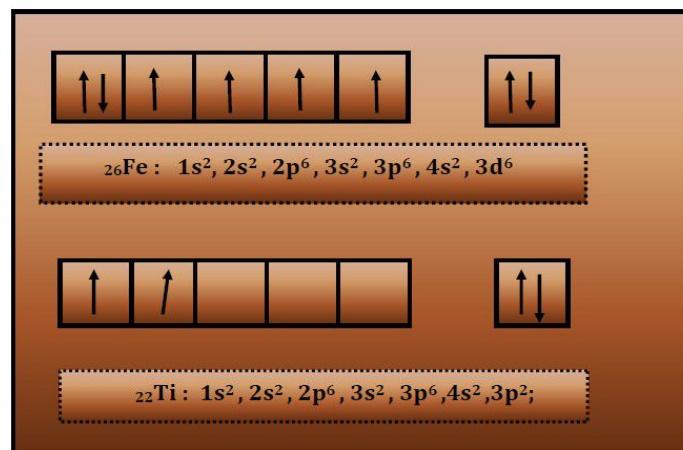


Fig 1.4: Illustration des configurations électroniques dans le fer et le titane.

1.6 La classification des substances magnétique

Il existe plusieurs classes de substances magnétiques ayant des propriétés similaires, à citer :

1.6.1 Matériaux diamagnétiques

Lorsqu'un champ magnétique est appliqué, ce modèle permet de comprendre la modification du courant dans la spire par application de la loi de Lenz, cette modification est telle qu'il en résulte un flux s'opposant au champ inducteur. Il apparaît donc un moment magnétique atomique. La somme de tous les moments induits se traduit par une aimantation globale du corps dite diamagnétisme et qui est en opposition au champ inducteur. Lors de l'application d'un champ magnétique, ils se procurent une apparition d'une faible aimantation[6].

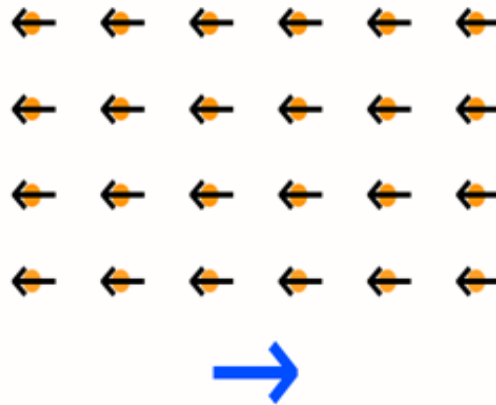


Fig 1.5: Matériau diamagnétique

La susceptibilité magnétique χ_m d'une substance diamagnétique isotrope comme **Ag**, **Au**, **Bi**, **Cu**, **H₂O**, **H₂** est strictement négative ($-\chi_m$) et varie entre $[10^{-6}, 10^{-5}]$. (voir le tableau(1.2))

Les matériaux	$-\chi_m(10^{-6})$
Cu	11.8
Si	3.4
Au	34
Ge	7.25
Alumine	12

Tableau 1.2: la susceptibilité magnétique de quelques substances diamagnétique.

Il existe plusieurs matériaux diamagnétiques, les plus connus sont: le cuivre ; l'argent et l'or [6].

1.6.2 Le paramagnétisme

Le paramagnétisme existe quand les moments magnétiques des atomes sont présents et sont orientés dans toutes les directions.

Dans ce cas, et en absence du champ extérieur l'aimantation globale est nulle. Les moments atomiques sont orientés au hasard, dans toutes les directions. L'agitation thermique est responsable de cette désorganisation. Si un champ magnétique est appliqué[7], les moments magnétiques s'alignent selon sa propre direction (figure 1.6), mais l'agitation thermique continue à détruire cette organisation. L'aimantation observée est le résultat de cette compétition entre l'orientation due au champ et l'agitation thermique. La théorie néglige complètement l'influence des moments magnétiques les uns sur les autres. Elle ne sera donc valide que sur les gaz parfaits ou les systèmes assimilables aux gaz parfaits dans lesquels la distance entre atomes porteurs de moment est grande.

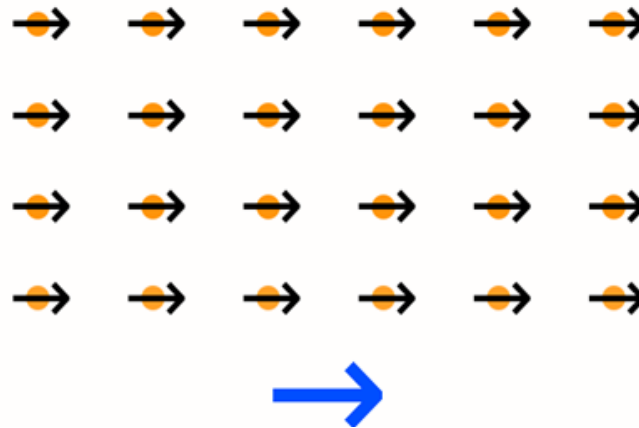


Fig 1.6: Alignement des électrons en présence d'un champ magnétique dans le cas d'un matériau paramagnétique.

Ce genre de matériaux sont caractérisés par une susceptibilité magnétique strictement positive ($+\chi_m$), mais, elle est faible et dépendante de la température dont la valeur est comprise entre $[10^{-5}, 10^{-3}]$, Comme: **Al, air, O₂, Pt, sels de fer, Sn.** Voir le tableau(1.3) qui suit:

Les matériaux	$\chi_m \cdot (10^{-5})$
Tungstène	6.8
Na	0.72
Al	2.2
Li	1.4
Mg	1.2
Césium	5.1

Tableau 1.3: la susceptibilité magnétique de quelques substances paramagnétique.

1.6.3 Le ferromagnétisme

Un matériau est dite ferromagnétique quand il porte une aimantation permanente ou de longue durée.

La théorie classique du ferromagnétisme qui est la théorie du champ moléculaire est principalement due à P. Weiss (1907). A partir de cette théorie, les corps ferromagnétiques sont constitués de cristaux dont les atomes sont porteurs de moments magnétiques exerçant entre eux de très fortes interactions[8].

Les matériaux ferromagnétiques constitués des atomes qui possèdent des forts moments magnétiques permanents, l'orientation de ces moments sont liés entre eux et par l'agitation thermique sont négligeables selon la loi de Curie-Weiss.

Ces matériaux sont capables de conserver une aimantation même en l'absence de champ magnétique extérieur. Par contre, par application d'un champ magnétique inverse, l'aimantation persiste plus ou moins. (la même chose lorsque la température augmente (température de Curie, ex. Fer : 770°C)).

Par conséquence, la susceptibilité magnétique des substances ferromagnétiques est importante, elle est strictement positive($+\chi_m$), comme: **Fe, Co, Ni, Gd**, Magnétite, alliages de **Mn** ,...

Exemple de matériaux ferromagnétiques:

L'aimant est un corps ferromagnétique dont le moment magnétique macroscopique permanent est:

$$\vec{M} = \sum \vec{m} \neq 0 \quad (1.4)$$

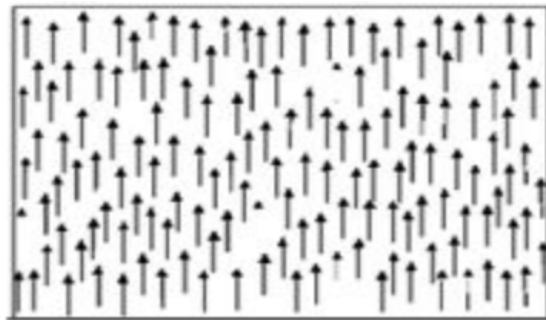


Fig 1.7: Un aimant

Le clou à base de fer est un corps ferromagnétique qui peut s'aimanter et dont le moment magnétique macroscopique est :

$$\vec{M} = \sum \vec{m} = 0 \quad (1.5)$$

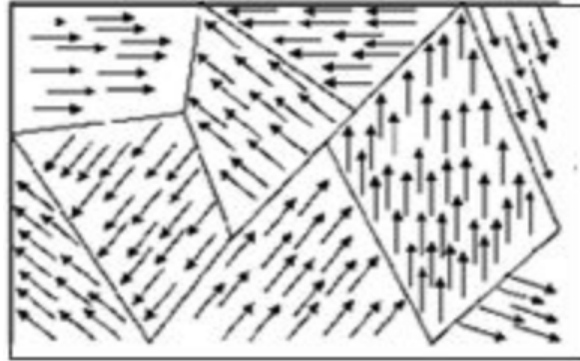


Fig 1.8: Un Clou à base de fer

1.6.4 L'antiferromagnétisme

Les électrons des matériaux ferromagnétiques s'orientent tous dans le même sens que le champ magnétique extérieur. Mais dans les substances antiferromagnétiques, l'orientation des électrons est inversée d'un atome à l'autre (orienté dans des sens deux à deux opposés), formant un moment magnétique global nul (figure 1.9):

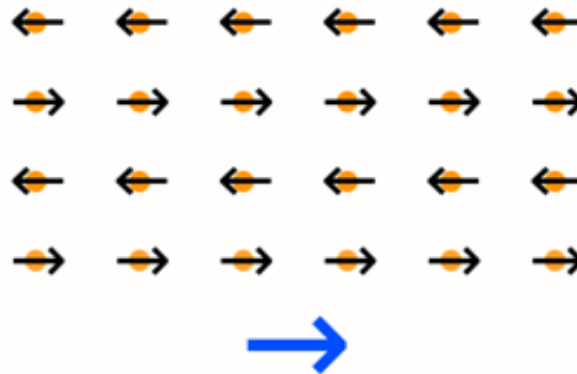


Fig 1.9: Orientation des électrons lors d'une application d'un champ magnétique pour un matériau antiferromagnétique

Le moment magnétique d'un atome s'inverse avec celui de l'atome voisin. Macroscopiquement, ce matériau réagit comme un matériau non magnétique, il est ni attiré, ni repoussé par un aimant, mais des phénomènes magnétiques interviennent tout de même au niveau microscopique. Ces matériaux sont antiferromagnétiques en dessous d'une certaine température, dite température de Néel, et sont généralement paramagnétique au dessus[9].

En plus des matériaux intrinsèquement antiferromagnétiques, des assemblages de couches ferromagnétiques séparées par un isolant ont parfois également un comportement antiferromagnétique[9].

Ces dispositifs là sont largement utilisés en électronique et en mécanique, à cause du comportement électronique particulier. Ces constructions au comportement antiferromagnétique sont utilisés sur les têtes de lecture des disques durs, dans la mémoire vive magnétique et plus généralement dans d'autres formes de microsystème électromécanique, dont font partie les accéléromètres et les capteurs à effet hall que l'on trouve dans les smart-phones aujourd'hui[9].

1.6.5 Le ferrimagnétisme

Les matériaux ferrimagnétiques sont un peu situés à l'intermédiaire entre le paramagnétisme et l'antiferromagnétisme, on trouve le ferrimagnétisme : les moments magnétiques des électrons sont bien opposés deux à deux, mais ceux étant dans le sens le champ magnétique extérieur sont plus forts que ceux dans le sens inverse. Le moment magnétique total dans un sens est donc supérieur à celui dans l'autre sens et le moment magnétique total de l'échantillon n'est donc pas nul (figure(1.10)) :

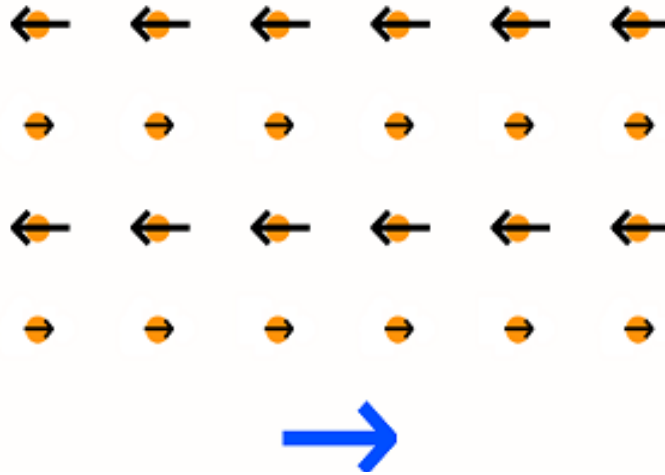


Fig 1.10: Le moment magnétique total de l'échantillon n'est pas nul dans le cas d'un matériau ferrimagnétique

Les moments magnétiques dans un sens n'ont pas la même intensité que ceux dans l'autre sens.

Les substances ferrimagnétiques ont des propriétés anisotropiques, c'est à dire que l'orientation des cristaux utilisés a son importance. Ceci est utilisé dans le domaine du paléomagnétisme,

où les roches ferrimagnétiques capturent le magnétisme terrestre de l'époque de leur formation. Le but de l'étude de ces roches est de déduire que le champ magnétique terrestre s'inverse régulièrement au fil des éons[9].

Inversement, on peut aussi dater une roche en analysant le champ magnétique qu'il a capturé. Ces matériaux, ont aussi un intérêt dans les nanotechnologies : leur moment magnétique global étant programmable sous l'effet de la chaleur, certaines formes de mémoire vives et mortes pourraient utiliser des éléments ferrimagnétiques avec une tête de lecteur et d'écriture à base d'un laser. Le but étant d'avoir des modules mémoires beaucoup plus rapides que la mémoire actuelle, inscrite avec des tensions électriques seulement[9].

1.6.6 Autres formes de magnétisme

Chaque année, on vu que la science se développe de plus on plus, et on trouve que la distinction entre les substances magnétique devient très évidente, on plus de sa de nouvelles classes de magnétismes sont proposées dans la littérature, par exemple[3]:

-Les verres de spin:

Dues à frustration locales, ils apparaissent comme une mixture de liaisons ferromagnétiques et de liaisons antiferromagnétique [3].

-Les substances métamagnétiques:

qui sont des corps qui passent de l'état antiferromagnétique à l'état ferromagnétique sous l'effet d'un champ magnétique relativement intense. L'aimantation \mathbf{M} varie linéairement en fonction de champ magnétique extérieur \mathbf{B}_{ext} appliqué jusqu'à un champ de seuil \mathbf{B}_S puis croit rapidement et pour les champs très élevés il sera saturé[3].

-les substances héliamagnétiques:

Ces substances ressemblent aux corps antiferromagnétiques parce que ils sont formé d'atomes cristallographiquement semblable[3]. Leur originalité provient de ce que, sous l'action d'un champ magnétique extérieur \mathbf{B}_{ext} ils sont susceptible de passer à un état proche de ferromagnétisme.

Touts les substances héliamagnétismes connus sont des métaux de terre rares hexagonaux en dehors de \mathbf{MnAu}_2 et du \mathbf{MnO}_2 . Leurs propriétés sont dues à l'anisotropie magnétique du système qui peut favoriser l'orientation du spin en hélice.

Il y à aussi des matériaux spéromanétismes, l'aspéromagnétisme...etc

1.7 L'hamiltonien du système

Dans la physique, pour étudier un système quelconque, il faut suivre les différentes étapes suivantes [4] :

- Observation.
- Modélisation théorique.
- Résolution mathématique.
- Comparaison des résultats avec les résultats précédents de la physique du modèle lui-même.

Il est très important de définir la représentation mathématique de l'évolution du système. L'énergie est la grandeur physique responsable de cette évolution[4].

Donc l'hamiltonien du spin doit être défini correctement pour une interprétation juste des propriétés magnétiques. Cet hamiltonien \mathcal{H} peut être décrit simplement comme une somme de deux composantes :

$$\mathcal{H} = \mathbf{H}_{ZEE} + \mathbf{H}_{int} \quad (1.6)$$

Avec:

\mathbf{H}_{ZEE} est le terme Zeeman (magnétique).

\mathbf{H}_{int} est le terme d'échange.

Heizenberg a décrit pour la première fois l'interaction d'échange dans l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H}_{int} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{J}(\mathbf{i},\mathbf{j}) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.7)$$

Où $\mathbf{J}(\mathbf{i},\mathbf{j})$ est l'interaction d'échange entre deux sites i et j , $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle$ signifié que la sommation porte sur les spins premiers voisins. Le réseau est considéré isotrope, donc on tient compte d'un seul \mathbf{J} :

-Si $\mathbf{J} < \mathbf{0}$, l'interaction est dite antiferromagnétique.

-Si $\mathbf{J} > \mathbf{0}$, l'interaction est dite ferromagnétique.

La relation de l'hamiltonien s'écrit finalement :

$$\mathcal{H} = -\mathbf{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - g\mu_B \sum_i \tilde{\mathbf{H}} \cdot \tilde{\mathbf{S}} \quad (1.8)$$

avec :

\mathbf{J} est le couplage bilinéaire.

g est la gravitation.

μ_B est le magnéton de Bohr.

\mathbf{H} est le champ induit.

\mathbf{S} est le spin.

1.8 Généralités sur les transitions de phase

Une transition de phase en physique veut dire: une transformation du système étudié provoquée par la variation d'un paramètre extérieur particulier comme la température, champ magnétique....etc.

L'étude des transitions de phase qui apparaissent dans un système, a reçu spécialement une attention particulière des scientifiques durant des années. Un intérêt particulier a été consacré aux phénomènes associés au point critique qui se manifeste dans les transitions liquide-vapeur et dans les systèmes ferromagnétique (point de Curie)[4].

Pour fixer quelques idées, considérons trois diagrammes de phases particuliers comme suit :

- Le premier c'est le diagramme du champ magnétique par rapport au température pour un corps qui présente une transition ferromagnétique (figure(1.11)) : Ce diagramme présente une frontière sur l'axe $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ avec un point d'arrêt, qu'on appelle aussi point critique. En champ nul, quand \mathbf{T} diminue, on observe, haute température une phase désordonnée, dite paramagnétique, sans aimantation ; quand $\mathbf{T} = \mathbf{T}_c$, au point critique, une transition se produit, et pour $\mathbf{T} < \mathbf{T}_c$, on observe une phase ordonnée, dite ferromagnétique, présentant une aimantation spontanée. Il y a une analogie avec la transition liquide-gaz, \mathbf{H} et le pression \mathbf{p} jouant des rôles similaires.

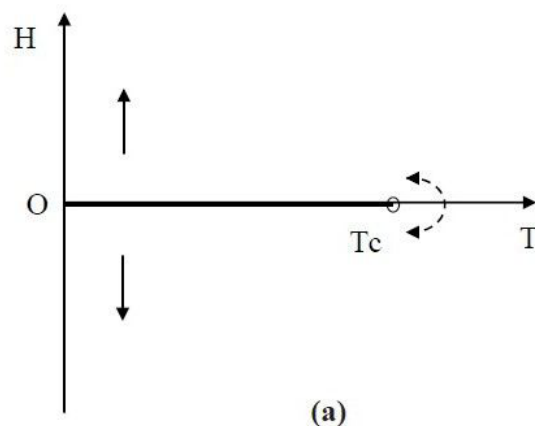


Fig 1.11: (a) diagramme de phase d'un ferromagnétique simple

-Dans le 2ème diagramme (figure(1.12)) si on traverse la frontière ($H = 0, 0 < T < T_c$), on remarque un saut de l'aimantation ; ce saut diminue lorsque le point de franchissement de la frontière se rapproche du point critique où il n'y a pas de saut de l'aimantation.

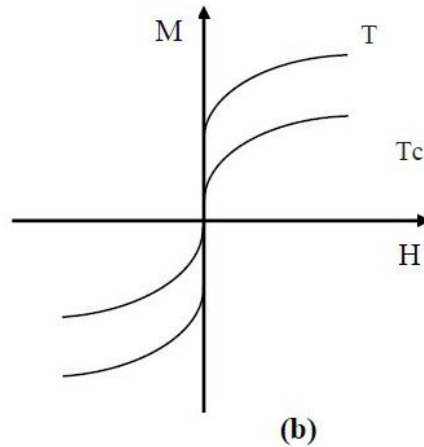


Fig 1.12: (b) Courbe d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique à différentes températures.

Pour le 3ème diagramme est le même diagramme que le 2ème, mais pour un corps qui présente une transition antiferromagnétique : On observe sur ce diagramme deux domaines séparés par une ligne (une partie en trait gras, l'autre en trait fin) : quand on franchit la partie grasse, on observe un saut de l'aimantation alternée ; lorsque on franchit la ligne fine, il n'y a pas de saut. Cette dernière ligne est une ligne de points critiques (car il n'y a pas de saut). La ligne de points critiques a un point d'arrêt, sur la ligne de transition, qu'on appelle un point tricritique.

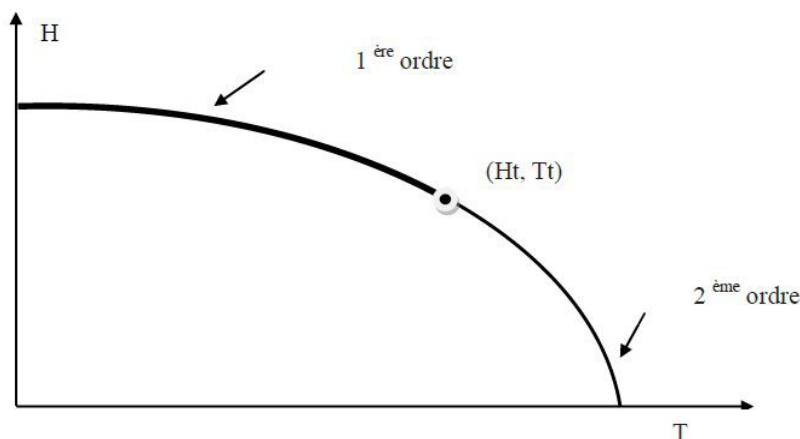


Fig 1.13: Exemple de diagramme de phase montrant un point tricritique pour un d'un matériau antiferromagnétique.

1.8.1 Types de transitions de phase:

Les transitions de phases ou bien les changements d'état physique les plus fréquentes qui font intervenir les états de la matière suivants : solide, liquide, gazeux. sont :

- de **solide-liquide** : fusion.
- de **solide-gazeux** : sublimation.
- de **liquide-solide** : solidification.
- de **liquide-gazeux** : vaporisation.
- de **gazeux-solide** : condensation solide, déposition ou sublimation inverse.
- de **gazeux-liquide** : liquéfaction ou condensation liquide.

En Thermodynamique, un terme spécifique est attribué à chacune des transitions :

- de **gazeux-solide** : condensation (exclusivement) ;
- de **gazeux-liquide** : liquéfaction (exclusivement).

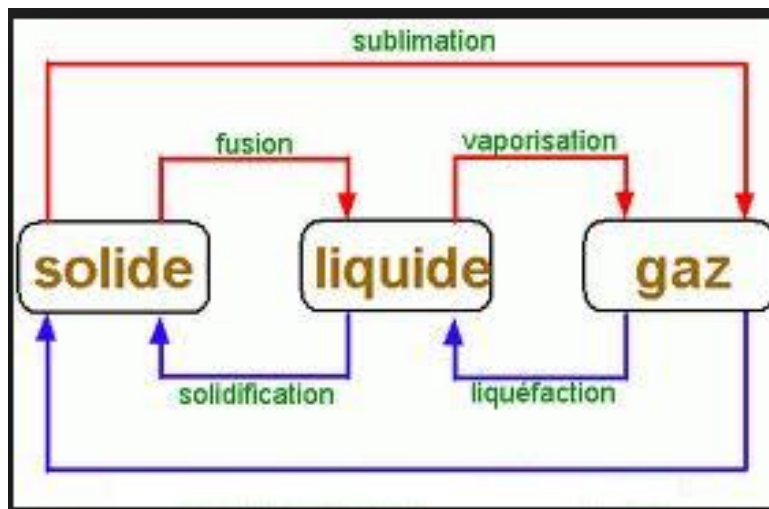


Fig 1.14: Schéma représente les différentes transitions de phases

- Le diagramme de phase (pression, température) montrant les domaines d'existence de trois phases (solide, liquide, gaz). On note deux points particuliers : le point triple T_t à la jonction des trois domaines, le point critique (p_C ; T_C) point d'arrêt à la frontière entre domaines liquides et gaz. En tournant autour du point critique, on peut passer continûment de la phase liquide à la phase gazeuse sans transition discontinue.

L'exemple fondamental le plus connu d'une transition de phase est celui de l'eau et ses diverses phases : solide (glace), liquide, gaz (vapeur) qu'on peut distinguer dans l'expérience quotidienne (figure(1.15)). Les transitions d'une phase à une autre qu'un changement de température permet d'observer sont très familières :

- congélation (décongélation) : transition solide-liquide.

- ébullition (condensation) : transition liquide-gaz.
- sublimation : transition solide-gaz.

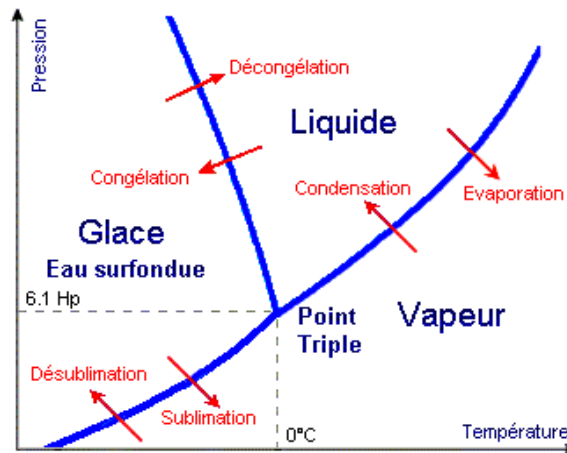


Fig 1.15: Diagramme de phase des différents changement d'état de l'eau.

1.9 Transition ferromagnétisme-paramagnétisme

La plupart des matériaux peuvent exister sous différentes phases[4]. Chacune de ces phases se caractérise par des différentes propriétés macroscopiques, fonction d'un ensemble de paramètres intensifs tels que la température, la pression, le champ électrique ou magnétique. Une transition de phase est un phénomène spectaculaire, qui correspond à une transformation qualitative et quantitative des propriétés macroscopiques d'un système thermodynamique. Ce qui caractérise ces transitions, c'est le changement qualitatif, la discontinuité des propriétés : une petite variation d'un paramètre (température, pression ...) déclenche une modification qualitative et spectaculaire et permet de passer d'une phase à une autre.

On parle alors de transition de phase[4]. Celle-ci s'accompagne de changements de propriétés tels que :

- un réarrangement structural du réseau cristallin.
- le changement de comportement magnétique : ferro/para au point de Curie.

Un exemple générique de transition de phase est observé dans les matériaux ferromagnétiques. Ce sont des matériaux qui présentent une aimantation permanente en l'absence de champ magnétique extérieur. Ce ferromagnétisme s'observe dans certains métaux comme le fer, le cobalt et le nickel. Si l'on chauffe un matériau ferromagnétique au-dessus d'une température critique T_c , le ferromagnétisme disparaît pour faire place au paramagnétisme. Et si l'on refroidit cette matière sous T_c , une aimantation spontanée peut à nouveau réapparaître. La température critique s'appelle la température de Curie. Pour représenter une

transition ferromagnétique-paramagnétique, on trace la magnétisation \mathbf{M} du matériau en fonction de la température \mathbf{T} . Sous \mathbf{T}_c , la magnétisation est différente de zéro et peut être négative ou positive selon l'orientation moyenne des moments magnétiques microscopiques. Pour $\mathbf{T} > \mathbf{T}_c$, la magnétisation s'annule. En traversant la température de Curie T_c , la magnétisation ne présente pas de saut. Par contre, on observe une divergence de la susceptibilité magnétique χ , c'est à dire une divergence de la dérivée première de \mathbf{M} .

On a donc la loi de Curie-Weiss :

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{C}{|T - T_C|} \quad (1.9)$$

où:

\mathbf{M} est l'aimantation et \mathbf{H} est le champ induit.

1.10 Classification des transitions de phase

Le domaine des transitions de phase connaît une diversité extrêmement riche. C'est pourquoi est apparue, très tôt, la nécessité d'apporter une certaine classification dans cette diversité. Tout naturellement, les transitions de phase étant caractérisées par leurs singularités thermodynamiques, c'est par la nature de ces singularités qu'on a, tout d'abord, tenté d'effectuer cette classification. Mais, avec l'évolution historique de la physique statistique et de la thermodynamique, plusieurs façons de discuter ces singularités ont été proposées. Ces différentes classifications traduisent l'évolution conceptuelle des méthodes d'études des transitions de phase[4].

La plus ancienne classification est due à Ehrenfest (elle est de nature thermodynamique). Elle repose sur l'analyse des singularités du potentiel thermodynamique. L'ordre d'une transition de phase est donnée par l'ordre de la dérivée à partir de laquelle la fonction thermodynamique n'est plus continue. Une transition de phase de premier ordre est donc caractérisée par la discontinuité de la première dérivée de la fonction thermodynamique, par exemple l'énergie interne. Pour une transition de deuxième ordre, c'est la deuxième dérivée qui est discontinue.

En suite, la deuxième classification est apparue, avec L.D. Landau, la notion très importante de brisure spontanée de symétrie, qui correspond à une classification différente. Il a conçu une théorie permettant de décrire ces transitions de phase qualitativement en fonction d'un paramètre d'ordre \mathbf{m} .

Enfin, les méthodes du groupe de renormalisation appliquées aux phénomènes critiques des transitions de phase, a permis de distinguer les transitions où la longueur de corrélation diverge de celle-ci reste finie. Il faut souligner que ces différentes classifications ne se recouvrent pas exactement. Mais toutes, évidemment, présentent leur intérêt propre[4].

1.10.1 Classification d'Ehrenfest (1880-1933)

En 1933, Paule Ehrenfest (1880-1933) a été introduit la classification des transitions de phases. Et reposant sur les propriétés de l'enthalpie libre \mathbf{G} et de ses dérivées. Inspiré par la découverte du point lambda " λ " dans la transition de phase l'Hélium 4(4He_2), Ehrenfest proposa de classer les transitions en fonction des discontinuités des dérivées de l'enthalpie libre \mathbf{G} [10]. Ainsi; on distingue deux types de transition de phase : transition du premier ordre et transition du second ordre.

-Les transitions de premier ordre selon Ehrenfest sont celles dans lesquelles la dérivées première de l'enthalpie libre par rapport a une variable thermodynamique est discontinue[10]. Comme pour la fusion de la glace, la vaporisation de l'eau, et toute les autres transitions d'un corps pur usuel loin d'un point critique. Dans la majorité des cas, il y a discontinuité de l'entropie ($\mathbf{S}=-\partial\mathbf{G}/\partial\mathbf{T}$) et ces transitions sont alors accompagnées d'une chaleur latente de changement d'état. C'est pour cela on dit que la transition de phase du premier ordre étant une transition associée a une chaleur latente.

-Les transitions du deuxième ordre sont celle dans lesquelles le dérivées premières de l'enthalpie libre sont continues, mais la dérivée seconde est en revanche discontinue[10]. Au cours de cette transition, le passage d'une phase à une autre se fait de façon continue. Par exemple dans le cas de la transition de phase entre l'état ferromagnétique et l'état paramagnétique.

-les transitions d'ordre \mathbf{n} sont celles dans les quelles la dérivée **n-ième** est discontinue. Alors que les dérivées d'ordres inférieur sont continues[10].

La condensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait bosonique est ainsi un exemple de transition du troisième ordre au sens d'Ehrenfest. Un cas extrême est la transition de Kosterlitz-Thouless qui est d'ordre infini.

Formule d'Ehrenfest:

La formule d'Ehrenfest est donné par la relation suivante:

$$\left(\frac{dP_{1\rightarrow 2}}{dT}\right) = \frac{\alpha^2 - \alpha^1}{\chi_T^2 - \chi_T^1} \quad (1.10)$$

avec :

\mathbf{T} , température de changement d'état (en kelvins, K) ;

$\mathbf{P}_{1\rightarrow 2}$, pression de changement d'état à la température \mathbf{T} (en pascals, Pa) ;

\mathbf{V} , Volume molaire commun aux deux phases à l'équilibre à la température \mathbf{T} et sous la pression $\mathbf{P}_{1\rightarrow 2}$ (en m^3/mol) ;

α^1 et α^2 coefficients de dilatation isobares du corps pur respectivement dans les phases 1 et 2 à la température \mathbf{T} et sous la pression \mathbf{P} (en K^{-1})

χ_T^1, χ_T^2 , coefficients de compressibilité isotherme du corps pur respectivement dans les phases à la température \mathbf{T} et sous la pression \mathbf{P} (en Pa^{-1}) ;

1.10.2 Classification de Landau (1908-1968)

Une notion très féconde pour classer les transitions fut introduite par L. D. Landau (1937), qui remarqua que le passage d'une phase à l'autre, lors d'une transition sans chaleur latente, s'accompagnait d'un changement de symétrie. A ce changement de symétrie, Landau associa la notion de paramètre d'ordre. Cette grandeur physique, de caractère extensif, que nous noterons généralement Ψ est nulle dans la phase la plus symétrique et non nulle dans la phase la moins symétrique, elle représente la différence qualitative essentielle entre les différentes phases. Cela signifie en particulier qu'il doit s'annuler pour la transition de phase liquide-gaz au point critique, puisqu'une distinction entre les deux phases n'y est plus possible. Dans ce cas, par exemple, la différence de masse volumique $\Psi = \Delta\rho = \rho_l - \rho_g$ constitue un paramètre d'ordre adapté, ainsi que (pour un nombre fixé de particules) la différence de volume ou la différence d'entropie.

On peut aussi parfois définir un paramètre d'ordre (mais pas toujours) pour certaines transitions avec chaleur latente. C'est le cas par exemple du titanate de Baryum : le paramètre d'ordre de la transition para ferroélectrique est la polarisation diélectrique. En effet, l'apparition d'une polarisation diélectrique dans la phase basse température brise la symétrie d'invariance par rotation de la phase haute température. A température donnée, les transitions de phase se produisent pour des changements de paramètres externes comme le volume, le champ magnétique, etc. C'est pourquoi on décrit souvent les transitions de phases à l'aide de diagrammes, où l'on trace le paramètre externe concerné en fonction du paramètre d'ordre. [11]

Par contre, pour certaines transitions avec chaleur latente non nulle, il est impossible de définir un paramètre d'ordre. C'est le cas, par exemple, pour les transitions entre variétés polymorphes du soufre ou la transition liquide-gaz : au point critique (ou dans le domaine

de coexistence) la compressibilité ainsi que la capacité thermique et le coefficient de la dilatation thermique divergent ; de plus la différence de masse volumique entre les phases gazeuse et liquide s'annule. En raison de la divergence de la capacité thermique il est difficile d'atteindre l'équilibre thermique au voisinage du point critique. Ainsi, dans le cas d'une transition solide-liquide, il est possible de définir un paramètre d'ordre (les composantes de Fourier $\rho_{\mathbf{q}}$ de la densité où \mathbf{q} est un vecteur du réseau réciproque du solide), parce que la symétrie de translation continue a été brisée par l'apparition d'un réseau, mais il n'est pas possible de définir un paramètre d'ordre dans le cas d'une transition liquide-gaz, puisque ces deux phases ont les mêmes éléments de symétrie. La notion de paramètre d'ordre permet de classer les transitions. On distingue deux types de transitions [11] :

a- Les transitions sans paramètre d'ordre : les groupes de symétrie des deux phases sont tels qu'aucun n'est strictement inclus dans l'autre. Ces transitions sont toujours du premier ordre au sens d'Ehrenfest.

b - Les transitions avec paramètres d'ordre : le groupe de symétrie de la phase la moins symétrique (phase ordonnée) est un sous groupe du groupe de symétrie de la phase la plus symétrique (phase désordonnée). Si le paramètre d'ordre est discontinu au point de transition, on dit que la transition est du premier ordre; si au contraire le paramètre d'ordre est continu, on dit que la transition est du second ordre (figure 1.16) [11].

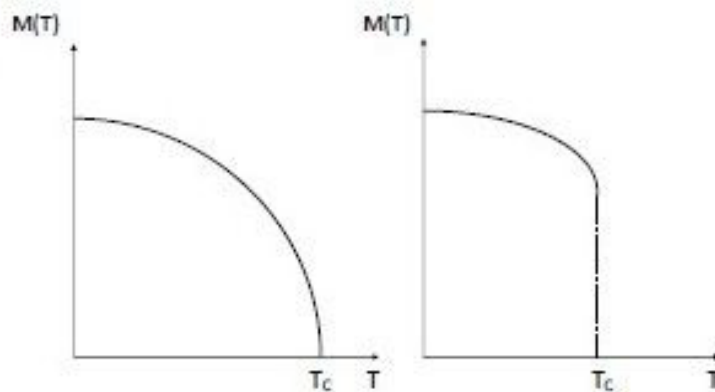


Fig 1.16: Comportement du paramètre d'ordre m à la transition du second et du premier ordre.

1.11 les phénomènes critiques

Un phénomène critique est un phénomène associé à une transition de phase du deuxième ordre d'un système thermodynamique. La plupart de ces phénomènes proviennent d'une

divergence de la longueur de corrélation (en) ou d'un ralentissement de la dynamique. Les phénomènes critiques présentent des relations d'échelle entre différentes grandeurs, une forme d'universalité et un comportement fractal.

Le comportement critique diffère de l'approximation du champ moyen, valable en dehors des transitions de phase, qui néglige les corrélations parce que lorsque le système approche du point critique, les corrélations deviennent de plus en plus importantes.

Après 1960, des nombreux de travaux attribués et consacrés à l'étude des phénomènes critiques ont révélé l'existence de ressemblances frappantes dans le comportement de systèmes physiques très différents [12]. L'essentiel à retenir des résultats expérimentaux obtenus est que les comportements du paramètre d'ordre, de la capacité thermique massique et de la susceptibilité relatives au paramètre d'ordre sont, sauf dans le cas des supraconducteurs, très différents des comportements prévus par la théorie de Landau. Cela met en évidence le rôle fondamental des fluctuations du paramètre d'ordre[12].

1.11.1 L'exposant critique

Lors d'une transition de phase de deuxième ordre, au voisinage du point critique, les systèmes physiques singuliers ont des comportements universels, on les représente en lois de puissance de $[T_0 - T]$. Chaque système est ainsi caractérisée par **un exposant critique** [12].

Si \mathbf{h} désigne le paramètre intensif conjugué du paramètre d'ordre, suivant une nomenclature introduite par M. E. Fisher, on pose, pour la capacité thermique massique à \mathbf{h} constant, respectivement[12] :

si $T > T_0$:

$$C_b \simeq (T - T_0)^{-\alpha} \quad (1.11)$$

et si $T < T_0$:

$$C_b \simeq (T_0 - T)^{-\alpha'} \quad (1.12)$$

avec:

α est un exposant critique et $\alpha' = -\alpha$

pour le paramètre d'ordre, si $\mathbf{h} = \mathbf{0}$:

$$\eta \simeq (T_0 - T)^\beta \quad (1.13)$$

avec:

β est un exposant critique .

pour la susceptibilité isotherme relative au paramètre d'ordre, respectivement:

pour $T > T_0$:

$$\chi_r \simeq (T - T_0)^{-\gamma} \quad (1.14)$$

et pour $T < T_0$:

$$\chi_T \simeq (T_0 - T)^{-\gamma'} \quad (1.15)$$

où :

γ, γ' sont des exposants critiques de sens inverser : $\gamma' = -\gamma$

Ces divers exposants ne sont pas indépendants. On a par exemple, l'inégalité (G. S. Rushbrooke) :

$$\alpha' - 2\beta - \gamma' \geq 2 \quad (1.16)$$

qui est une conséquence immédiate de la relation thermodynamique :

$$C_b - C_\eta = T \left(\frac{d\eta}{dT} \right)^2 \chi^{-1} \quad (1.17)$$

Lorsque on transpose la formule classique, on trouve $(C_P - C_V)$. En 1963, J. W. Essam et M. E. Fisher ont suggéré que l'inégalité devait en fait être une égalité[12].

Bernard Widom réussit à établir cette relation en formulant l'hypothèse qu'au voisinage d'un point critique la partie singulière de l'énergie libre (c'est-à-dire l'énergie qui détermine les exposants critiques) est donnée par la relation suivante :

$$F(T, \eta) = (T - T_0)^{2-\alpha} f \left(\frac{\eta}{(T - T_0)^\beta} \right) \quad (1.18)$$

par conséquent la partie singulière de l'énergie libre est une fonction homogène généralisée de l'écart de température $(T - T_0)$ et du paramètre d'ordre η . Elle ne dépend que de deux exposants α et β , choisis de façon à ce qu'ils coïncident avec les exposants critiques de même nom[12].

1.11.2 Exemples de quelques exposants critiques

Tous les exposants sont présentés de manière à être positifs ou nuls. on s'entend par exemples[12]:

-L'exposant α :

Quand la chaleur spécifique ($C=\partial E/\partial T$) diverge au point critique avec $\mathbf{h}=\mathbf{0}$:

$$C \sim |\varepsilon|^\alpha$$

En remarque que la divergence est présente des deux côtés de la transition.

-L'exposant β :

Il décrit la manière avec laquelle le paramètre d'ordre dans une petite région tend vers 0 quand la température augmente vers la température critique, en gardant toujours $\mathbf{h}=\mathbf{0}$ pour $\varepsilon > 0$:

$$m \sim (\varepsilon)^\beta$$

Rappelons que $\mathbf{m}=\mathbf{0}$ pour $\varepsilon > 0$.

-L'exposant η :

Juste au point critique, on a $\xi = \infty$ et la fonction de corrélation perd sa décroissance exponentielle pour avoir asymptotiquement une décroissance en loi de puissance. L'exposant η caractérise cette loi de puissance (au point critique, c'est-à-dire $\varepsilon = 0$ et $\mathbf{h}=\mathbf{0}$)

$$G(r) \sim |r|^{2-d-\eta}$$

avec: \mathbf{d} est la dimension du système, c'est à dire 3 dans le monde physique.

Notez qu'il n'y a aucune raison a priori de supposer comme on l'a fait que le comportement critique d'une quantité soit le même à gauche ou à droite de \mathbf{T}^C ; on a utilisé implicitement les résultats de la théorie d'échelle. Si on décide de ne pas faire cette hypothèse et que l'on veut distinguer l'exposant à basse température de l'exposant haute température, on ajoute habituellement un prime aux noms des exposants pour le comportement basse température; on peut écrire par exemple:

pour $\varepsilon > 0$:

$$C \sim (\varepsilon)^{-\alpha}$$

et pour $\varepsilon < 0$:

$$C \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'}$$

1.12 conclusion

Le magnétisme s'implante aujourd'hui dans toutes les domaines technologiques, il a une grande importance dans notre vie quotidienne, Les applications concrètes du magnétisme sont nombreuses. La plupart des moteurs électriques rotatifs ou linéaires, ainsi que les alternateurs et les dynamos sont des dispositifs qui tirent profit de l'électromagnétisme. Dès 1821-1822 les physiciens britanniques Michael Faraday et Peter Barlow construisent des prototypes de moteurs électriques et, quinze ans plus tard, l'inventeur américain Thomas Davenport fait breveter le premier appareil commercialisable[12]. Les transformateurs électriques sont des machines où deux circuits sont magnétiquement couplés. Quand il découvre le phénomène de l'induction magnétique en 1831, Faraday fabrique en fait le premier transformateur. De nombreuses améliorations postérieures ont donné naissance aux divers types de transformateurs utilisés maintenant. En outre Les matériaux magnétiques sont de précieux supports d'information ; les bandes magnétiques ont été le moyen privilégié d'enregistrer des informations analogiques ou numériques pendant des années ; les informations y sont stockées grâce à l'état de polarisation de particules d'oxyde de fer dans un substrat souple. Les disques durs, composant essentiel des ordinateurs, sont des disques recouverts d'une couche magnétique où on peut enregistrer des données[12].

2

Modèles théoriques usuels

2.1 Les méthodes exactes

La physique est l'archétype de la science exacte. Dans ce domaine on utilise plusieurs méthodes exacte pour la résolution des problèmes difficiles, nous sitons par exemple:

2.1.1 La méthode de Monté Carlo

Définition et intérêt

la simulation de Monte-Carlo est un outil statistique pour estimer la moyenne d'une variable aléatoire (en utilisant des techniques probabiliste), où une méthode pour calculer des intégrales de plus grandes dimensions, par exemple le calcul d'une surface ou d'un volume[13]. Ils sont également couramment appliqués en physique des particules, où la simulation probabiliste peut être utilisée pour apprécier la forme du signal ou la sensibilité du détecteur. La comparaison des données mesurées avec cette méthode peut révéler des propriétés inattendues, par exemple de nouvelles particules[14].

Cette simulation permet d'utiliser une approche statistique du risque dans la décision financière. Il consiste à isoler un certain nombre de variables clés du projet, telles que la rotation ou la marge, et à lui affecter une distribution de probabilité. Pour chacun de ces facteurs, un grand nombre de nuages aléatoires sont effectués dans les distributions de probabilité précédemment identifiées, afin de trouver la probabilité de chacun des résultats[14].

La méthode de **MC** à vu pendant la fin de la seconde guerre mondiale, essentiellement dans le cadre du projet américain Manhattan concernant le développement de l'arme nucléaire(construction de la première bombe atomique). Cette épisode correspond également à

la fabrication des premiers ordinateurs. Ce projet étant été classé comme un secret défense, il est difficile de savoir exactement qui parmi ses pionniers : Von Neumann, Ulam, Métropolis a proposé le nom de "Monte-Carlo"(MC). Quoi qu'il en soit, ce terme fait référence aux jeux de hasard : la capitale de la principauté de Monaco, avec ses casinos, ayant dès cette époque une solide réputation dans la société mondaine internationale[14].

La structure du programme standard de la simulation de **MC** peut être résumée par trois principales étapes figure(2.1)

L'application de l'algorithme de Métropolis au modèle se fait de la manière suivante :

-On part de la configuration initiale.

-On choisit de façon aléatoire un site sur le réseau de spin.

-On calcule la différence d'énergie entre les deux configurations.

-Si cette différence est négative ou nulle, le spin choisi évolue de façon aléatoire vers un des autres états possibles. Dans le cas contraire l'ancienne configuration est gardée pour une autre séquence.

L'algorithme de la figure(2.1) récapitule les différentes étapes vues précédemment:

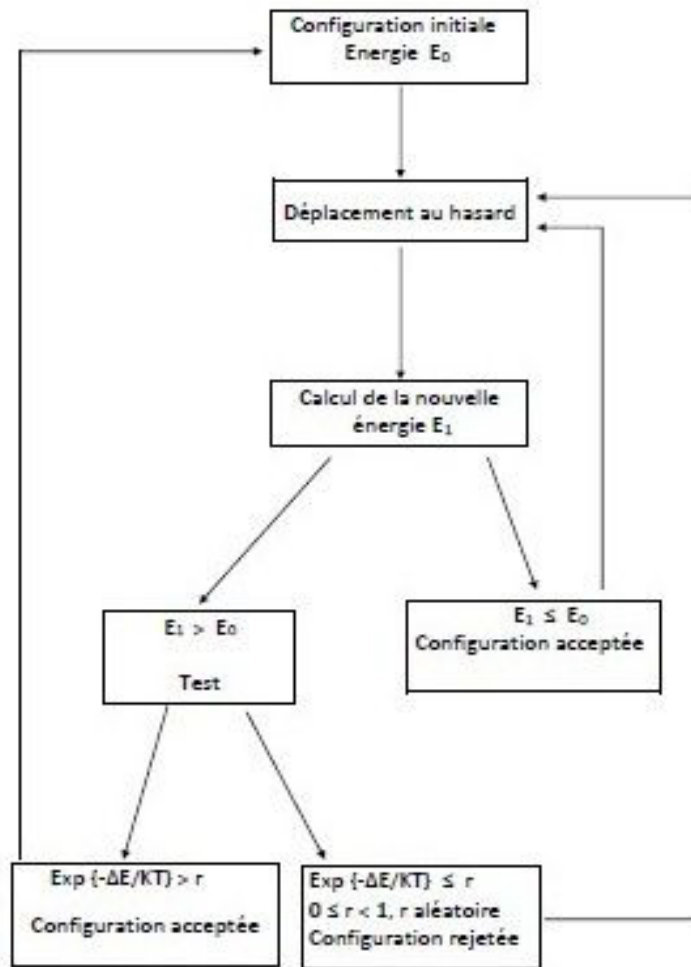


Fig 2.1: schéma de l'algorithme standard de la méthode de Monte-Carlo

Domaines d'application

La simulation de Monte-Carlo présente le double avantage d'être simple et facile d'utilisation et de pouvoir être appliquée à un très large éventail de problèmes et dans des plusieurs domaines[13]. Elle est utilisée en:

Finance: pour déterminer quand lever une option sur un bien financier ; en assurance, pour évaluer le montant d'une prime ;

Biologie: pour étudier les dynamiques intra et intercellulaires ;

Physique nucléaire: pour connaître la probabilité qu'une particule traverse un écran ;

Télécommunications: pour déterminer la qualité de service ou de façon générale pour déterminer la fiabilité d'un système, sa disponibilité ou son temps moyen d'atteinte de la défaillance;

Médecine: par exemple la simulation d'un ensemble des photons arrivant sur une tumeur cancéreuse;

Mathématique: pour l'estimation d'une intégrale multidimensionnelle.

Physique statistique: pour la loi de Boltzmann.

Pour cela, il faut cependant poser le problème, le modéliser de sorte que la quantité à rechercher s'exprime comme l'espérance d'une variable aléatoire \mathbf{X} , notée $\mathbf{E}(\mathbf{X})$. Une variable aléatoire est le résultat d'une expérience soumise au hasard ; son espérance est schématiquement ce que l'on s'attend à trouver en moyenne si l'on répète l'expérience un grand nombre de fois. Trouver cette modélisation est très probablement la tâche la plus complexe. Dans certains cas, la quantité à calculer est naturellement une espérance, par exemple la moyenne du nombre de clients dans une file d'attente quand les temps d'arrivée et de traitement sont aléatoires. Mais la méthode peut également être utilisée pour estimer une quantité purement déterministe, par exemple une surface ou une intégrale, en construisant artificiellement une variable aléatoire pour se ramener au calcul d'une moyenne.

Principe de la méthode

Pour illustrer la méthode de **MC** en va prendre un exemple standard. Supposons qu'on veut calculer la surface délimitée par une courbe fermée désordonnée (voir la figure (2.2)). Pour cela, on trace un rectangle ou un carré englobant notre courbe puis, on dispose des points de façon aléatoire dans le rectangle (voir figure (2.3)). On remarque que certains points tombent dans la surface, et il y en a d'autres qui tombent à l'extérieur.



Fig 2.2: exemple d'une courbe fermée non uniforme.

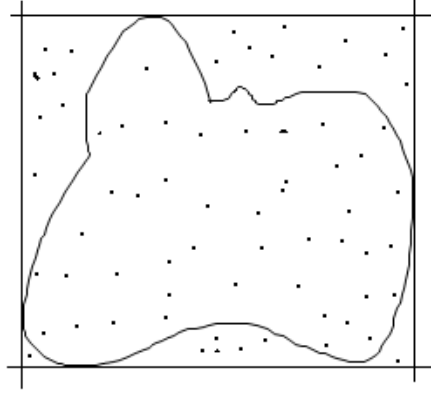


Fig 2.3: Distribution uniforme d'un nombre N de point dans notre rectangle

La surface qu'on veut déterminer se donne simplement et approximativement par le rapport:

$$S = A \cdot \frac{N_0}{N} \quad (2.1)$$

Avec:

A représente la surface de rectangle.

N le nombre total de points.

N_0 le nombre de points situant dans la surface. C-à-d, elle est proportionnelle au pourcentage des points situés dans la surface qui représente la probabilité pour qu'un point soit entouré par la courbe fermée.

On obtient un bon résultat si on dispose un très grand nombre de points. Or, on peut écrire:

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} A \cdot \frac{N_0}{N} \quad (2.2)$$

Avec:

A représente la surface de rectangle.

N le nombre total de points.

N_0 le nombre de points situant dans la surface. C-à-d, elle est proportionnelle au pourcentage des points situés dans la surface qui représente la probabilité pour qu'un point soit entouré par la courbe fermée.

Si la façon de distribution des points aléatoires est uniforme, alors on dit qu'on a choisi une loi uniforme de distribution, et si on favorise une région par rapport l'autre, la loi est dite non uniforme et elle suit une loi parmi les autres lois non uniformes comme la loi exponentielle, de Gauss, . . . etc. Dans notre cas, on utilise une loi uniforme.

2.1.2 La méthode de la matrice de transfert

Cette dernière section met le point sur les matrices de transfert qui sont très utilisées pour résoudre les modèles de spins classiques. L'idée de base est d'écrire la fonction de partition en terme d'une matrice appelée matrice de transfert. Les propriétés thermodynamiques du modèle sont ensuite entièrement décrites par les valeurs propres de la matrice. En particulier, à la limite thermodynamique l'énergie libre par spin dépend exclusivement de la plus grande valeur propre et de la longueur de corrélation. La méthode de la matrice de transfert s'avère très simple pour obtenir la solution exacte du modèle de spin unidimensionnel possédant un nombre fini de sites voisins et un nombre fini d'états de spin. Cette méthode s'utilise également dans l'étude des modèles bidimensionnels exactement solubles. Cependant, pour les dimensions supérieures, l'analyse des matrices infinies-dimensionnelles nécessite des techniques mathématiques extrêmement sophistiquées[15].

La matrice de transfert

Dans un champ magnétique, le modèle d'Ising unidimensionnel est l'exemple explicite qui permet de configurer la matrice de transfert. L'hamiltonien (1.12) devient[21] :

$$\mathbf{H} = -\mathbf{J} \sum_{i=0}^{N-1} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{h} \sum_{i=0}^{N-1} \mathbf{S}_i \quad (2.3)$$

avec: $\mathbf{h} = g \cdot \mu_B$

À des raisons de commodité, nous considérons des conditions aux limites périodiques qui s'identifient comme $\mathbf{S}_N \equiv \mathbf{S}_0$. Le choix de ces conditions devient inutile dans la limite thermodynamique, $N \rightarrow \infty$.

La fonction de partition est donnée par :

$$Z = \sum_{\{S\}} \exp [\beta \mathbf{J} (\mathbf{S}_0 \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 + \dots + \mathbf{S}_{N-1} \mathbf{S}_0) + \beta \mathbf{h} (\mathbf{S}_0 + \mathbf{S}_1 + \dots + \mathbf{S}_{N-1})] \quad (2.4)$$

où $\{S\}$ représente la trace sur tous les états possibles du système, qui est la somme sur $\mathbf{S}_i = \pm \mathbf{1}$ pour tous les spins \mathbf{S}_i . Une caractéristique importante de l'équation(2.4) réside dans le fait qu'elle peut être représentée par un produit de matrices et réorganisée en produits de termes dépendants seulement des paires de plus proches voisins :

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{[\beta \mathbf{J} \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_1 + \beta \mathbf{h} (\mathbf{S}_0 + \mathbf{S}_1)/2]} \cdot e^{[\beta \mathbf{J} \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 + \beta \mathbf{h} (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)/2]} \dots e^{[\beta \mathbf{J} \mathbf{S}_{N-1} \mathbf{S}_0 + \beta \mathbf{h} (\mathbf{S}_{N-1} + \mathbf{S}_0)/2]} \quad (2.5)$$

En terme matricielle, nous avons :

$$Z = \sum_{\{S\}} T_{0,1} T_{1,2} \dots T_{N-1,0} \quad (2.6)$$

où:

$$T_{i,i+1} = e^{\beta \mathbf{J} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \beta \mathbf{h} (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1})/2} \quad (2.7)$$

sont les éléments d'une matrice \mathbf{T} dont les lignes sont marquées par les valeurs de $\mathbf{S}_i = 1$ et $\mathbf{S}_i = -1$ alors que les colonnes sont marquées par $\mathbf{S}_{i+1} = 1$ et $\mathbf{S}_{i+1} = -1$. Pour le modèle considéré, \mathbf{T} prend la forme explicite :

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}$$

L'équation(2.6) est facile à simplifiée, en notant qu'elle peut s'énoncer comme le produit matriciel s'écrivant en termes des composantes de la matrice \mathbf{T} . En prenant la trace sur les spins $i = 1, 2, \dots, N - 1$ qui correspond au produit suivant :

$$Z = \sum_{S_0=\pm 1} (T^N)_{0,0} \quad (2.8)$$

de telle façon que seule la sommation sur \mathbf{S}_0 des éléments diagonaux de \mathbf{T}^N reste. La trace de \mathbf{T}^N en termes de valeurs propres λ_i de \mathbf{T} donne :

$$Z = \sum_i \lambda_i^N \quad (2.9)$$

L'équation(2.9) est représente un résultat général malgré le fait qu'elle est obtenue à partir du modèle d'Ising unidimensionnel. La méthode de la matrice de transfert est utile quand la fonction de partition prend la forme de l'équation (2.5) et s'exprime alors comme un produit matriciel.

Les systèmes de spins classiques unidimensionnels avec des interactions de portée finie est l'une des applications les plus connues de la méthode de la matrice de transfert. Dans ce cas, la taille de la matrice de transfert dépend du nombre d'états de spin par site et de la portée des interactions. conséquemment, le modèle être plus compliqué, l'usage du formalisme dépend du fait que la matrice de transfert puisse être diagonalisée analytiquement ou numériquement.

2.1.3 Les verres de spin

On se propose dans ce travail de dériver des résultats sur des systèmes désordonnés que sont les verres de spins. En pratique, un verre de spins canonique est un système amorphe consti-

tué d'une matrice non-magnétique dopée par des impuretés magnétiques en concentration connue, Ces verres de spins sont les phases amorphes les plus étudiées. Un système est dit amorphe quand il apparaît figé dans un état sans ordre à longue distance[17]. L'avantage d'étudier les verres de spins tient au fait que l'origine du désordre est bien identifiée et contrôlable expérimentalement. De plus, le degré de liberté est connu et simple : c'est le spin de chaque impureté. Dans ces verres ce sont les interactions spin-spin qui sont aléatoires. Depuis les années 1970, l'essentiel des efforts théoriques a été réalisé dans le cadre des spins d'Ising. Un résultat majeur pour un verre de spins classique a été établi au début des années 1980 par Parisi [16], dans le cadre du champ moyen du modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK) [17]. Il est à noter que toute la complexité des verres de spins vient de la frustration : comme on le verra plus tard, les couplages entre spins sont aléatoires en signe et en valeur absolue, car l'interaction entre ces spins est de type RKKY (pour Ruderman-Kittel-Kasaya-Yosida). C'est une interaction indirecte d'échange entre deux impuretés magnétiques dans un réseau non magnétique. On peut montrer que le couplage lui-même possède une oscillation spatiale (appelée oscillation de Friedel) qui induit une interaction dont le signe dépend de la distance. Le couplage entre deux spins est donc soit ferromagnétique soit antiferromagnétique, et ceci de manière aléatoire, car la longueur d'onde de ces oscillations est de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi λ_F du cristal, et celle-ci est très faible devant la distance entre deux impuretés[17].

2.2 Les méthodes approximatives

2.2.1 La méthode du champ moyen de Weiss

En 1905, Weiss s'appuyant sur la théorie de Langevin, introduit l'idée d'un pseudo champ magnétique qui nommé \langle le champ moléculaire (ou champ moyen) \rangle afin de palier la difficulté d'utilisation de l'hamiltonien d'Ising[18].

Dans cette hypothèse, le couplage de spin entre l'atome i et son plus proche voisin j_i est assimilé à l'action d'un champ moyen d'intensité égale à la valeur moyen du spin.

Une telle hypothèse est mathématiquement équivalente à remplacer le spin \mathbf{S}_{j_i} de l'atome plus proche voisin j_i par sa valeur moyenne $\langle \mathbf{S}_{j_i} \rangle$:

$$\mathbf{S}_{j_i} \longrightarrow \langle \mathbf{S}_{j_i} \rangle$$

Pour mieux mettre en relief l'effet de cette hypothèse, réécrivons l'hamiltonien d'Ising en faisant apparaître la contribution des sites plus proches voisins :

$$\mathcal{H} = - \frac{J}{z} \sum_i \mathbf{S}_i \sum_{j_i=0}^z \mathbf{S}_{j_i} \quad (2.10)$$

avec z est le nombre de coordination du réseau.

Mathématiquement parlant, l'hypothèse de Weiss stipule que :

$$\mathbf{S}_{j_i} \equiv \langle \mathbf{S}_{j_i} \rangle \quad (2.11)$$

Dans cette approche, l'hamiltonien est réduit à la forme simplifiée suivante :

$$\mathcal{H}_W = -\mathbf{J} \cdot \mathbf{z} \cdot \mathbf{M}_0 \sum_i \mathbf{S}_i \quad (2.12)$$

En posant $\mathbf{B}_W = \mathbf{J} \cdot \mathbf{z} \cdot \mathbf{M}_0$, avec \mathbf{B}_W est appelé « champ moyen locale de Weiss », l'hamiltonien devient :

$$\mathcal{H}_W = -\mathbf{B}_W \sum_i \mathbf{S}_i \quad (2.13)$$

Sous cette forme d'écriture, l'hamiltonien(2.13) est identique à celui décrivant un gaz paramagnétique de N spins soumis au champ magnétique \mathbf{B}_W . Sa fonction de partition est identique à celle établie par Langevin. Elle s'écrit donc :

$$\mathcal{Z}_W = 2^N \cosh^N [\beta(T) \cdot \mathbf{B}_W] \quad (2.14)$$

En présence d'un champ magnétique extérieur \mathbf{B}_{ext} , cette relation devient :

$$\mathcal{Z}_W = 2^N \cosh^N [\beta(\mathbf{T}) \cdot \mathbf{B}_{tot}] \quad (2.15)$$

avec: $\mathbf{B}_{tot} = (\mathbf{B}_W + \mathbf{B}_{ext})$.

L'aimantation totale du système de Weiss s'écrit :

$$\mathbf{M}(\mathbf{B}_{ext}, \mathbf{J}; \mathbf{T}) = \tanh [\beta(\mathbf{T})(\mathbf{z} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{M} + \mathbf{B}_{ext})] \quad (2.16)$$

L'équation(2.16) est self consistante par rapport à la variable $\mathbf{M}(\mathbf{T})$. Ses solutions peuvent être obtenues par la méthode graphique.

Quand la température tend vers \mathbf{T}^C (température de curie) , l'aimantation \mathbf{M} spontanée se comporte comme :

$$\mathbf{M}_0(\mathbf{T}) \propto (\mathbf{T} - \mathbf{T}^C)^{\frac{1}{2}} \quad (2.17)$$

Le comportement critique dans cette théorie est similaire à celui de la théorie de Landau

2.2.2 La théorie du champ moyen effectif corrélé

Cette méthode est basée sur l'hamiltonien suivante[19][20]:

$$\mathcal{H}(\{\vec{s}_k\}) = - \sum_{i,j} \sum_{\gamma} \mathbf{J}_{ij}^{\gamma} \cdot S_i^{\gamma} \cdot S_j^{\gamma} \quad (2.18)$$

avec: $\gamma \equiv (x, y, z)$.

Elle impose une corrélation entre les spins de la forme :

$$S_j^{\gamma} \longrightarrow \langle S_j^{\gamma} \rangle + A_{ji}^{\gamma} (S_i^{\gamma} - \langle S_i^{\gamma} \rangle) \quad (2.19)$$

où A_{ji}^{γ} est le facteur statistique de corrélation dépendant de la température.

On peut écrire cette hypothèse par :

$$S_j^{\gamma} - \langle S_j^{\gamma} \rangle \longrightarrow A_{ji}^{\gamma} (S_i^{\gamma} - \langle S_i^{\gamma} \rangle) \quad (2.20)$$

Sous cette transformation, l'hamiltonien(2.18) devient :

$$\mathcal{H}_{CEFT} = - \sum_{i,j} \sum_{\gamma} \tilde{\Delta}_{ij}^{\gamma} (S_i^{\gamma})^2 - \sum_i \sum_{\gamma} B_i^{\gamma} \cdot S_i^{\gamma} \quad (2.21)$$

avec :

$$\tilde{\Delta}_{ij}^{\gamma} = \mathbf{J}_{ij}^{\gamma} A_{ji}^{\gamma} \quad \text{et} \quad B_i^{\gamma} = \sum_j \mathbf{J}_{ij}^{\gamma} \langle S_i^{\gamma} \rangle [1 - A_{ji}^{\gamma}].$$

B_i^{γ} est une composante du champ effectif corrélé sur l'atome i . En posant $A_{ji}^{\gamma} = 0$, on trouve l'hypothèse centrale de la théorie du champ moléculaire de Weiss. Remarquons que le champ effectif corrélé est non nul si seulement si le facteur de corrélation est différent de l'unité .

Ainsi, cette approche conduit à un hamiltonien similaire à celui d'un gaz paramagnétique de spins. La seule différence ici est que le champ moyen dépend d'un facteur de corrélation.

Dans l'approximation des liaisons fortes et en présence d'une corrélation isotrope, ce hamiltonien devient plus simple, soit :

$$\mathcal{H}_{CEFT} = -AN_b(S)^2 \sum_i \sum_\gamma B_{i,cor}^\gamma \cdot S_i^\gamma \quad (2.22)$$

où: $B_{i,cor}^\gamma$ est la composante du champ effectif corrélé.

Le premier terme étant constant, alors le système sera décrit par un hamiltonien de forme :

$$\mathcal{H}_{CEFT} = - \sum_i \vec{B}_{i,cor} \cdot S_i \quad (2.23)$$

avec le champ corrélé $\vec{B}_{i,cor}$ s'écrit :

$$\vec{B}_{i,cor} = (B_i^x, B_i^y, B_i^z) \quad (2.24)$$

Les grandeurs thermodynamiques peuvent être calculées facilement et sans difficulté avec tel hamiltonien qui globalement est associé à un gaz paramagnétique soumis à un champ $\vec{B}_{i,cor}$.

3

Étude du modèle de Blum-Emery-Griffiths à spin (3/2) antiferromagnétique sur réseau triangulaire

3.1 Introduction

Le modèle Blume-Emery-Griffiths (BEG) est un modèle en treillis simple qui est l'un des rares modèles simples qui donne à la fois la transition de phase du premier ordre et du second ordre. Depuis son introduction en 1971 en tant que modèle d'Ising qui capture le diagramme de phase du mélange He^3 et He^4 , le modèle a été largement étudié et généralisé. Une généralisation récente du modèle par Loois. Il est proposé d'être intéressant à des études de mélanges d'atomes froids. Le modèle BEG original et la généralisation proposée sont examinés. Les modèles en treillis ont joué un rôle très important et essentiel dans l'expansion des frontières de la mécanique statistique et des mathématiques physique. Des techniques telles que le groupe de renormalisation, L'expansion en série et les transformations de la dualité ont été développées pour étudier la richesse des diagrammes de phase modélisée par des modèles relativement simples. La discrétisation des modèles en treillis facilite également les simulations numériques par des techniques (par exemple, les algorithmes de Monte Carlo) [22].

Le modèle Blume-Emery-Griffiths est décrit par un Hamiltonien qui s'appel \mathcal{H}_{BEG} .

D'autre part, nous proposons dans ce chapitre une formulation exacte du système spin-3/2 BEG sur un réseau triangulaire antiferromagnétique à l'état fondamental puis on introduit la méthode du champ moyen en écrivant les équations self consistante.

3.2 Définition de modèle du Blume-Emery-Griffiths (BEG)

Le BEG a joué un rôle très important dans la mécanique statistique. Il a été utilisé pour l'étude d'une variété de systèmes physiques et chimiques durant ces dernières années. L'étude de ses caractéristiques magnétiques a suscité une attention considérable car a été proposé par Blume, Emery et Griffiths. Il est l'un des rares et simples modèles les plus courant pour présenter, dans sa version du champ moyen, la transition de phases de premier et de deuxième ordre. Cette dernière étant due à une séparation de phase. En raison de cette propriété, le modèle a été largement étudié pour de nombreux systèmes, à servir les mélanges He³-He⁴, microémulsions, les alliages de semi-conducteur...ect[6].

Le modèle BEG permet de modéliser des mélanges binaires dont une des composantes a un degré de liberté de type superfluide ou magnétique .

Blume, Emery et Griffiths ont choisi de modéliser le étudié mélange par un système de spin sur réseau. Ce modèle permet l'apparition d'un ordre ferromagnétique qu'ils interprètent comme la superfluidité. Cette identification étant purement phénoménologique.

Le modèle de BEG est un modèle général du modèle classique d'Ising qui décrit par l'hamiltonien suivante :

$$\mathcal{H}_{BEG} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (3.1)$$

Où:

Les spins prennent les valeurs $S_i = 0; \pm 1$, et les deux premières sommes sont effectuées sur toutes les paires de voisins les plus proches.

J et **K** sont respectivement les couplages bilinéaires et biquadratiques.

Δ est le terme de champ de cristal.

H est un champ externe (optionnel) favorisant une orientation des spins.

Ce hamiltonien peut être utilisé pour décrire les phases liquides, solides et vapeurs d'un gaz en treillis. Il correspond à un système physique où dans chaque cellule en treillis une particule peut occuper l'un des deux sites de sous-réseau, identifiés par les directions de

spin $\mathbf{S} = \pm 1$. Le système est considéré comme un système magnétique dilué dans lequel le nombre de sites vacants varie en fonction de la Température (\mathbf{T}). Ce modèle peut également décrire la phase de mélange superfluide He^{-4} ($\mathbf{S}_i = \pm 1$) et du fluide normal He^{-3} ($\mathbf{S}_i = 0$) à basse température. Autrement dit, une aimantation spontanée nulle pour compléter le désordre spatial, tandis que les états avec $\langle \mathbf{S} \rangle > 0$ sont interprétés comme ordonnés. Les plus proches voisins sont interagissent avec l'énergie potentielle $V = - (K + J)$ sont sur le même sous-réseau, sinon $V = - (K - J)$.

3.3 Introduction du spin 3/2

L'étude des terres rares et des mélanges des fluides ternaires [23], a eu pour e et l'introduction du modèle à spin-3/2. Le DyVO_4 est l'un des composés des terres rares dont la formule générale est RVO_4 avec une structure tétragonale sous une température ambiante. Il s'ordonne de façon antiferromagnétique dans le plan basal à $\mathbf{T}_N = 3:0 \text{ K}$. Des considérations des théories des groupes ont montré que cet ordre n'est possible que si le DyVO_4 a déjà subit un changement de symétrie. Une analyse aux rayons \mathbf{X} [24] et des mesures de la chaleur spécifique [25], à basse température, ont montré l'existence de deux transitions de second ordre. L'une à $14^\circ\text{K}(\mathbf{T}_D)$ où le DyVO_4 subit un changement de symétrie: de la symétrie tétragonale à une faible symétrie. Cette distorsion cristallographique est appelée transition de Jahn-Teller. L'autre transition apparait à $3^\circ\text{K}(\mathbf{T}_N)$ de la phase orthorhombique vers la phase antiferromagnétique. Nous devons noter que seul le quadruplet $\mathbf{S} = 3/2$ participe dans les deux transitions: à \mathbf{T}_D il est séparé en deux doublets et à \mathbf{T}_N en quatre singlets.

Les modèles de spin nous ont permis une meilleure compréhension des transitions de phase dans les systèmes magnétiques. Introduits pour la première fois par Ising, en 1929, pour étudier les transitions magnétiques, ce n'est qu'en 1944 que la solution exacte a été trouvée pour un réseau bidimensionnel.

Dans ce chapitre, nous étudierons le modèle de BEG à spin-3/2 à interaction antiferromagnétique avec le premier voisin. Nous donnerons, en premier lieu, les résultats de l'étude de l'état fondamental qui donne, bien sur, les configurations des phases les plus stables. Ensuite, nous passerons à donner les différents diagrammes de phase obtenus à partir de l'étude du modèle.

3.4 Les Terres rares

Le lanthane et les lanthanides forment une série de quinze éléments métalliques de propriétés chimiques très semblables, que l'on désigne aussi plus communément sous le nom, d'ailleurs impropre, de "terres rares" (parce qu'on les a d'abord extraits à l'état d'oxydes ressemblant aux alcalino-terreux, à partir de minéraux peu courants). Dans la classification périodique des éléments, les lanthanides occupent, avec le lanthane, une seule et même case du tableau; cette particularité résulte de leur structure électronique, qui est identique pour les couches extérieures et ne diffère d'un élément au suivant que par addition d'un électron dans la couche profonde **4f** (d'où le nom d'éléments **4f** que leur donnent parfois les physiciens).

Les terres rares[26] ont des propriétés magnétiques exceptionnelles, leur aimantation à saturation est très supérieure à celle du fer, cependant l'ordre magnétique n'existe qu'à des températures inférieures à celles de l'ambiante. A température ambiante, les terres rares sont donc paramagnétiques ou diamagnétiques. Afin d'augmenter les températures de Curie et d'utiliser les terres rares pour leurs propriétés magnétiques, on a cherché à associer les terres rares avec des éléments comme le fer, le cobalt ou le nickel présentant de bonnes propriétés magnétiques et des températures de Curie élevées ($T_C > 400-500 \text{ C}$). Cela a débouché sur les alliages terres rares/métaux de transition et sur l'industrialisation des aimants samarium/cobalt ($T_C > 700 \text{ C}$) dont les produits d'énergie volumique sont supérieurs à $0,16 \text{ MJ/m}^3$ pour des champs coercitifs de l'ordre de 800 kA/m contre des valeurs ne dépassant pas $30 \text{ à } 50 \text{ kJ/m}^3$ pour les ferrites ou les alliages **Al-Ni-Co**. Cela a permis une miniaturisation mise à profit dans de nombreux dispositifs (par exemple dans l'audiovisuel pour la mise au point d'écouteurs miniatures avec les baladeurs).

3.5 Les différents réseaux utilisés

Dans la littérature, le nombre de réseaux étudiés est considérable d'où la nécessité d'un classement rigoureux en fonction des paramètres propriétaires tel que la longueur de la liaison, les angles entre plus proches liaisons, le nombre de coordination **z**, le type de polygones de la structures...etc. On classons les réseaux en fonction de leurs régularités dans un schéma simple : le nombre de sites possédant le même voisinage, la dimensionnalité **d**, le nombre de types de polygones, le nombre de types liaisons, le nombre d'angles différents.

En suite, nous allons classer les différents réseaux(unidimensionnels et bidimensionnels). Il existe un seul réseau unidimensionnel nommé "chaîne linéaire".

En dimensionnalité $d=2$, on trouve onze (11) réseaux réguliers appelés "réseaux archimédiens" dont la particularité est que tous les sites possèdent le même nombre de voisins et que toutes les liaisons sont identiques. Il n'y a pas d'autres réseaux bidimensionnels réguliers en ce sens en dehors de ces onze réseaux. Certains de ces réseaux ont des noms communs comme: les réseaux carrés, réseaux nids d'abeilles, réseaux triangulaires. Généralement, on utilise la notation de Grünbaum-Shephard [27]. Dans cette notation, le réseau carré est noté $(4^4) = (4,4,4,4)$, le réseau triangulaire est écrit par $(3^6) = (3,3,3,3,3,3)$ et le réseau nid d'abeille noté par $(6^3) = (6,6,6)$.

Dans cette convention, pour écrire un réseau, il est nécessaire de partir d'un site quelconque d'un réseau archimédiens et énumérer les différents polygones qui appartiennent ce site en suivant les sens des aiguilles de la montre, voir la figure (3.1):

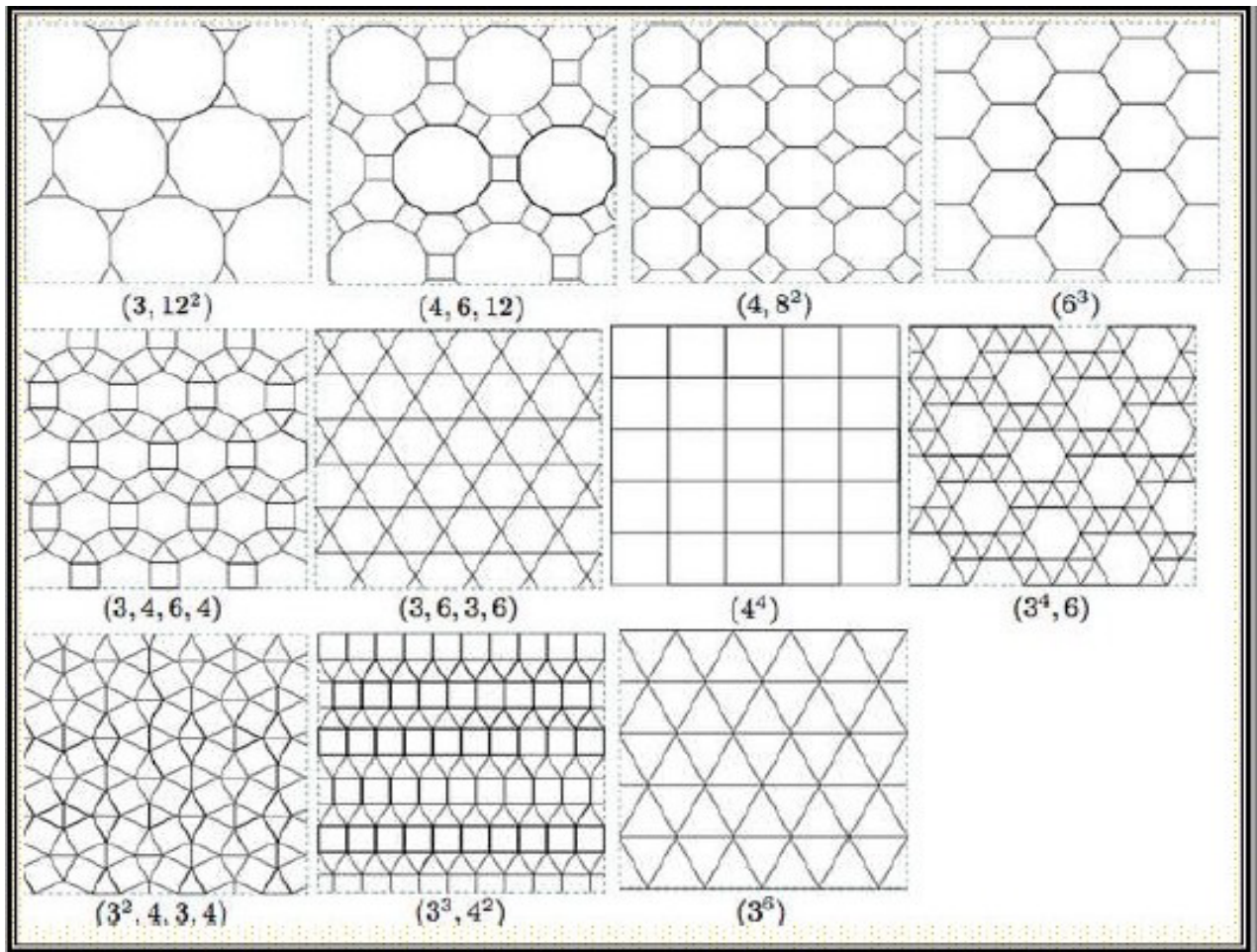


Fig 3.1: les onze réseaux archimédiens

3.6 Frustration

À la fin des années 70, le concept de frustration fut introduit par Villain[28] et Toulouse[29] dans le contexte des verres de spins et marque le début de l'étude des systèmes frustrés.

Un système de spins est dit frustré quand aucune configuration ne peut satisfaire simultanément tout les couplages considérés. Ce type de système fourni un champ idéal de recherche de nouveaux états et propriétés de la matière. Notamment il a été trouvé pour ce type de système des phases exotiques telles que : liquide de spins, la résonance de la bande de valence (RVB) ou encore glaces de spin. Dans la physique de la matière condensée l'étude des systèmes frustrés est l'un des domaines de recherche les plus actifs.

On peut trouver deux origines de la frustration d'un système :

- la compétition entre différents couplages (voir figure (a)),
- et la géométrie (voir figure (b)).



Fig 3.2: (a): Frustration due to the competition between several couplings, $J_1 > 0$ et $J_2 > 0$. (b): Frustration géométrique, $J > 0$.

Une voie, très explorée à l'heure actuelle est celle de la frustration géométrique dont l'archétype est le réseau triangulaire antiferromagnétique : comme on le voit sur la figure ci-dessous, il est impossible dans cette géométrie de satisfaire simultanément les trois interactions antiferromagnétiques (AF). Un des spins est forcément... frustré !

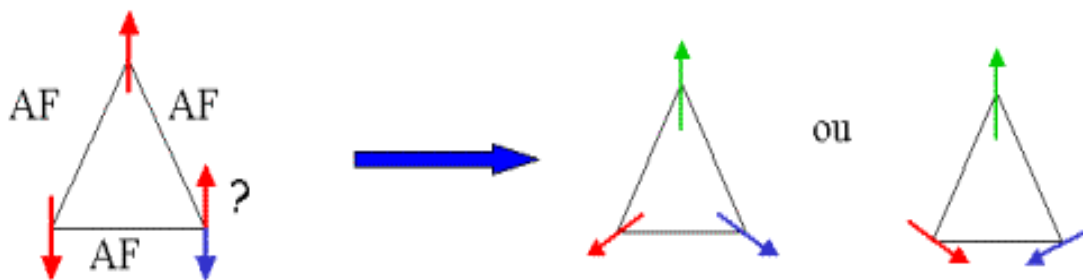


Fig 3.3: le réseau triangulaire antiferromagnétique frustré.

3.7 Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 anti-ferro frustré sur un réseau triangulaire avec le premier voisin

3.7.1 L'hamiltonien du modèle

Dans ce chapitre, nous avons étudiés le modèle de Blume-Emery-Griffiths, défini au chapitre précédent, à interactions antiferromagnétiques avec le premier plus proche voisin. Nous introduisons le spin-3/2 avec un réseau triangulaire frustré soumis d'un champ externe. Nous faisons référence à une étude de M. Zukovic[30] du même modèle mais à spin-1. Ce modèle est donné par l'Hamiltonien suivant :

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - j_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 - D \sum_i S_i^2 - h \sum_i S_i \quad (3.2)$$

avec:

$$S_i = \pm 3/2, \pm 1/2.$$

J_1 et J_2 sont respectivement les paramètres d'interaction bilinéaire et biquadratique.

D est le champ cristallin et h est le champ externe.

L'énergie par plaquette E_P se calcule de la façon suivante :

$$E_P = -\frac{J_1}{3}(S_a S_b + S_b S_c + S_c S_a) - \frac{J_2}{3}(S_a^2 S_b^2 + S_b^2 S_c^2 + S_c^2 S_a^2) - \frac{D}{3}(S_a^2 + S_b^2 + S_c^2) - \frac{h}{3}(S_a + S_b + S_c) \quad (3.3)$$

3.7.2 Diagramme de phases à l'état fondamental $T=0$

Au début, nous nous sommes intéressé aux calculs numériques des états fondamentaux (énergies des différentes configurations possibles) décrits par l'hamiltonien donné précédemment par l'équation(3.2). Ces états fondamentaux correspondent aux phases thermodynamiquement stables du modèle. Après les avoir comparé par paire nous avons eu les configurations ayant des énergies minimalis et nous les avons introduits dans le programme. Le calcul numérique, pour différentes valeurs du paramètre d'interaction J_2 en gardant $J_1 = -1$, nous a donné les phases les plus stables. Nous avons représenté les résultats sur des diagrammes de phase.

Pour obtenir les diagrammes de phase des états fondamentaux, nous avons décomposé le système en trois sous réseaux A, B et C car nous étudions un réseau triangulaire. Afin de calculé l'énergie par plaquette E_P donnée par la formule précédante(3.3), nous avons calculé

3.7. *Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 anti-ferro frustré sur un réseau triangulaire avec le premier voisin*

analytiquement l'égalité entre chaque phase et nous les avons introduits dans le programme python. Nous avons représenté les résultats sur des diagrammes de phase:

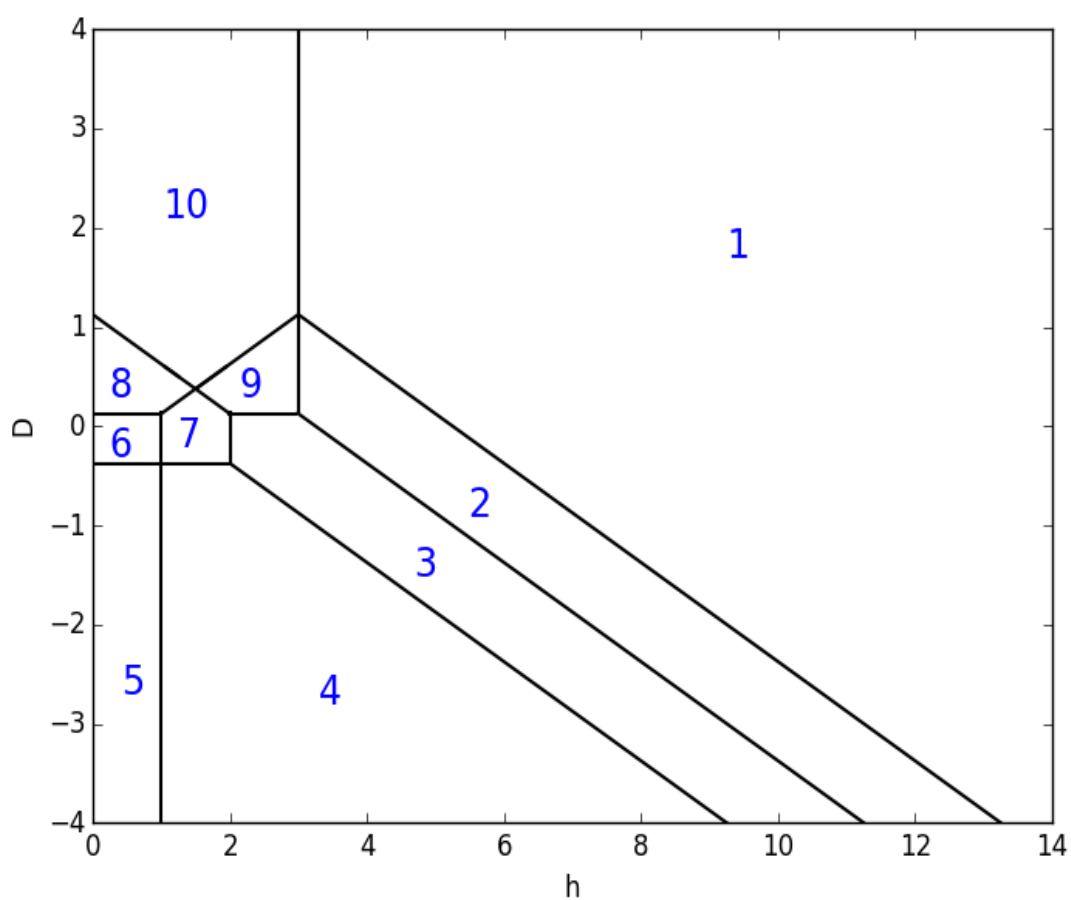


Fig 3.4: Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $|J_1|=1$ et $J_2 = -0.25$

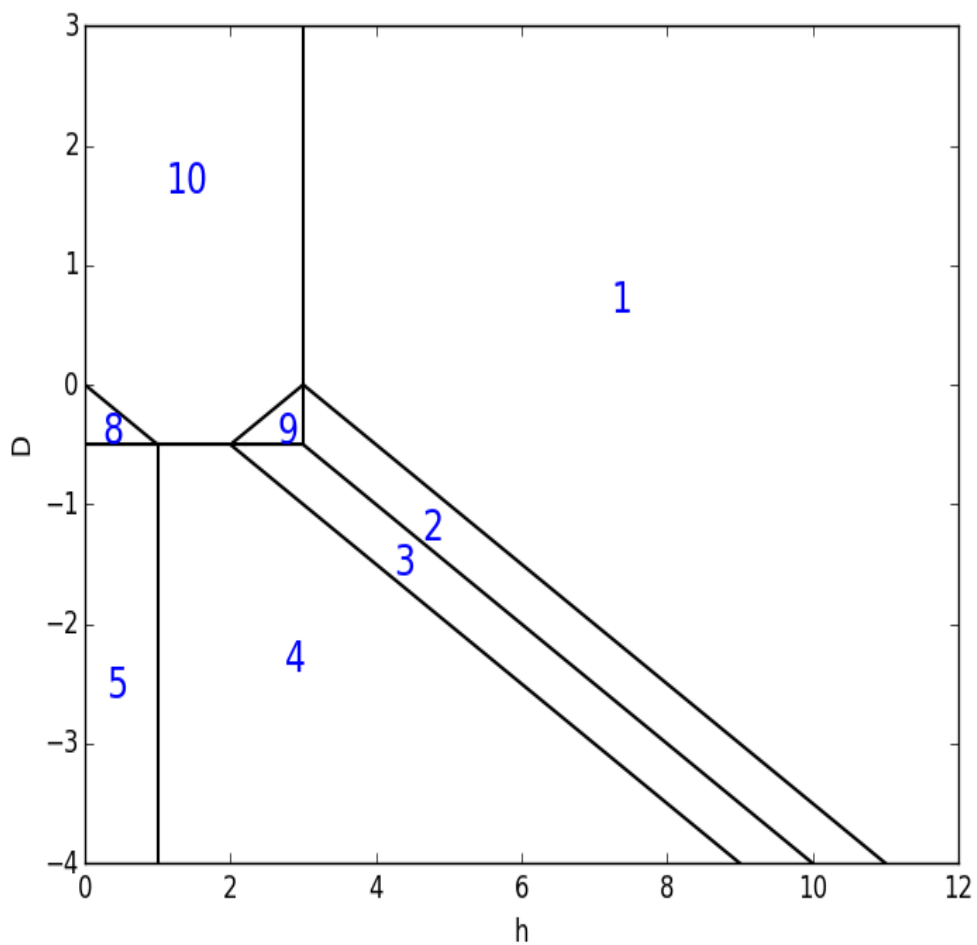


Fig 3.5: Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $|J_1|=1$ et $J_2=0$

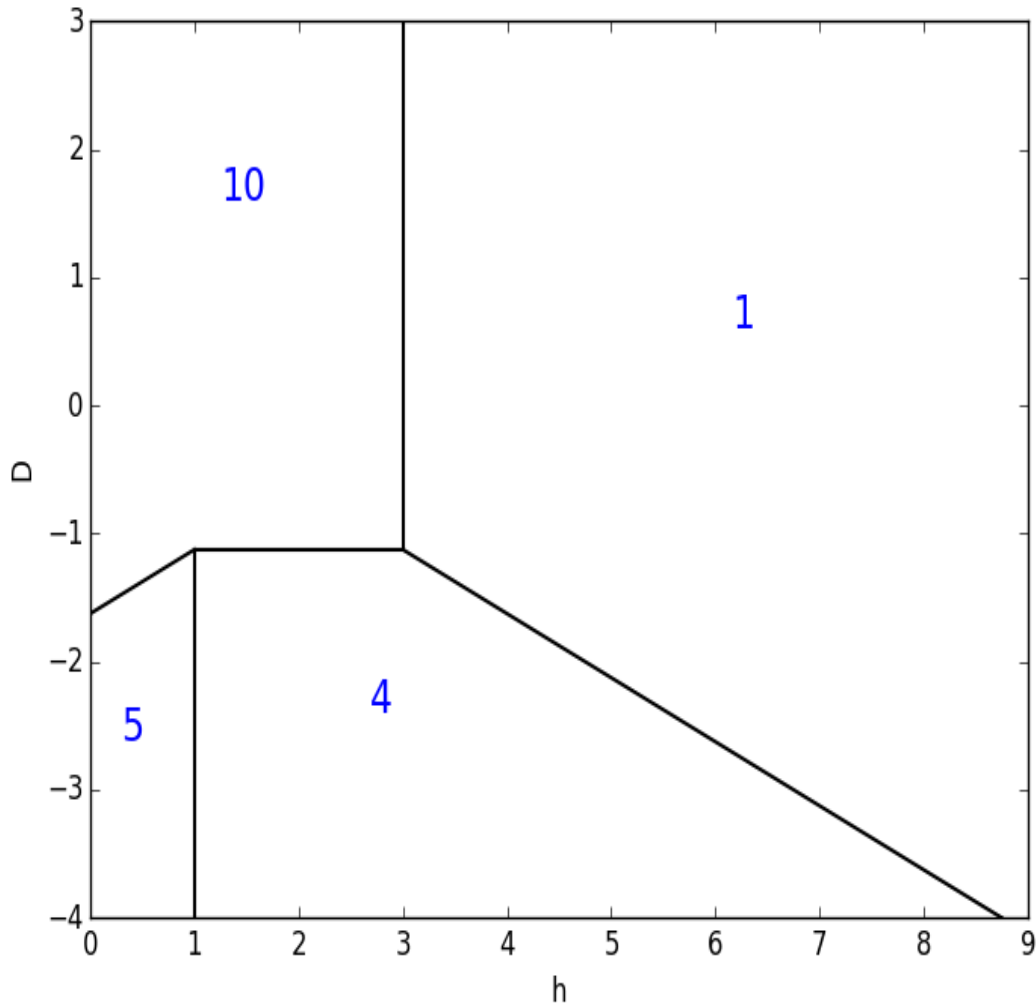


Fig 3.6: Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de BEG pour $|J_1|=1$ et $J_2=0.25$.

3.7.3 La méthode du champ moyen $T \neq 0$

Le modèle Blume-Emery-Griffiths (BEG) a été appliqué avec succès pour expliquer le comportement de différents systèmes physiques tels que les mélanges $\text{He}^3\text{-He}^4$.

Nous étudions l'effet du désordre désactivé sur le diagramme de phase de champ moyen d'une version du modèle BEG dans lequel les degrés de liberté d'orientation et de particules

3.7. Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 anti-ferro frustré sur un réseau triangulaire avec le premier voisin

sont explicitement introduits. Nous considérons l'hamiltonien suivant :

$$\begin{aligned}
H_0 = & -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^B - J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^C - J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^B S_j^C \\
& -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{B^2} - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{C^2} - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{B^2} S_j^{C^2} \\
& -D \left(\sum_{i \in A} S_i^{A^2} + \sum_{i \in B} S_i^{B^2} + \sum_{i \in C} S_i^{C^2} \right) - h \left(\sum_{i \in A} S_i^A + \sum_{i \in B} S_i^B + \sum_{i \in C} S_i^C \right)
\end{aligned} \tag{3.4}$$

avec: $\mathbf{S}_i = \pm 3/2, \pm 1/2$, \mathbf{J}_1 et \mathbf{J}_2 sont les paramètres d'interaction bilinéaire et biquadratique. \mathbf{D} est le champ cristallin et \mathbf{h} est le champ externe.

Le modèle de Blume-Emery-Griffiths se caractérise par deux paramètres d'ordre : l'aimantation \mathbf{m} et le moment quadripolaire \mathbf{Q} , définis respectivement par :

$$\begin{aligned}
\langle S_i \rangle &= m \\
\langle S_i^2 \rangle &= \mathbf{Q}
\end{aligned}$$

Le cas que nous étudions est un réseau triangulaire, c'est-à-dire que le réseau est divisé en trois sous-réseaux A, B et C, de sorte que tout site appartenant à A n'est entouré que par des sites appartenant à B et C. Pour comptabiliser la structure de trois sous-réseaux, nous avons besoin de six paramètres d'ordre :

$$\langle S_i^A \rangle = \mathbf{mA}; \langle S_i^B \rangle = \mathbf{mB}; \langle S_i^C \rangle = \mathbf{mC} \tag{3.5}$$

$$\langle S_i^{A^2} \rangle = \mathbf{QA}; \langle S_i^{B^2} \rangle = \mathbf{QB}; \langle S_i^{C^2} \rangle = \mathbf{QC} \tag{3.6}$$

Tel que:

$$m_A = \frac{\mathbf{T}_r S_i^A e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; m_B = \frac{\mathbf{T}_r S_i^B e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; m_C = \frac{\mathbf{T}_r S_i^C e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0} \tag{3.7}$$

$$\mathbf{QA} = \frac{\mathbf{T}_r S_i^{A^2} e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; \mathbf{QB} = \frac{\mathbf{T}_r S_i^{B^2} e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; \mathbf{QC} = \frac{\mathbf{T}_r S_i^{C^2} e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0} \tag{3.8}$$

Où $\beta = 1/K_B T$: T signifie la température absolue et K_B la constante de Boltzmann.

Et $H_{MF} = (H_{eff}^A + H_{eff}^B + H_{eff}^C)$, avec la valeur moyenne de H_{eff} est donnée par:

$$\begin{aligned}
H_{eff}^A &= [-h - J_1 Z_{AB} \langle S_i^B \rangle - J_1 Z_{AC} \langle S_i^C \rangle] \sum_{i \in A} S_i^A \left[-D - J_2 Z_{AB} \langle S_i^{B^2} \rangle - J_2 Z_{AC} \langle S_i^{C^2} \rangle \right] \sum_{i \in A} S_i^A \\
H_{eff}^B &= [-h - J_1 Z_{AB} \langle S_i^A \rangle - J_1 Z_{BC} \langle S_i^C \rangle] \sum_{i \in B} S_i^B \left[-D - J_2 Z_{AB} \langle S_i^{A^2} \rangle - J_2 Z_{BC} \langle S_i^{C^2} \rangle \right] \sum_{i \in B} S_i^B \\
H_{eff}^C &= [-h - J_1 Z_{AC} \langle S_i^B \rangle - J_1 Z_{BC} \langle S_i^C \rangle] \sum_{i \in C} S_i^C \left[-D - J_2 Z_{AB} \langle S_i^{B^2} \rangle - J_2 Z_{BC} \langle S_i^{C^2} \rangle \right] \sum_{i \in C} S_i^C
\end{aligned}$$

3.7. Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 anti-ferro frustré sur un réseau triangulaire avec le premier voisin

Avec: $\{Z_{AB}, Z_{BC}, Z_{AC}\}$ désigne le nombre de proche voisin.

Et Z_0 la fonction de partition, elle définie comme suite : $Z_0 = T_r e^{-\beta H_{MF}}$.

Puis on a l'énergie libre, elle est définie comme suite : $F = \ln Z_0 + \langle H - H_0 \rangle$.

3.7.4 Résultats Analytiques

Nous avons calculé analytiquement les aimantations m , les moments quadripolaires Q , la valeur moyenne de H_{eff} , et la fonction de partition Z_0 puis l'énergie libre pour chaque sous-réseau A et B et C et les résultats sont ci-dessous :

Pour l'aimantation m

$$m_A = \frac{\left[\begin{array}{l} 3 \sinh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \\ \sinh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \end{array} \right]}{\left[\begin{array}{l} 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \end{array} \right]} \quad (3.9)$$

$$m_B = \frac{\left[\begin{array}{l} 3 \sinh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \\ \sinh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \end{array} \right]}{\left[\begin{array}{l} 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \end{array} \right]} \quad (3.10)$$

$$m_C = \frac{\left[\begin{array}{l} 3 \sinh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \\ \sinh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \end{array} \right]}{\left[\begin{array}{l} 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \end{array} \right]} \quad (3.11)$$

Pour le moment quadripolaire Q

3.7. Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 anti-ferro frustré sur un réseau triangulaire avec le premier voisin

$$Q_A = \frac{\left[\begin{array}{l} \frac{9}{2} \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \\ \frac{1}{4} \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \end{array} \right]}{\left[\begin{array}{l} 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \end{array} \right]} \quad (3.12)$$

$$Q_B = \frac{\left[\begin{array}{l} \frac{9}{2} \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \\ \frac{1}{4} \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \end{array} \right]}{\left[\begin{array}{l} 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \end{array} \right]} \quad (3.13)$$

$$Q_C = \frac{\left[\begin{array}{l} \frac{9}{2} \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \\ \frac{1}{4} \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \end{array} \right]}{\left[\begin{array}{l} 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \end{array} \right]}$$

La fonction de partition Z_0 :

La résultat obtenue pour la fonction de partition Z_0 est donnée par :

$$Z_0 = \left[\begin{array}{l} 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \times \\ 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \times \\ 2 \cosh \left[\frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \\ 2 \cosh \left[\frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[-\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \end{array} \right] \quad (3.14)$$

la résultat de l'énergie libre F

$$F = \ln Z_0 + \left\langle \begin{array}{l} J_1 \left(\sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^B + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^C + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^B S_j^C + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \right) + \\ J_2 \left(\sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{B^2} + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{C^2} + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{B^2} S_j^{C^2} + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 \right) \end{array} \right\rangle \quad (3.15)$$

Conclusion

Dans l'esprit de contribuer à la compréhension des propriétés physiques des systèmes de spins sur réseaux, nous avons étudié un des modèles qui, ces dernières années ne cesse de susciter beaucoup d'attention en mécanique statistique, c'est le modèle de Blume-Emery-Griffiths en utilisant un système triangulaire avec sa particularité de frustration. Nous avons donné son hamiltonien de base et nous avons introduit le spin-3/2 avec tous les calculs des énergies des différentes phases pour nous permettre de construire les diagrammes de phase des états fondamentaux des différentes configurations. De nouvelles phases dégénérées sont apparues en faisant référence aux phases trouvées pour le spin-1. Nous avons également fait des calculs analytiques pour notre système à des températures différentes de zéro en utilisant une méthode approximative dite méthode du champ moyen. Nous avons calculé les paramètres d'ordre pour aboutir finalement aux équations self-consistantes.

Comme perspective immédiate de notre travail, nous pensons introduire ces équations trouvées par la méthode du champ moyen dans un programme en Fortran pour pouvoir étudier les propriétés magnétiques du système pour des températures finies.

Bibliographie

- [1] J-C. Collard réalisée en 1992, par Marc Schweizer, à La Croix Lotteau45230
CHATILLON-COLIGNY
- [2] Élie and Frédéric, Magnétisme et transitions en physique. France : s.n., 08 Mai 2004.
- [3] B. Hachi, contribution à l'étude de la température de Curie en ferromagnétisme, mémoire de Magister.univ.oran,2012.
- [4] M. Yezli , Etude numérique de quelques modèles de spin sur réseaux. Laboratoire Matériaux et Structures(LMS) BP, 13000, TLM –ALGERIE. 2016.
- [5] IUPAC, 1997, transition element, Compendium of Chemical Terminology [« Gold Book »], version corrigée en ligne : (2006-), 2e éd.
- [6] G. Roland. Génie électrique et électronique, (2005-2006 BACHELOR).
- [7] N. Boukherroub, Thèse de Doctorat, faculté UMBB, algérie : s.n., 2015.
- [8] É. Frédéric, Magnétisme et transitions en physique. France : s.n., 08 Mai 2004.
- [9] A. Belaid, Algorithme de Métropolis pour le model $\frac{1}{2}$ XY de Heisenberg à deux dimension. Mémoire de master.univ,Saida,2018.
- [10] S. Zriouel, Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone, thèse de Doctorat, UNIVERSITÉ MOHAMMED V-RABAT,sn le 12 Mars 2016.
- [11] N. Boccara, MATIÈRE (physique) - Transitions de phase. février 2017
- [12] B. Pire, Magnétisme (notions de base), Encyclopædia Universalis [en ligne], consulté le 25 avril 2019.

-
- [13] B. Tuffin. La simulation de Monte Carlo. Edition Hermès, Février 2010.
- [14] M. Roger, Méthodes de Monte Carlo, Service de Physique de l'Etat Condensé CEA Saclay. consulté le 1 mai 2019.
- [15] P. J. Baxter, Exactly solved models in statistical mechanics, Academic Press, London and San Diego, 1982.
- [16] G. Parisi, A sequence of approximated solutions to the s-k model for spin glasses. J.Phys.A,13 :L115-L121, 1980.
- [17] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Solvable model of a spin-glass. Phys. Rev. Lett.35 :1792-1796, 1975.
- [18] P.R. Weiss , L'Hypothèse du champ Moléculaire et de la Propriété Ferromagnétique, J.Phys.(France)6(1907)667
- [19] I. Chatterjee, Magnétique Properties of Layered Antiferromagnets, Phys.Rev.B 51(1995)3937
- [20] S. Mukhopodhyay and I. Chatterjee, Tricritical Behaviour in Correlated Effective Field Theory, Phys.Stat.Sol.(b)146 (1988) 717.
- [21] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher et M. E. J. Newman, The Theory of Critical Phenomena : An Introduction to the Renormalization Group, Oxford University Press,1992.
- [22] W. Chang Chung, Application of the Blume-Emery-Griffiths Model to Cold-Atom Mixtures Department of Physics , 02139, USA (Dated: May 18, 2015).
- [23] S. Krinsky and D. Mukamel, Phys. Rev. B 11 (1975) 399
- [24] A.H. Cooke, D.M. Martin and M.R. Wells, Solid State Communications, Vol. 09(1971) 519.
- [25] A.H. Cooke, D.M. Martin and M.R. Wells, Solid State Communications, Vol. 08(1970) 689.
- [26] A.H. Cooke, D.M. Martin and M.R. Wells, J. Phys.(Paris) C1 (1971) 488.

- [27] B. Grünbaum and G.C. Shephard, *Tellings and patterns* , (New York: Freeman W.H., 1987)
- [28] J. Villain. Spin glass with non-random interactions. *J. Phys. C : Solid State Phys.*, 10 :1717, 1977.
- [29] G. Toulouse. Theory of the frustration effect. 1. *commun. phys.*, 2 :115–119, 1977.
- [30] M. Zukovic, *Phys. lett. A* 376, 3649-3653 (2012).