

République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة الجيلالي 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 :

**Etude du diagramme de phase de l'état
fondamental du modèle Blume-Capel à
spin-3/2 à interaction avec second voisin**

Devant le jury composé de :

- M. YEZLI
- K. Redouia
- S. kouider akil

Encadreur
Examineur
Examineur

Présenté par :

- ✓ KOUIDER AISSA Assia
- ✓ HARAOUI Lamia

Année universitaire : 2019 / 2020

Remerciements

Louange à Dieu, qui nous a éclairé le chemin de la science et de la connaissance et nous a aidé à réaliser ce travail et nous accorde son succès.

Un remerciement très particulier revient à notre encadreur monsieur m. Yezli, docteur à l'université de Khémis Milliana, pour nous avoir proposé et dirigé ce sujet de mémoire. On tient également à le remercier pour son suivi et pour son énorme soutien et pour le fait qu'il n'a cessé de nous prodiguer tout au long de la période du projet.

Nous adressons aussi nos vifs remerciements aux membres des jurys k. Redouia et s. Kouider akil pour avoir bien voulu examiner et juger ce travail.

Enfin, nous tenons à remercier l'ensemble des enseignants du département et spécialement ceux de la physique théorique.

Kouider Aissa Assia

Je dédie ce modeste travail : à mes très chers, mère et père, et que Dieu me les garde. Je n'oublie non plus mes frères et soeurs, mon fiancé pour son soutien continu envers moi et tous ceux qui m'ont aidé de loin ou de près durant mes études.

Haraoui Lamia

Je dédie ce travail à ma famille, elle qui m'a doté d'une éducation digne, son amour a fait de moi ce que je suis aujourd'hui.

Particulièrement à mon père Mahieddine et ma mère et bien sur mon mari Mohammed Bessekri, pour le goût à l'effort qu'il a suscité en moi, de part sa rigueur.

À vous, mes soeurs Naziha et Aymène, que ce rapport soit le meilleur cadeau que je puisse l'offrir.

À vous mes frères qui m'avez toujours soutenu et encouragé durant mes années d'étude.

Table des matières

1	Notions générales sur le magnétisme des matériaux	9
1.1	Introduction	9
1.2	Comportement de l'aimantation	12
1.3	Anisotropie magnétique	15
1.4	Fonction de partition	15
1.5	limite thermodynamique	16
1.6	Susceptibilité magnétique	17
1.7	Classification des substances magnétiques	18
1.7.1	Diamagnétisme	18
1.7.2	paramagnétisme	18
1.7.3	Ferromagnétisme	20
1.7.4	Antiferromagnétisme	20
1.8	Terres rares	22
1.9	L'hamiltonien du système	24
1.10	Phénomènes critiques	24
1.10.1	Définition d'un exposant critique	25
1.10.2	Exemples de quelques exposants critiques	26
1.10.3	Singularités	26
1.10.4	Transitions de phase	27
1.10.5	Classification des transitions de phase	30

2	Méthode de Monte Carlo pour les modèles de spin sur réseaux	36
2.1	Introduction	36
2.2	Méthode de Monte-Carlo	37
2.3	Méthodes approximatives	40
2.3.1	Méthode du champ moyen de Weiss	43
2.3.2	Méthode du champ moyen effectif corrélé	43
2.4	Modèle de spin sur réseau	45
2.4.1	Modèle d'Ising	45
2.4.2	Modèle de Potts	46
2.4.3	Modèle de Blume-Emery-griffiths	47
2.4.4	Etude théorique du modèle BEG	48
2.4.5	Modèle de Blume-Capel	49
3	Etude du diagramme de phase de l'état fondamental du modèle BC à spin-3/2 à interaction avec second voisin	51
3.1	Définition	51
3.2	Modèles à spin-3/2	51
3.3	Etude du modèle de BC à spin-3/2 à interaction avec le second voisin	52
3.4	Résultats des simulations	53
3.4.1	Diagramme de phase à T=0	53
3.4.2	Discussions des résultats	54
3.4.3	Conclusion	54
4	Conclusion générale	57

Table des figures

1.1	Origine du magnétisme dans la matière	10
1.2	Les moments magnétiques élémentaires de mêmes sens dans les substances ferromagnétiques (a), de sens opposés mais de somme nulle dans les ferromagnétiques (b) et de sens opposés et de grandeur différente dans les ferrimagnétiques (c)	11
1.3	Moments magnétiques d'un matériau paramagnétique	13
1.4	Arrangement des moments magnétiques d'une substance ferromagnétique. Evolution de l'inverse de la susceptibilité en fonction de la température. .	21
1.5	Arrangement des moments magnétiques d'une substance antiferromagnétique. Evolution de l'inverse de la susceptibilité en fonction de la température.	22
1.6	Diagrammes de phase typiques pour des matériaux antiferromagnétiques. a) Pour un composé possédant une faible anisotropie. b) Pour un composé très anisotrope, le comportement est dit métamagnétique.	23
1.7	Diagramme (pression, température) montrant les domaines d'existence des phases (solid, liquide, gaz).	28
1.8	Diagramme (champ magnétique, température) pour un corps ferromagnétique.	29
1.9	Courbes d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique a différentes températures.	30
1.10	Illustration de la ligne de transition entre deux phases.	32
1.11	Comportement du paramètre d'ordre m à la transition continue (second ordre) et un saut d'aimantation (premier ordre) ordre.	35

2.1	schéma de l'algorithme standard de la méthode de Monte-Carlo.	39
2.2	Systeme d'Ising à deux dimensions où le spin central S_c interagit unique-		
	ment avec les 4 spins indicés 1, 2, 3 et 4	46
3.1	Diagramme de phase de l'état fondamental pour $ J_1 = 1$ et $ J_2 = 0.5$	55
3.2	Diagramme de phase de l'état fondamental pour $ J_1 = 1$ et $ J_2 = 1$	56
3.3	Diagramme de phase de l'état fondamental pour $ J_1 = 1$ et $ J_2 = 1.5$	56

Liste des tableaux

1.1	Susceptibilités magnétiques de quelques matériaux	17
1.2	Principaux exposants critiques	26
1.3	Récapitulatif des transitions de phase	31

Introduction générale

La physique statistique est une branche de la physique consacrée à l'étude des systèmes constitués d'un grand nombre d'éléments identiques ou tout au moins semblables. En d'autre terme c'est un cadre théorique pour décrire les systèmes avec de nombreux degrés de liberté là où la mécanique classique (Newton 1643-1727) devient trop difficile à utiliser. Pour désigner ce domaine de la physique, plusieurs noms ont été introduits. Au début, ce fut la thermodynamique, une approche macroscopique suivie par la mécanique statistique qui essaie de décrire le système par des lois probabilistes.

L'approche de la physique statistique est pertinente quand le nombre de ces constituants 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.

Ces informations mettent l'accent sur un aspect spectaculaire des phénomènes qu'étudie la physique statistique : le comportement global de l'ensemble des constituants 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 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 classifier ces phases.

L'étude des propriétés magnétiques des matériaux nécessite l'utilisation de méthodes de calcul et de simulation capables de sonder la matière à l'échelle atomique tout en tenant compte explicitement de la structure électronique des éléments chimiques. Les méthodes théoriques se révèlent être des outils de choix pour modéliser les matériaux à l'échelle

atomique voire électronique, et accéder de manière directe à un ensemble de données fondamentales comme les propriétés magnétiques des matériaux. Parmi ces méthodes théoriques, nous citons des méthodes approximatives telles que la théorie du champ effectif, et des méthodes exactes telles que la méthode de la matrice de transfert, très utilisé pour les modèles bidimensionnels et la méthode de Monte-Carlo...

Ce travail comporte trois chapitres suivis d'une conclusion générale. Nous allons définir le magnétisme et expliquer sa classification dans une première partie. On parlera de ses différentes propriétés, à savoir l'anisotropie et la susceptibilité sans oublier de définir l'énergie qui contient toutes les informations sur le système physique. On expliquera avec détails les transitions de phase, leur classification et les phénomènes critiques qui accompagnent une transition continue. Dans le deuxième chapitre, nous allons passer en revue les différentes méthodes utilisées dans la mécanique statistique. On va s'intéresser à l'étude de la méthode de Monte-Carlo comme méthode exacte et à quelques notions sur les méthodes approximatives. On parlera aussi dans cette partie de quelques modèles de spin sur réseau comme le modèle d'Ising classique, le modèle de Potts, le modèle de Blume-Emery-Griffiths et le modèle de Blume-Capel. Dans la dernière partie, nous allons parler de notre système physique proposé à l'étude qui est le modèle de Blume-Capel connu sous le nom abrégé : le modèle BC. Nous allons exposer notre travail et donner, bien sûr, les interprétations nécessaires. On terminera par une conclusion générale et les perspectives pour l'avenir.

Chapitre 1

Notions générales sur le magnétisme des matériaux

1.1 Introduction

Le magnétisme, un phénomène omniprésent dans notre environnement vu son grand usage dans la technologie moderne, ne cesse de nous surprendre par sa grande variété de phénomènes liés à l'émergence de nouveaux types de matériaux. IL trouve essentiellement son origine dans les propriétés des électrons . Leur état quantique de spin est responsable d'une première partie du magnétisme qu'on appelle souvent magnétisme de spin. Une deuxième partie vient du mouvement orbital des électrons autour du noyau de l'atome (magnétisme orbital) et également du magnétisme du noyau lui-même (magnétisme nucléaire) (figure 1.1), notamment mis à profit dans les techniques d'imagerie médicale par résonance magnétique nucléaire. Le magnétisme est donc produit par les charges électriques en mouvement. La force agissant sur ces charges, dite force de Lorentz, traduit la présence d'un champ magnétique.

Chaque atome peut être assimilé à un petit aimant porteur d'un moment magnétique élémentaire. Le spin du noyau est demi-entier si le nombre de masse est impair, nul si le nombre de masse et la charge sont pairs, et entier si le nombre de masse est pair et la charge impaire. De nombreux moments magnétiques peuvent, à une échelle plus impor-

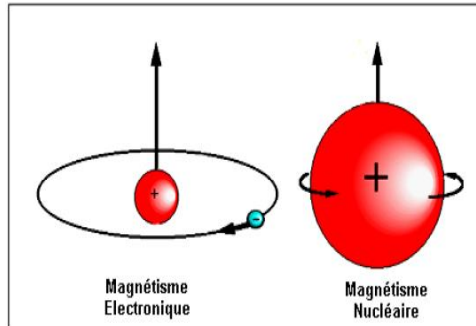


FIGURE 1.1 – Origine du magnétisme dans la matière

tante, constituer des domaines magnétiques dans lesquels tous ces moments sont orientés dans la même direction. Ces régions de l'espace sont séparées entre elles par des parois. Rassemblés, ces domaines peuvent eux-mêmes constituer un aimant à l'échelle macroscopique. De l'organisation de ces constituants élémentaires dépend la manifestation de différents types de magnétisme, associés traditionnellement à trois grandes familles de matériaux : ferromagnétiques, paramagnétiques et diamagnétiques (figure 1.2).

Les matériaux magnétiques sont à l'origine de nombreux dispositifs électromécaniques et électroniques, notamment les génératrices, les transformateurs, les moteurs électriques, les postes de radio ou de télévision, les téléphones, les ordinateurs et les appareils audio ou vidéo. Ils sont également des constituants indispensables dans une large gamme d'équipements industriels et médicaux.

Ce chapitre est consacré à l'étude détaillée du magnétisme microscopique, nous étudierons l'influence d'un champ magnétique externe, ensuite nous définirons la notion de la susceptibilité magnétique. Puis nous citerons les différents types des matériaux classés selon leur comportement magnétique. Nous allons nous intéresser aussi aux propriétés magnétiques des terres rares. Dans une deuxième partie, nous présenterons quelques concepts de base des transitions de phase tout en donnant leur classification puis quelques notions

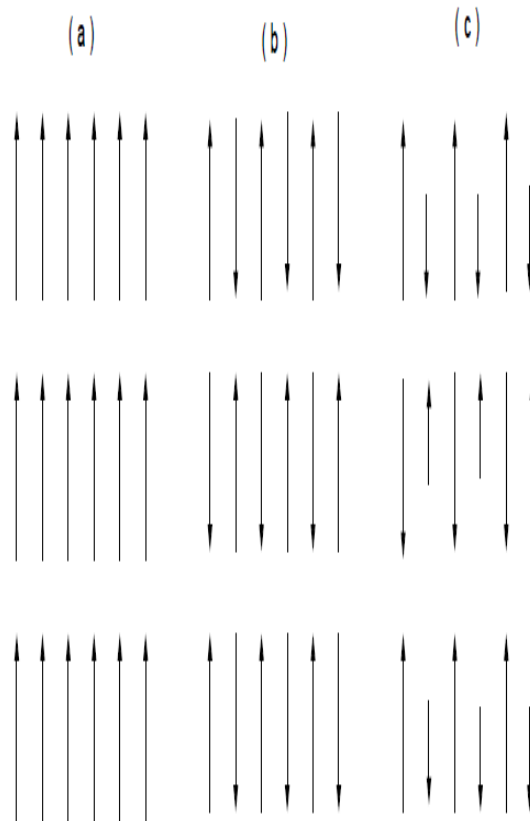


FIGURE 1.2 – Les moments magnétiques élémentaires de mêmes sens dans les substances ferromagnétiques (a), de sens opposés mais de somme nulle dans les antiferromagnétiques (b) et de sens opposés et de grandeur différente dans les ferrimagnétiques (c)

sur les phénomènes critiques liés à une transition continue.

1.2 Comportement de l'aimantation

L'aimantation est une grandeur physique caractéristique des substances magnétiques, prise dans beaucoup de travaux comme étant la plus représentative du magnétisme, bien que dans d'autres programmes de recherche, on considère la susceptibilité magnétique. Plusieurs facteurs internes ou externes peuvent avoir de l'influence sur les propriétés magnétiques des matériaux. Les excitations extérieures ayant des effets importants sur les milieux magnétiques sont surtout la température T à travers l'énergie thermique ($K_B T$) et le champ magnétique \vec{B} qui est une grandeur vectorielle mesurée à travers l'énergie magnétique ($\vec{\mu} \cdot \vec{B}$).

Pour avoir une idée sur l'influence de ces deux grandeurs sur l'aimantation, nous allons assimiler un aimant à un ensemble de dipôles magnétiques localisés dans le système. L'aimantation apparaît donc comme une moyenne statistique sur les différents dipôles magnétiques dans la direction de l'aimantation facile.

Si on prend l'exemple d'une substance paramagnétique, les moments magnétiques s'alignent sous l'effet d'un champ magnétique, alors qu'ils étaient désordonnés quand le champ était nul. Il en résulte pour le matériau une aimantation induite orientée dans le sens du champ. Cette aimantation s'annule avec le champ. Au contraire des matériaux diamagnétiques, les matériaux paramagnétiques sont donc attirés des zones de champ magnétique faible vers les zones de champ fort fig (1-3).

Une application plus récente du magnétisme, mais largement utilisée, est le moteur électrique. Ce dernier utilise le champ magnétique créé par le courant électrique circulant dans une bobine. Celui-ci résulte donc cette fois du mouvement des électrons et ne correspond plus au magnétisme statique des aimants.

Aujourd'hui, notre compréhension toujours plus approfondie du magnétisme nous permet de l'utiliser dans des domaines divers tels que :

- la décoration (n'oublions pas les charmants magnets de nos réfrigérateurs),
- le transport que ce soit grâce au moteur électrique déjà évoqué ou dans un futur proche à la lévitation magnétique,

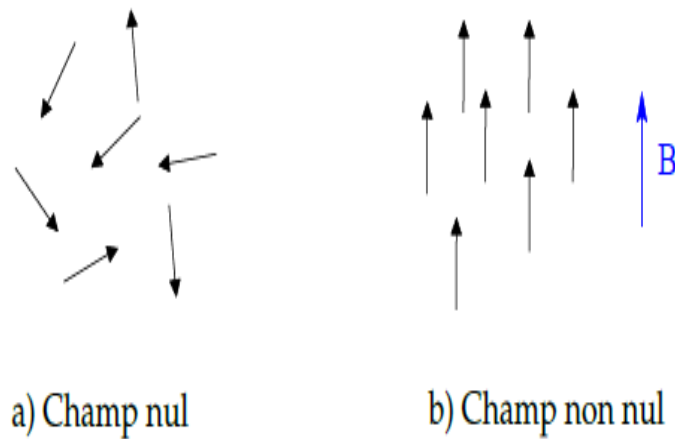


FIGURE 1.3 – Moments magnétiques d'un matériau paramagnétique

- la médecine avec l'utilisation de la résonance magnétique nucléaire (RMN) appliqué en imagerie médicale (IRM),

- le stockage d'information utilisant notamment l'effet de magnétorésistance géante (Prix Nobel 2007) dans les disques durs modernes. [1]

Le magnétisme trouve essentiellement son origine dans les propriétés des électrons telles qu'elles sont expliquées par la physique quantique. Leur état quantique de spin est responsable d'une première partie du magnétisme (magnétisme de spin). Une deuxième partie est imputable au mouvement orbital des électrons autour du noyau de l'atome (magnétisme orbital) et au magnétisme du noyau lui-même (magnétisme nucléaire). [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), la force agissant sur ces charges, dite force de Lorentz, traduit la présence d'un champ magnétique. L'électron possède un moment magnétique élémentaire (le quantum magnétique étant le magnéton de Bohr) qui peut être associé à l'image de son mouvement de rotation du spin sur lui-même dans un sens ou dans l'autre, orienté

vers le haut ou vers le bas. Une paire d'électrons ne peut occuper la même orbitale que si l'un et l'autre sont de moments magnétiques opposés (principe de Pauli)[2]. Bien entendu il faut prendre en compte le comportement collectif, donc statistique, de l'ensemble des charges en mouvement dans la matière pour déterminer ses différents types de propriétés magnétiques : on utilise donc les outils de la thermodynamique statistique et quantiques. Le magnétisme désigne l'ensemble des phénomènes qui existent autour des matériaux aimantés; cette aimantation est soit naturelle ou bien le résultat d'un champ d'induction électrique ou magnétique.

Enfin, le moment magnétique total de l'atome est la somme des moments orbitaux et des moments de spin[3]. Chaque atome peut être assimilé à un petit aimant porteur d'un moment magnétique élémentaire. le spin du noyau est demi-entier si le nombre de masse est impair; nul si le nombre de masse et la charge sont pairs et entier si le nombre de masse est pair et la charge impaire. Naturellement, les électrons de moments magnétiques opposés ont l'objectif à faire collective par paire. Donc l'aimantation est nulle à l'échelle macroscopique. Mais leurs moments magnétiques s'annulent, si des électrons se retrouvent sans partenaires. Ils produisent alors une aimantation globale du matériau. Les métaux de transition comme le fer, et les terres rares, sont les seuls éléments à porter un tel moment magnétique. Les propriétés magnétiques des matériaux proviennent de leurs moments magnétiques atomiques produits par le spin et le moment cinétique de leurs électrons. Par conséquent, les matériaux sont classés en fonction de leur comportement dans un champ magnétique extérieur. En effet, certains matériaux sont beaucoup plus magnétiques que d'autres. Cela peut s'expliquer par la nature des interactions entre les moments magnétiques atomiques qui s'établissent au sein de la structure. Les matériaux sont classés en fonction de leur comportement magnétique en deux catégories :

- les matériaux magnétiques non-ordonnés (magnétisme non-coopératif), tel que les diamagnétiques, les paramagnétiques et les superparamagnétiques .
- les matériaux magnétiques ordonnés et qui présentent des électrons non appariés (magnétisme coopératif), comme les ferromagnétiques, les anti-ferromagnétiques, les ferrimagnétiques et les anti-ferrimagnétiques.[4]

1.3 Anisotropie magnétique

L'anisotropie magnétique est présente lorsque les propriétés magnétiques d'un système sont fonction de la direction [3]. En effet, les matériaux magnétiquement anisotropes ont des directions préférentielles pour être magnétisés connues par directions d'aimantation facile ou axes faciles. Dans les matériaux dont l'anisotropie est très prononcée, pour un atome donné, il existe un couplage important entre le moment magnétique de spin et les moments magnétiques orbitaux. A cela s'ajoutent des orbitales atomiques généralement non sphériques. Ceci entraîne un alignement des orbitales suivant une ou plusieurs directions cristallographiques préférentielles. Le couplage spin-orbite crée donc une direction d'aimantation préférentielle, dite direction de facile aimantation, pour les moments magnétiques atomiques [4]. En absence du champ magnétique extérieur, les moments magnétiques d'un matériau anisotrope ont tendance à s'aligner le long de l'axe facile. Ces directions d'aimantation facile sont données par les minima de l'énergie d'anisotropie magnétique.

Dans les matériaux, l'énergie magnétocristalline et magnétostatique sont les principales sources d'anisotropie. Il existe plusieurs types d'anisotropie, citons à titre d'exemple :

- L'anisotropie de forme.
- Anisotropie magnétocristalline.
- Anisotropie de surface.

1.4 Fonction de partition

En physique statistique, la fonction de partition Z est une grandeur physique fondamentale qui englobe les propriétés statistiques d'un système à l'équilibre thermodynamique.

Soit un système thermodynamique dont le volume et le nombre de particules sont fixes qui est en contact thermique constant avec l'environnement à température T . L'énergie E_j correspond à chaque microétat j .

La fonction de partition d'un ensemble canonique pour une seule particule est donnée par la formule suivante :

$$Z = \sum_j e^{-\beta E_j} \quad (1.1)$$

où β est la température inverse donnée par :

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.2)$$

k_B est la constante de Boltzmann.

1.5 limite thermodynamique

Lors de l'étude d'un système physique, l'information sur sa taille est très importante. 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. Pourquoi s'intéresser à cette limite ?

Dans les expériences, on a souvent des échantillons de taille macroscopique, sauf si on est intéressé spécialement à des échelles microscopiques telles que le nanomètre. Du fait que le système à étudier est macroscopique, on a un très grand nombre de particules, $N \approx N_A = 6 \cdot 10^{23}$.

En physique statistique, la limite thermodynamique est donc définie comme la limite d'un système avec un grand volume, avec la densité de particules maintenue fixe.

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

avec : $\frac{N}{V} = cste$

Matériau	χ
Bi	-16.9×10^{-5}
C	-2.1×10^{-5}
eau	-1.2×10^{-5}
Cu	-1.0×10^{-5}
vide	0
O_2	0.19×10^{-5}
Al	2.2×10^{-5}
Co	70
Ni	110
Fe	200

TABLE 1.1 – Susceptibilités magnétiques de quelques matériaux

1.6 Susceptibilité magnétique

Une des grandeurs importantes qui ont un rôle dans la détermination des propriétés magnétiques d'une substance est la susceptibilité magnétique χ définie comme suit : Un échantillon placé dans un champ magnétique homogène (\vec{H}), acquiert une aimantation \vec{M} qui dépend du champ magnétique appliqué et de la température. L'aimantation est reliée au champ par la relation :

$$\chi = \frac{d\vec{M}}{d\vec{H}} \quad (1.3)$$

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

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{\vec{m}}{H} N \quad (1.4)$$

où m est le moment magnétique moyen par molécule et N est le nombre d'Avogadro. La table (1-1) nous donne les susceptibilités magnétiques de quelques matériaux.

1.7 Classification des substances magnétiques

1.7.1 Diamagnétisme

Pour toutes les substances, il existe une contribution faible et négative χ_M^{dia} liée à la déformation des orbitales électroniques sous l'influence d'un champ magnétique et qui est indépendante de la température; c'est le diamagnétisme. C'est une propriété magnétique fondamentale. Il est extrêmement faible par rapport aux autres effets magnétiques. Les matériaux diamagnétiques présentent une susceptibilité magnétique négative et extrêmement faible variant entre 10^{-6} et 10^{-5} . Elle est généralement estimée par la systématique de Pascal [5, 6, 7, 8]. Les matériaux diamagnétiques sont des matériaux ne comportant que des atomes non-magnétiques dont tous les électrons sont appariés. Il existe plusieurs matériaux diamagnétiques; citons les plus connus : le cuivre, l'argent, l'or, le graphite, le quartz...

1.7.2 paramagnétisme

Le paramagnétisme existe quand les moments magnétiques des atomes sont présents et sont orientés dans toutes les directions. Dans ces matériaux, les atomes ou les ions possèdent des électrons non-appariés dans des orbitales partiellement remplies. Cela signifie que dans une substance paramagnétique, chaque atome a un petit moment magnétique net. Si un champ magnétique est appliqué, les moments magnétiques s'alignent selon sa propre direction, Cependant, l'aimantation d'un matériau paramagnétique est perdue quand le champ est supprimé en raison des effets thermiques, donc dans ce cas, et en absence du champ extérieur l'aimantation globale est nulle, pour la plupart des matériaux dits paramagnétiques et sous des conditions raisonnables de température et de champ magnétique extérieur, l'aimantation \vec{M} du matériau paramagnétique est proportionnelle au champ appliqué \vec{H} avec $\vec{M} = \chi_m(T) \vec{H}$. Les moments atomiques sont orientés au hasard, dans toutes les directions. la susceptibilité associée, χ_M^{para} , varie souvent de manière inversement proportionnellement à la température; elle est positive et faible et dépendante de la température (selon la loi dite de Curie) à l'ambiante elle varie de l'ordre 10^{-4} à 10^{-5} :

a- Paramagnétisme du Curie

En physique du solide, la loi de Curie énonce que la susceptibilité magnétique d'un matériau paramagnétique est inversement proportionnelle à la température et les systèmes paramagnétiques qui répondent à la loi de Curie se reconnaissent facilement car le produit $\chi_M T$ est constant. On l'écrit $\chi_m = C/T$ avec C est une constante appelée constante de Curie. Cette loi peut être démontrée par la physique statistique, en considérant un échantillon, constitué d'un ensemble de molécules d'un grand nombre de moments magnétique indépendant μ , est placé dans un champ magnétique appliqué B , le moment moyen mesuré par molécule, m , est plus petit que μ . En champ faible, Langevin a démontré la relation suivante [9, 10]

$$\bar{m} = \frac{\mu^2 H}{3k_B T} \quad (1.5)$$

où k_B est la constante de Boltzmann. Cette équation combinée avec la relation (1.1) donne l'expression connue sous le nom de la loi de Curie :

$$\chi_M = \frac{\mu^2 N}{3k_B T} = \frac{C}{T} \quad (1.6)$$

b- paramagnétisme du Curie-Weiss

En physique des solides, la loi de Curie-Weiss est une forme particulière prise par la loi de Curie pour certaines substances paramagnétique. Cette loi est formée en remplaçant T par $T - \theta$ dans l'équation (1-4) à cause de l'interaction entre spins voisins dans le système cristallin. Elle est donnée par la formule suivante :

$$\chi = \frac{M}{H_M} = \frac{C}{T - \theta} \quad (1.7)$$

où θ est la constante de Weiss intrinsèque au composé dont l'unité est le kelvin. Si θ est positive, les interactions entre spins sont ferromagnétiques alors que si θ est négative les interactions sont antiferromagnétiques entre les spins.

1.7.3 Ferromagnétisme

Le ferromagnétisme est une propriété que certaines substances peuvent acquérir soit naturellement (aimantation spontanée) soit lorsqu'elles sont placées dans un champ magnétique en conservant une partie de ce magnétisme si ce champ est supprimé (aimantation artificielle).

Sous l'effet d'un champ magnétique externe, les atomes constituant la substance ferromagnétique ont des moments magnétiques qui s'alignent en même direction et même sens que le champ externe en produisant un moment magnétique maximal.

Ces moments magnétiques sont alignés parallèlement les uns aux autres et conservent une aimantation, même en absence du champ externe, et dans le but de minimiser l'énergie libre du système, le matériau est divisé en domaines ayant une aimantation spontanée. En effet, l'aimantation d'un tel matériau décroît lorsque la température augmente pour s'annuler à une température de transition ordre/désordre : caractéristique appelée température de Curie T_C . [4]

Les matériaux ferromagnétiques perdent leurs propriétés particulières au-dessus de T_C . La température de Curie est la température à laquelle un matériau ferromagnétique devient paramagnétique sous l'influence d'une hausse de température. Au-dessous de T_C , les interactions ferromagnétiques tentent à aligner parallèlement les moments magnétiques voisins dans le matériau. Cependant, en augmentant la température, les spins fluctuent rapidement. Ce processus est réversible car l'ordre ferromagnétique réapparaît dans le système quand sa température redescend en dessous de la température de Curie. Cette valeur varie d'un matériau à un autre. [4].

1.7.4 Antiferromagnétisme

Dans les matériaux antiferromagnétiques les atomes s'organisent de façon que deux atomes voisins puissent avoir des moments opposés, comme le montre la figure 1-5, ce qui produit en l'absence du champ magnétique une aimantation globale nulle et la susceptibilité est faiblement positive à cause des valeurs négatives des interactions d'échange entre les atomes voisins. La susceptibilité d'un matériau antiferromagnétique atteint son maximum

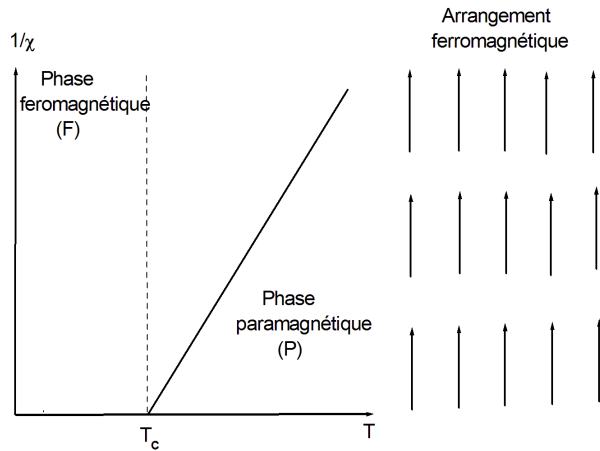


FIGURE 1.4 – Arrangement des moments magnétiques d’une substance ferromagnétique. Evolution de l’inverse de la susceptibilité en fonction de la température.

à la température de Néel T_N . (figure 1-5).

Dans un matériau antiferromagnétique, la température T_N est la température à laquelle le matériau présente une transition de phase vers un comportement paramagnétique. Cette température est similaire à la température de Curie pour les matériaux ferromagnétiques.

L’ordre antiferromagnétique se produit dans les métaux de transition 3d lorsque les distances interatomiques sont suffisamment petites pour que le couplage entre spin voisin devient négatif.

"En présence d’un champ magnétique une nouvelle phase apparaît. La figure (1-6) montre le diagramme de phases (champ magnétique en fonction de la température) typiquement pour un composé antiferromagnétique possédant une faible anisotropie. Le champ est appliqué parallèlement à la direction d’alignement des moments magnétiques.

À un certain champ critique, H_{C1} , l’action du champ magnétique provoque un renversement des moments magnétiques dans la direction perpendiculaire au champ. Cette nouvelle phase est appelée phase " Spin-Flot "(SF). Le passage des phases (AF) à (SF) est une transition de phase du premier ordre. H_{C2} implique que le matériau passe dans la phase

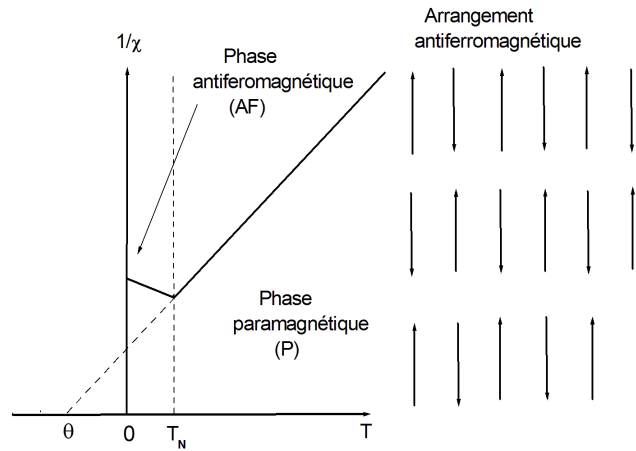


FIGURE 1.5 – Arrangement des moments magnétiques d’une substance antiferromagnétique. Evolution de l’inverse de la susceptibilité en fonction de la température.

paramagnétique. Le passage des phases (SF) à (P) est une transition du second ordre .

1.8 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 III ont des propriétés magnétiques exceptionnelles, leur aimantation

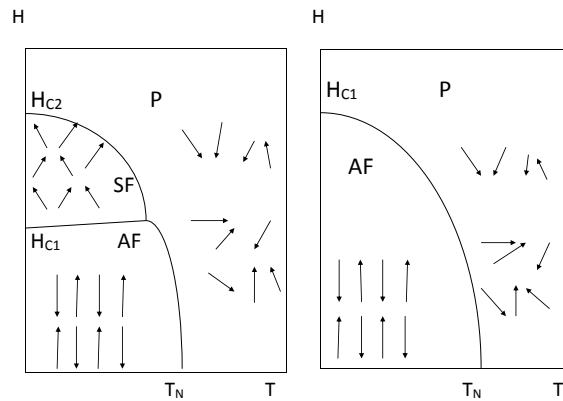


FIGURE 1.6 – Diagrammes de phase typiques pour des matériaux antiferromagnétiques. a) Pour un composé possédant une faible anisotropie. b) Pour un composé très anisotrope, le comportement est dit métamagnétique.

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 (supérieures à 400-500 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 MJ/m³ pour des champs coercitifs de l'ordre de 800 kA/m 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).

1.9 L'hamiltonien du système

Pour étudier un système physique quelconque, on doit suivre les étapes suivantes :

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

Il est clair que la représentation mathématique de l'évolution du système est plus qu'importante. La grandeur physique responsable de cette évolution est bien l'énergie. Donc pour une interprétation juste des propriétés magnétiques, l'hamiltonien du spin doit être défini correctement. Cet hamiltonien \mathcal{H} peut être décrit simplement comme une somme de deux composantes :

$$\mathcal{H} = H_{ZEE} + H_{int} \quad (1.8)$$

Où H_{ZEE} est le terme Zeeman (magnétique) et H_{int} le terme d'échange. Heizenberg a décrit pour la première fois l'interaction d'échange dans l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J(ij) S_i S_j \quad (1.9)$$

$J(ij)$ est l'interaction d'échange entre deux sites i et j , $\langle i, j \rangle$ veut dire que la sommation porte sur les spins premiers voisins. Le réseau est considéré isotrope, donc on tient compte d'un seul J . Si $J < 0$, l'interaction est dite antiferromagnétique. Au cas contraire $J > 0$, l'interaction est dite ferromagnétique. La relation de l'hamiltonien s'écrit finalement :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - g\mu_B \sum_i \vec{H} \vec{S} \quad (1.10)$$

1.10 Phénomènes critiques

En physique, les phénomènes critiques sont les phénomènes qui se déroulent aux points critiques où les grandeurs physiques varient très rapidement et présentent ainsi des discon-

tinuités. Ces phénomènes incluent des divergences en loi de puissance de certaines quantités décrites par les exposants critiques tels que : l'universalité, le comportement fractal, et la rupture d'ergodicité. De nombreuses et nouvelles idées ont été développées afin de mieux comprendre le comportement critique de systèmes ayant des structures cristallographiques de plus en plus complexes. La compréhension des phénomènes critiques nécessite l'usage de théories tels que : la théorie du champ moyen, la théorie du champ effectif et la méthode de la matrice de transfert.

le progrès des calculs microscopiques allait poser quelques problèmes. D'abord on commençait à prendre en compte les fluctuations d'énergie (Bethe). Puis, on s'aperçut que la solution exacte du modèle d'Ising à deux dimensions n'était pas en accord avec le comportement critique prévu par Landau . Cette solution exacte donne :

$$C_V \sim \log | T - T_C |$$

$$m \sim (T_C - T)^{1/8}$$

$$\chi \sim (T_C - T)^{-7/4}$$

La température critique exacte est plus basse que celle obtenue dans l'approximation du champ moyen :

$$T_c \text{ exacte} \approx 0,57 T_c \text{ Landau.}$$

1.10.1 Définition d'un exposant critique

Un exposant critique est un nombre qui caractérise le comportement d'une grandeur physique au voisinage d'un point de transition du deuxième ordre. Les exposants critiques sont définis comme suit :

le paramètre d'ordre démarre en $(T_c - T)^\beta$, et qu'au dessus de T_c , par exemple, la chaleur spécifique varie en $(T - T_c)^{-\alpha}$, la longueur de corrélation en $(T - T_c)^{-\nu}$, et la susceptibilité (cas magnétique) en $(T - T_c)^{-\gamma}$. Les exposants, $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ et d'autres, définis au voisinage d'un point critique, appelé exposants critiques.

Grandeurs physiques	Exposants	Définitions	Conditions
Chaleur spécifique à champ constant	α	$C_h \sim t^{-\alpha}$	$t > 0, h = 0$
	α'	$C_h \sim (-t)^{-\alpha'}$	$t < 0, h = 0$
	α_0	$C_h \sim h^{-\alpha_0}$	$t = 0, h > 0$
Paramètres d'ordre	β	$m \sim (-t)^\beta$	$t < 0, h = 0$
	δ	$m \sim h^{1/\delta}$	$t = 0, h > 0$
Susceptibilité	γ	$\chi_T \sim (t)^{-\gamma}$	$t > 0, h = 0$
	γ'	$\chi_T \sim (-t)^{-\gamma'}$	$t < 0, h = 0$
Longueur de corrélation	ν	$\xi \sim t^{-\nu}$	$t > 0, h = 0$
	ν'	$\xi \sim (-t)^{-\nu'}$	$t < 0, h = 0$
	ν_0	$\xi \sim h^{-\nu_0}$	$t = 0, h > 0$
Fonction de corrélation	η	$g(R) \sim R^{-(d-2+\eta)}$	$t = 0, h = 0$ d=dimensionnalité

TABLE 1.2 – Principaux exposants critiques

1.10.2 Exemples de quelques exposants critiques

Pour décrire le comportement des grandeurs physiques singulières au voisinage de T_c , on les représente par une puissance de $|T - T_c|$. On définit les exposants suivants :

$$\begin{aligned} \text{Chaleur spécifique } C &\sim (T_c - T)^{-\alpha'} \text{ si } T < T_c \\ &\sim (T - T_c)^{-\alpha} \text{ si } T > T_c \end{aligned}$$

$$\text{Paramètre d'ordre } m \sim (T_c - T)^\beta$$

$$\begin{aligned} \text{Susceptibilité relative au paramètre d'ordre } \chi &\sim (T_c - T)^{-\gamma'} \text{ si } T < T_c \\ &\sim (T - T_c)^{-\gamma} \text{ si } T > T_c \end{aligned}$$

La théorie de Landau prévoit $\alpha = \alpha' = 0$ (saut de la chaleur spécifique), $\beta = 1/2$, $\gamma = \gamma' = 1$, alors que le modèle d'Ising à deux dimensions correspond à $\alpha = \alpha' = 0^+$ (divergence logarithmique), $\beta = 1/8$, $\gamma = \gamma' = 7/4$.

1.10.3 Singularités

Le comportement critique est caractérisé par des singularités de certaines fonctions thermodynamiques. Cette singularité peut être une discontinuité ou une divergence. Les singularités sont interprétées comme des changements dans la structure de phase du sys-

tème, où plus précisément comme des transitions de phase. Ces dernières sont classées selon la nature de la singularité typique qui s'y produit. Les singularités des propriétés thermodynamiques, telles que la chaleur spécifique et la susceptibilité, sont très faibles et très difficiles à détecter expérimentalement. De plus, elles n'apparaissent qu'à la limite thermodynamique pour des systèmes infiniment grands. Cependant, un système fini ne peut pas présenter une vraie singularité à une température non-nulle, mais une température pseudo-critique qui peut être liée au pic pointu de la chaleur spécifique et de la susceptibilité. Dans le développement des fluctuations critiques, les singularités des grandeurs thermodynamiques et des fonctions de corrélation ont la même origine physique. La connexion est assurée par le théorème de fluctuation-dissipation.

1.10.4 Transitions de phase

Les matériaux peuvent exister sous différentes phases dont chacune d'elles se caractérise par des propriétés macroscopiques différentes, fonction d'un ensemble de paramètres intensifs tels que la température, la pression, le champ électrique ou magnétique.

Le phénomène de transition de phase occupe une place importante en Physique de la Matière Condensée, pour diverses raisons : sa fréquence et sa diversité, son caractère spectaculaire et l'intérêt des problèmes conceptuels qui s'y rattachent.

Une transition de phase correspond à une transformation qualitative et quantitative des propriétés macroscopiques d'un système thermodynamique. Ce qui caractérise ces transitions, 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.

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. Les transitions d'une phase à une autre qu'un changement de température permet d'observer sont très familières :

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

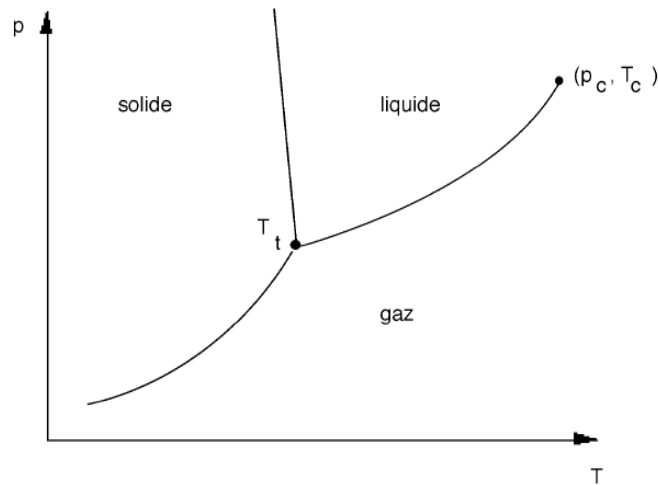


FIGURE 1.7 – Diagramme (pression, température) montrant les domaines d'existence des phases (solid, liquide, gaz).

La physique de la matière condensée est très riche d'exemples de telles transitions : citons les transitions magnétiques, ferroélectriques, superfluides, supraconductrices, ordre-désordre dans les alliages, mésophases des cristaux liquides, etc ...

Pour un système donné, on fait varier un certain nombre de paramètres (température, pression, champs extérieurs ...etc) pour mettre en évidence les diverses phases du système et en explorer les domaines d'existence, et on consigne les résultats sur une carte qu'on appelle diagramme de phase.

Pour se fixer les idées, considérons trois diagrammes de phases particuliers :

-La figure (1-7) est 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.

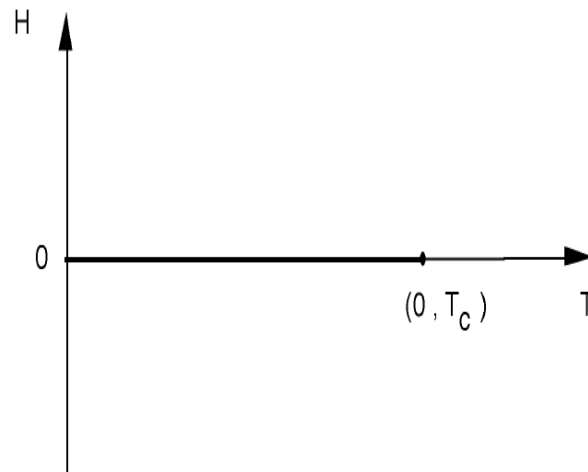


FIGURE 1.8 – Diagramme (champ magnétique, température) pour un corps ferromagnétique.

-Le deuxième diagramme de la figure (1-8) est le diagramme de phase (champ magnétique, température) d'un corps qui présente une transition ferromagnétique. Ce diagramme présente une frontière sur l'axe $H = 0$ avec un point d'arrêt, qu'on appelle aussi point critique. En champ nul, à haute température on observe une phase désordonnée, dite paramagnétique sans aimantation, au point critique lorsque $T = T_C$ une transition se produit et pour $T < T_C$ on observe une phase ferromagnétique.

-Le troisième diagramme de la figure (1-9) est aussi un diagramme (champ magnétique, température) mais pour un corps qui présente une transition antiferromagnétique. Sur ce diagramme on observe deux domaines séparés par une ligne, quand on franchit la partie épaisse, on observe un saut de l'aimantation, mais quand on franchit la ligne fine, il n'y a pas de saut. Puisque il n'y a pas de saut donc cette dernière ligne est une ligne de point critique.

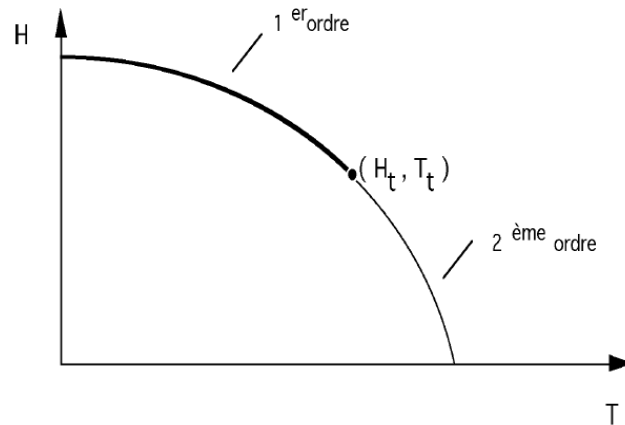


FIGURE 1.9 – Courbes d’aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique a différentes températures.

1.10.5 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 thermodynamique et de la physique statistique, plusieurs façons de discuter ces singularités ont été proposées. Ces différentes classifications traduisent l’évolution conceptuelle des méthodes d’études des transitions de phase. La classification la plus ancienne, de nature thermodynamique, est due à Ehrenfest. 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. Puis, par la suite, est apparue, avec L.D. Landau,

Ordre	1	2
definition	discontinuité de $\frac{\partial F}{\partial T}$	discontinuité de $\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$
propriétés	$\Delta S \neq 0$ chaleur latente $\Delta \rho \neq 0$ C_v diverge K diverge	$\Delta S = 0$ pas de chaleur latente $\Delta \rho = 0$ saut dans C_v K ou χ diverge
exemple	liquide-gaz	ferro-para supra-conducteur

TABLE 1.3 – Récapitulatif des transitions de phase

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 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 celles où celle-ci reste finie. Il faut souligner que ces différentes classifications ne se recouvrent pas exactement. Mais toutes, évidemment, présentent leur intérêt propre.

a-Classification d'Ehrenfest.

Suivant cette classification, une transition est du premier ordre lorsqu'elle s'accompagne de discontinuités dans les grandeurs physiques, comme l'entropie, qui sont reliées à des dérivées premières du potentiel thermodynamique, et elle est du second ordre lorsqu'elle s'accompagne de discontinuités dans les grandeurs physiques, comme la chaleur spécifique, qui sont reliées à des dérivées secondes du potentiel thermodynamique, les dérivées premières restant continues.

Plus généralement, si toutes les dérivées d'ordre $(n - 1)$ de G sont continues et que la dérivée d'ordre n est discontinue, la transition sera d'ordre n . Pour illustrer tout cela, considérons dans le plan des variables intensives $(p; T)$ de la figure (1.10), soit une ligne de transition séparant deux phases I et II. En tout point de la courbe, la condition pour que

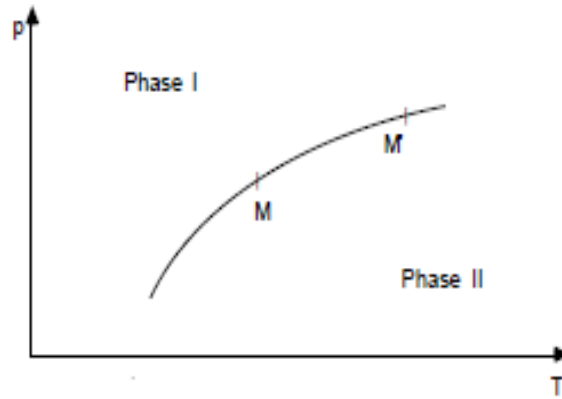


FIGURE 1.10 – Illustration de la ligne de transition entre deux phases.

l'équilibre soit assuré est donnée par :

$$G_I(p, T) = G_{II}(p, T) \quad (1.11)$$

ou G_I et G_{II} sont les potentiels thermodynamiques des deux phases. Le long de la ligne de transition, pour toute évolution, du point M au point M' voisin, on peut écrire :

$$dG_I = -S_I dT + V_I dp \quad (1.12)$$

$$dG_{II} = -S_{II} dT + V_{II} dp \quad (1.13)$$

où les quantités V_J et S_J ($J = I, II$) sont les volumes molaires et les entropies des deux phases. Comme on doit avoir : $dG_I = dG_{II}$

$$\left(\frac{dp}{dT} \right)_{\text{courbe}} = \frac{S_{II} - S_I}{V_{II} - V_I} = \frac{L}{T} \times \frac{1}{\Delta V} \quad (1.14)$$

On introduit la chaleur latente de la transition L, reliée au saut d'entropie ΔS par la

rélation $L = T\Delta S$, et la discontinuité du volume molaire à la transition ΔV .

Nous sommes ici dans le cas d'un changement de phase du 1^{er} ordre, puisque les dérivées premières de G (ici S et V) sont discontinues.

Si au contraire elles sont continues, on aura $dS_I = dS_{II}$:

$$dS_I = \frac{1}{T}C_{pI}dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{TI} dp \quad (1.15)$$

$$dS_{II} = \frac{1}{T}C_{pII}dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{TII} dp \quad (1.16)$$

D'où nous avons une autre relation similaire, mais cette fois pour une transition du 2nd ordre :

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{courbe} = \frac{1}{T} \frac{\Delta C_p}{\Delta \left(\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T\right)} = \frac{1}{TV} \frac{\Delta C_p}{\Delta \alpha} \quad (1.17)$$

Avec $\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T$ est le coefficient de dilatation isotherme. La même chose pour une transition de second ordre, en écrivant $dV_I = dV_{II}$ on aura :

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{courbe} = \frac{\Delta \alpha}{\Delta \chi_T} \quad (1.18)$$

ou $\alpha = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_T$ est la compressibilité isotherme.

A partir de ces deux relations, on obtient :

$$TV(\Delta \alpha)^2 = \Delta C_p \Delta \chi_T \quad (1.19)$$

Cette relation a bien été observée pour la transition Hélium normal - Hélium superfluide dans un certain domaine de température. En fait, Ehrenfest pensait à des discontinuités des dérivées du potentiel thermodynamique du type saut, par analogie avec la chaleur latente de la transition liquide - gaz $\Delta S = \frac{L}{T}$; mais en fait, dans bien des cas, la chaleur spécifique

diverge à la transition, quand celle-ci est du second ordre.

b-Classification de Landau (1908 - 1968).

Une notion très féconde pour classer les transitions fut introduite par L.D. Landau (1937) [12], 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 (à l'exception de la transition liquide/gaz au point critique qui est spécifique). La phase basse température, c'est-à-dire, sauf exception, la phase de plus basse entropie, donc la phase ordonnée, est en général moins symétrique que la phase haute température. A ce changement de symétrie, Landau associa la notion de paramètre d'ordre. Cette grandeur physique, de caractère extensif, est nulle dans la phase la plus symétrique et non nulle dans la phase la moins symétrique. La notion de paramètre d'ordre permet de classer les transitions de la manière suivante :

-Les transitions sans paramètre d'ordre : Ces transitions sont toujours du premier ordre au sens d'Ehrenfest, c'est-à-dire qu'il existe une chaleur latente, mais il est impossible de définir un ordre de la transition au sens de Landau.

-Les transitions avec paramètre d'ordre : si le paramètre d'ordre est discontinu au point de transition, on dit que la transition est de premier ordre ; si au contraire le paramètre d'ordre est continu, on dit que la transition est de second ordre. Ainsi, dans le cas d'un matériau magnétique celui-ci n'a pas de moment magnétique permanent au-dessus de sa température de Curie (état paramagnétique), au-dessous de cette température en revanche, il possède une aimantation permanente orientée dans une certaine direction (état ferromagnétique). On dit que la symétrie a été brisée à la transition : en dessous de la température de Curie, le matériau n'est invariant que par la rotation autour d'un axe orienté dans la direction de l'aimantation.

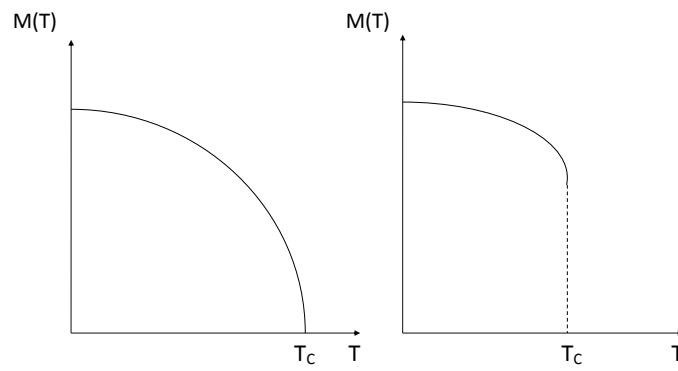


FIGURE 1.11 – Comportement du paramètre d'ordre m à la transition continue (second ordre) et le saut d'aimantation (premier ordre).

Chapitre 2

Méthode de Monte Carlo pour les modèles de spin sur réseaux

2.1 Introduction

La naissance de la simulation numérique remonte aux débuts des années mille neuf cent cinquante où les premiers ordinateurs ont été utilisés pour un usage civil. En particulier, à Los Alamos, la machine MANIAC est devenue opérationnelle en 1952. La simulation apporte des informations complémentaires aux outils théoriques. Les domaines de la physique où les approches perturbatives sont efficaces (gaz dilués, vibrations de solides quasi-harmoniques) ont peu fait appel aux techniques de simulation. Inversement, la théorie des liquides denses, pour laquelle peu de résultats exacts sont connus et dont la qualité des développements théoriques n'est pas toujours clairement établie, ont largement fait appel à la simulation.

D'un autre côté, les transitions de phases sont des phénomènes physiques qui décrivent les changements d'état des systèmes physiques. Cependant, l'un des défis majeurs de ces systèmes comportant un grand nombre de particules, est le calcul de la fonction de partition à la limite thermodynamique [13]. Ainsi en l'absence de solutions exactes qui n'existent que pour le modèle d'Ising et le modèle de Potts à deux dimensions, l'utilisation des méthodes d'approximations nécessite l'étude des modèles de spin.

Les modèles de spins ont initialement été introduits pour la description du magnétisme dans les matériaux ferromagnétiques. Les modèles classiques, notamment le modèle d'Ising ont joué un rôle important dans la modélisation et la compréhension de ce phénomène dans les différents matériaux.

Par ailleurs, les modèles pour lesquels les fonctions de partition sont des solutions exactes sont limités. Ce fait a exigé le développement de différentes techniques approximatives tel que les développements en séries, les méthodes des théories de champ et les méthodes numériques. Le calcul numérique de la fonction de partition par la méthode numérique devient facile à déterminer lorsque le modèle considéré est placé sur un réseau de taille finie [13]. Bien que cette technique permet d'obtenir les propriétés critiques du système, l'exactitude des résultats dépend de la taille considérée. Les simulations par les méthodes numériques apportent des outils complémentaires destinés à mieux comprendre les systèmes [14, 15]. Elles sont essentielles pour l'étude des systèmes complexes, au voisinage de l'instant critique où s'établit la transition. La méthode Monte Carlo est très utilisée et mieux adaptée à cet effet.

2.2 Méthode de Monte-Carlo

Elle fait parti des méthodes exactes, algorithmiques visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Le nom de ces méthodes, qui fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monte-Carlo, a été inventé en 1947 par Nicholas Metropolis [16], et publié pour la première fois en 1949 dans un article coécrit avec Stanislaw Ulam.

En mécanique statistique, la moyenne d'une observable A est calculée à partir de la distribution de Boltzmann par :

$$\langle A \rangle = \sum_l P_l^{eq} A_l \quad (2.1)$$

où l est l'état du système, A_l est la valeur de A dans cet état et P_l^{eq} est la distribution de

probabilité à l'équilibre dans l'état l :

$$P_l^{eq} = \frac{e^{-\beta E_l}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \quad (2.2)$$

Avec E_l l'énergie de l'état l et $\beta = 1/k_B T$.

En général, le nombre d'états est très grand et le calcul de la somme est impraticable le fait qu'on s'intéresse à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$). Les simulations de Monte-Carlo nous permettent d'étudier numériquement un grand nombre de particules mais au lieu de sommer sur tout les états dans l'équation (2-1) [17], on utilise un échantillon de ces états qui sont générés par une procédure itérative. Ceci nous donnera une estimation de la valeur moyenne, qui n'est pas vraie mais contenant des erreurs statistiques. Cette valeur estimée est donnée par Binder (1984) comme suit :

$$\langle A \rangle_{est.} = \frac{1}{t_0} \sum_{t=1}^{t_0} A(t) \quad (2.3)$$

où t est une configuration générée par notre algorithme. A(t) est la valeur de A dans cette configuration au temps t et t_0 est le nombre de mesures.

D'une façon pratique, les simulations Monte-Carlo sont des expériences numériques dans lesquelles les états dans l'espace des phases sont visités de façon aléatoire. On part d'une configuration initiale φ et on tire au hasard une configuration φ' . Cette dernière est acceptée avec une probabilité de transition $\omega(\varphi \rightarrow \varphi')$ qui dépend de la variation d'énergie ΔE impliquée et on a :

$$\omega(\varphi \rightarrow \varphi') = \begin{cases} \exp(-\beta \Delta E) & \text{si } \Delta E \geq 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

$$= 1 \quad \text{si } \Delta E \leq 0 \quad (2.5)$$

On peut également utiliser la cinétique de Glauber, très utilisée dans les processus

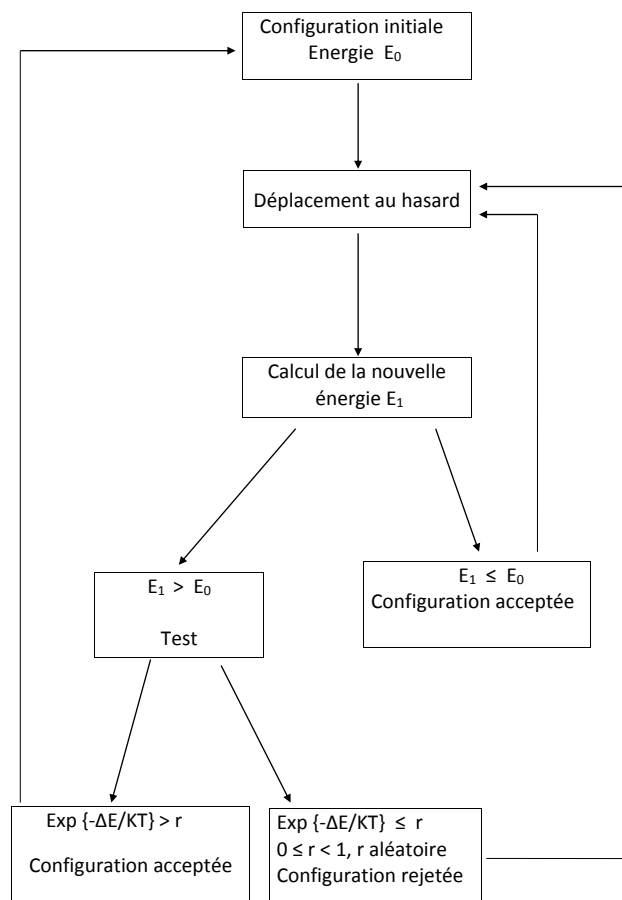


FIGURE 2.1 – schéma de l’algorithme standard de la méthode de Monte-Carlo.

dynamiques, on aura :

$$\omega(\varphi \rightarrow \varphi) = \frac{\exp(-\beta\Delta E)}{1 + \exp(-\beta\Delta E)} \quad (2.6)$$

où $\Delta E = E_{\varphi'} - E_{\varphi}$ est la variation d'énergie lorsque le système passe de la configuration φ à la configuration φ' .

La structure du programme standard de la simulation de Monte-Carlo peut être résumée par trois principales étapes figure (2-1), en considérant, comme dans la pratique, un réseau carré $L \times L$, constitué de L^2 sites ou L est la taille du réseau. 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.

2.3 Méthodes approximatives

La plupart des transitions ne peuvent se décrire que dans le cadre de théories approchées. Très souvent, il s'agit d'une variante de la méthode du champ moléculaire. L'approximation de champ moyen a été développée pour étudier les systèmes à corps en interaction. Elle consiste à remplacer le problème des spins en interaction par un problème de spins indépendants placés dans un champ moyen produit par l'ensemble des autres spins. Dans cette section, nous allons développer l'approximation du champ moyen pour le modèle d'Ising. L'approximation de champ moyen repose sur l'idée suivante : on suppose que dans le matériau, chaque spin S_i ressent une influence moyenne exercée par l'ensemble des spins voisins. Ainsi, si on s'intéresse au spin i , les termes de couplage de la forme $S_i S_j$ seront remplacés par $S_i \langle S_j \rangle$. De plus, on suppose que la moyenne des spins est uniforme dans le matériau : $\langle S_j \rangle = \Phi_j = \Phi$. [18]

L'approximation du champ moyen consiste à prendre un seul spin S_i pour calculer son

énergie en remplaçant tous les autres spins par leur valeur moyenne $\langle S_j \rangle$. L'hamiltonien englobant le champ magnétique extérieur pour le modèle d'Ising est :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \mu h \sum_i S_i \quad (2.7)$$

où J est la constante de couplage, h le champ magnétique extérieur et μ le moment magnétique des spins. Dans l'approximation du champ moyen, l'énergie du spin S_i est donnée par :

$$E_i = -J S_i \sum_j \langle S_j \rangle - \mu h S_i \quad (2.8)$$

Selon que le spin est dirigé vers le haut (+1) ou vers le bas (-1), l'énergie du site a deux valeurs E_{i+} et E_{i-} :

$$E_{i+} = -J \sum_j \langle S_j \rangle - \mu h = -zJM - \mu h \quad (2.9)$$

$$E_{i-} = J \sum_j \langle S_j \rangle + \mu h = zJM + \mu h \quad (2.10)$$

avec M est la valeur moyenne de S_j et z est le nombre des plus proches voisins. La valeur moyenne de S_i est donnée en terme de la constante de Boltzmann k_B et la température T par l'expression suivante :

$$\langle S_i \rangle = \tanh\left(\frac{zJM + \mu h}{K_B T}\right) \quad (2.11)$$

En champ extérieur nul, l'approximation de champ moyen prédit l'existence d'une transition de phase avec annulation du paramètre d'ordre au-dessus d'une température critique T_c . La transition sépare une phase basse température pour laquelle il existe une aimantation spontanée d'une phase haute température où il n'y a pas d'aimantation. Pour analyser le comportement asymptotique des différentes observables thermodynamique, concentrons notre attention sur ce qu'il se passe au voisinage de la transition. Ainsi, lorsque T tend vers T_c , le paramètre d'ordre Φ est uniforme et tend vers zéro. Par consé-

quent, on peut réaliser un développement limité des différentes grandeurs autour de la transition lorsque F tend vers zéro. (critique) En particulier, l'énergie libre s'écrit :

$$W(T, \Phi) = N \left(w(T, 0) + \frac{1}{2} r(T) \Phi^2 + u(T) \Phi^4 \right) \quad (2.12)$$

avec

$$w(T, 0) = -KT \ln(2)$$

$$r(T) = \frac{T_C}{T} (T - T_C)$$

$$u(T) = K \frac{T_C}{T^3}$$

Au voisinage du point critique, la forme de l'énergie libre, révélatrice d'une transition de phase, dépend fortement du signe du paramètre $r(T)$, lui-même fonction de $T - T_C$. Ainsi, si $r(T)$ est positif ($T > T_C$), la courbe $W(T, \Phi)$ présente un unique minimum en $\Phi = 0$. Par contre, si $r(T)$ est négatif ($T < T_C$), deux états stables apparaissent.

En comparaison avec les théories exactes et l'expérience on peut dire que la théorie de champ moyen permet d'être relativement simple et d'expliquer qualitativement l'existence d'une transition de phase dans le modèle d'Ising. Elle est loin d'être exacte. On constate expérimentalement que les différentes observables thermodynamiques possèdent un comportement en loi de puissance au voisinage de la transition critique. Par exemple, on constate les lois suivantes pour l'aimantation et la susceptibilité :

$$\Phi \approx (T_C - T)^\beta$$

$$\chi \approx |T - T_C|^{-\gamma}$$

Les nombres β et γ sont appelés exposants critiques.

Il est alors intéressant de comparer ses résultats avec les théories exactes ou les valeurs expérimentales. Tout d'abord, pour un système de dimension $D=1$ (une chaîne de spins), l'approximation de champ moyen est tout simplement une catastrophe. En effet, elle prédit l'existence d'une transition de phase alors que l'on peut montrer qu'il n'existe pas de transition (méthode des matrices de transferts). Plus précisément, la température critique du modèle d'Ising à 1D est nulle. La situation est un peu meilleure pour un système de dimension $D=2$. Dans ce cas, il existe également une solution exacte (Onsager) et on montre qu'il y a une transition de phase à $kT_C = 2.27J$. Si $D=2$, pour un réseau cubique, le nombre de voisins étant $z=2D$, la théorie de champ moyen donne une température critique $kT_C = 4J$,

soit une erreur relative de 76% !!! De plus, les exposants critiques en dimension $D=2$ sont notablement différent des valeurs de champ moyen puisque $\beta=0.125$ et $\gamma=1.75$. En fait, on constate que les résultats de champ moyen sont d'autant meilleur que la dimension de l'espace augment et ils deviennent exacts lorsque cette dimension devient infinie [18]

2.3.1 Méthode du champ moyen de Weiss

La théorie des domaines magnétiques a été développée par le physicien français Pierre-Ernest Weiss qui, en 1906, suggéra l'existence de domaines magnétiques dans les matériaux ferromagnétiques. Il suggéra qu'un grand nombre de moments magnétiques atomiques (environ 10^{12} à 10^{18}) y seraient alignés parallèlement. La direction d'alignement des domaines varie d'un domaine à l'autre d'une manière plus ou moins aléatoire, bien que certains axes cristallographiques, appelés axes de faciles aimantation, soient privilégiés par les moments magnétiques. Weiss devait toujours expliquer la raison pour laquelle les moments magnétiques atomiques s'alignaient spontanément au sein d'un matériau ferromagnétique. Il exposa alors sa théorie du champ moyen, plus connue sous son nom anglais : Mean Field Theory. Il supposa dans cette théorie que, dans un matériau, un moment magnétique donné était soumis à un fort champ magnétique dû à l'aimantation de ses voisins. Dans sa théorie initiale, le champ moyen était proportionnel à l'aimantation du matériau M , tel $H_e = \alpha M$ où α est la constante du champ moyen. Cependant, ceci n'est pas applicable au matériau ferromagnétique à cause de la variation d'aimantation d'un domaine à l'autre. Dans ce cas le champ d'interaction est $H_e = \alpha M_s$, où M_s est l'aimantation de saturation à 0 K.

Plus tard, la physique quantique a permis de comprendre l'origine microscopique du champ moyen (ou champ de Weiss). L'interaction d'échange entre spins locaux favorise un alignement parallèle (matériau ferromagnétique) ou antiparallèle (matériau antiferromagnétique) des moments magnétiques voisins.

2.3.2 Méthode du champ moyen effectif corrélé

méthode du champ effectif a été initié en premier temps par Honmura et Kaneyoshi et développée par Boccara . Elle a la simplicité du champ moyen et donne de meilleurs

résultats qualitatifs et quantitatifs. Elle ne s'applique qu'à des systèmes dans lesquels le désordre est décrit par des variables discrètes. Elle consiste à prendre un spin central et à calculer sa valeur moyenne en fixant tous les autres spins du réseau. La valeur moyenne sur toutes les configurations, donne l'équation d'état du système qui va permettre de déterminer la température de transition ainsi que d'autres propriétés.

-Technique d'opérateur différentiel :

En présence d'un champ magnétique extérieur h , l'hamiltonien du modèle d'Ising est donné par :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mu_i \mu_j - h \sum_i \mu_i \quad (2.13)$$

où μ_i est une variable dynamique qui peut prendre deux valeurs ± 1 et J_{ij} est l'interaction de change entre le site i et le site j .

Le paramètre d'ordre est déterminé par $m = \langle \mu_i \rangle$. Dans la phase ordonnée $m \neq 0$, tandis que dans la phase désordonnée $m = 0$. La valeur moyenne du spin est donnée par :

$$\langle m_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \mu_i e^{-\beta H} \quad (2.14)$$

avec la fonction de partition Z :

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (2.15)$$

$\beta = 1/K_B T$, K_B est la constante de Boltzmann et T la température absolue. L'hamiltonien de

l'équation s'exprime comme la somme suivante :

$$H = H_i + H' \quad (2.16)$$

où la première partie H_i comprend toutes les contributions associées au site, alors que la seconde partie H' ne dépend pas de l'emplacement i .

Alors,

$$H_i = -\mu_i E_i \quad (2.17)$$

tel que E_i est l'opérateur exprimant le champ local sur le site i , il prend la forme suivante :

$$E_i = \sum_{i,j} J_{ij} \mu_j + h \quad (2.18)$$

l'approximation du champ effectif corrélé considère que le spin central μ_i est lié aux plus proches voisins $\mu_{i+\delta}$ via :

$$\mu_{i+\delta} = \langle \mu_{i+\delta} \rangle + \lambda(\mu_i - \langle \mu_i \rangle) \quad (2.19)$$

où est λ un paramètre dépendant de la température. Après quelques transformations en prenant $h = 0$, nous aurons :

$$H = - \sum_i H_i^{eff} \mu_i + cst \quad (2.20)$$

avec

$$H_i^{eff} = J \sum_j \langle \mu_j \rangle - \lambda J_z \langle \mu_i \rangle \quad (2.21)$$

2.4 Modèle de spin sur réseau

2.4.1 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est l'un des modèles les plus simples qui permet de modéliser des systèmes physiques trop complexes à analyser de façon exacte. En raison de sa simplicité et de la richesse de son comportement, le modèle d'Ising suscite depuis son introduction un grand intérêt. Le modèle d'Ising est constitué d'une distribution d'atomes dans un plan. Chacun de ces atomes porte un moment magnétique μ_B (magnéton de Bohr) orienté aléatoirement en spin up $+\mu_B$ ou spin down $-\mu_B$. Ces spins interagissent entre eux deux à deux, uniquement entre premiers voisins avec une énergie d'interaction.

L'hamiltonien H_{Ising} du système est donné par :

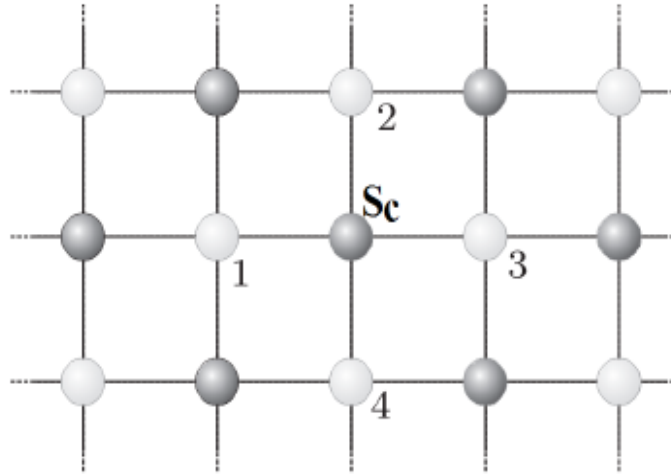


FIGURE 2.2 – Système d’Ising à deux dimensions où le spin central S_c interagit uniquement avec les 4 spins indicés 1, 2, 3 et 4

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \mu h \sum_i S_i \quad (2.22)$$

où $\langle i, j \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins, h est le champ magnétique extérieur, S_i représente le spin au site i et J est l’interaction d’échange. Les signes (-) dans l’équation sont classiques. Ils dictent simplement le choix du signe pour le paramètre d’interaction J et le champ externe h . La simulation d’un système d’Ising de taille finie par la méthode Monte Carlo permet de calculer les valeurs des grandeurs physiques telles que l’aimantation, l’énergie, la chaleur spécifique et la susceptibilité à une température donnée.

2.4.2 Modèle de Potts

En physique statistique, le modèle de Potts est une généralisation du modèle d’Ising. C’est un modèle d’interaction de spins sur un réseau cristallin [19]. Ce modèle permet de comprendre le comportement des matériaux ferromagnétiques. Il est également utilisé

pour expliquer certains phénomènes relatifs à la physique des solides tels que les transitions de phases et les propriétés magnétiques des structures périodiques en couches. Le modèle de Potts est similaire au modèle d'Ising, sauf que le spin S_i sur chaque site du réseau peut prendre plus de deux valeurs discrètes différentes [20]. Habituellement, ces valeurs sont représentées par des nombres entiers positifs à partir de 1, et le modèle de Potts à q états est celui dans lequel chaque spin peut avoir des valeurs entières $S_i = 1 \dots q$. L'hamiltonien H_{Potts} s'exprime comme suit :

$$H_{Potts} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{S_i S_j} \quad (2.23)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker qui satisfait :

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 1 & \text{si} & & i = j \\ &= 0 & \text{si} & & i \neq j \end{aligned} \quad (2.24)$$

2.4.3 Modele de Blume-Emery-griffiths

Le modèle de Blume-Emery-Griffiths a été utilisé pour étudier une variété de systèmes physico-chimiques dans ces dernières décennies. Il a été conçu spécialement pour décrire le mélange binaire $He^3 - He^4$. Ce modèle a été d'un grand succès car il était capable de bien décrire, au moins qualitativement, son comportement. En particulier il prédit correctement les transitions de second et de premier ordre. Cette dernière étant due à une séparation de phase. Ces deux types de transition sont responsables de l'apparition d'un point tricritique. Le modèle BEG permet de modéliser des mélanges binaires dont une des composantes a un degré de liberté de type magnétique ou superfluide. Blume, Emery et Griffiths ont choisi de modéliser le mélange $He^3 - He^4$ par un système de spins sur réseau. Ce modèle permet l'apparition d'un ordre ferromagnétique qu'ils interprètent comme la superfluidité. Cette identification étant purement phénoménologique.

2.4.4 Etude théorique du modèle BEG

Heer et Daunt, en 1951 [21], sont les premiers à avoir étudié les mélanges d'hélium liquide sur des bases de modèles théoriques. Prigogine et al. [21], en 1954, ont traité ces mélanges comme des mélanges isotopiques. Ils ont conclu, en utilisant des données expérimentales connues, que la séparation de phase doit avoir lieu à $1^\circ K$.

En 1960, Cohen et Van Leeuwen ont étudié un mélange binaire de sphères dures de fermions et de bosons [22] comme un modèle de mélange liquide $^3He - ^4He$ et ils ont obtenu un diagramme de phase ayant une ressemblance à celui des mélanges d'hélium.

En 1966, c'était Bardeen Baym et Pines qui ont proposé un modèle semiphénoménologique au voisinage de $T = 0^\circ K$. Ce modèle tient compte des interactions entre les fermions. Le diagramme de phase ainsi obtenu est en accord avec les mélanges d'hélium avec des températures inférieures à $0.4^\circ K$.

Ce n'est qu'en 1972 que Blume, Emery et Griffiths ont proposé un modèle d'Ising spin-1. Avec l'approximation de champ moyen ils ont obtenu un diagramme de phase qualitativement similaire à celui des mélanges d'hélium, avec une exception, et c'est que la séparation des phases est complète à $T = 0^\circ K$. Ils ont pu obtenir d'autres diagrammes de phase où les points tricritiques n'apparaissent pas en variant la nature et la longueur des interactions entre spins. L'hamiltonien, décrivant ces systèmes, s'écrit dans sa forme générale comme suit :

$$\mathcal{H} = -H \sum_{j=1}^N S_j + \Delta \sum_{j=1}^N S_j^2 - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H_3 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j (S_i + S_j) - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 \quad (2.25)$$

où chaque spin peut prendre les valeurs 1,0,-1. H représente le champ magnétique externe, Δ est le champ cristallin, J et K sont les interactions d'échange bilinéaire et biquadratique et H_3 est une perturbation magnétique de troisième ordre. On définit les paramètres d'ordre du modèle comme suit :

a-Aimantation m

L'aimantation m rapportée à un site du réseau est :

$$m = \langle S_i \rangle = \frac{\sum_S S_i \exp(-\beta H)}{\sum_S \exp(-\beta H)} \quad (2.26)$$

La sommation étant étendue sur toutes les configurations du système.

b-Ordre quadripolaire q

On désigne par q la valeur moyenne du carré du spin et est donnée par :

$$q = \langle S_i^2 \rangle = \frac{\sum_S S_i^2 \exp(-\beta H)}{\sum_S \exp(-\beta H)} \quad (2.27)$$

2.4.5 Modèle de Blume-Capel

Le modèle de Blume-Capel BC [23] est le modèle BEG [24] sans interaction quadripolaire. Les deux physiciens Blume et Capel ont proposé ce modèle pour étudier les phénomènes tricritiques. Leur modèle montre des transitions du premier et du second ordre. Le modèle BC a été initialement proposé avec le spin-1 pour traiter les systèmes magnétiques et pour décrire la phase de séparation dans des mélanges $He^3 - He^4$ [23, 24]. Il a été nommé modèle BC après avoir été proposé par Blume [23] et Capel [25] dans des études indépendantes.

Ce modèle a été donc utilisé avec différentes méthodes de la mécanique statistique telles que la méthode de l'approximation de champ moyen (MFA) [23], la simulation de Monte-Carlo MC [26], calculs de la matrice de transfert TMFSS [27, 28] et l'approximation à constante de couplage [29] etc ...

Pour des considérations théoriques, étendre l'interaction à des voisins autres que le plus proche voisin était d'un grand intérêt. Dans ce contexte, nous pouvons citer des travaux antérieurs présentant une interaction avec le second voisin qui a créé une sorte de compétition entre les deux types de couplage. Bedahdeh et al. [30] ont étudié l'antiferromagnétique de

spin-1 Modèle BC en considérant ces deux interactions et les résultats, concernant le terrain état, a montré de nouvelles phases frustrées qui apparaissent en plus de celles trouvées par buzzano et al. [31]. On peut également citer un autre travail d'une dizaine d'années après : Dias et al. [32] ont a considéré les deux interactions d'échange pour étudier le modèle BC spin-1 sur un réseau cubique simple.

L'Hamiltonien du modèle Blume-Capel est donc donné par la formule suivante :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{j=1}^N S_j + \Delta \sum_{j=1}^N S_j^2 \quad (2.28)$$

Les spins peuvent prendre les valeurs $s_i = 0, \pm 1$.

Chapitre 3

Etude du diagramme de phase de l'état fondamental du modèle BC à spin-3/2 à interaction avec second voisin

3.1 Définition

Ce chapitre sera consacré à l'étude du modèle de Blume-Capel avec tout ce qu'il représente comme propriétés physiques en faisant comparaison avec les résultats trouvés pour le modèle principal dit le modèle de Blume-Emery-Griffiths [17]. Le modèle proposé est un modèle dérivé du modèle BEG en faisant tendre le membre biquaratique dans l'hamiltonien vers zéro. Notre étude sera faite en introduisant le spin-3/2 qui fait référence aux terres rares et l'interaction avec le second voisin.

3.2 Modèles à spin-3/2

L'étude des terres rares [11] et des mélanges des fluides ternaires [36] a eu pour effet 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 $T_N = 3.0^\circ K$.

Des considérations des théories des groupes ont montré que cet ordre n'est possible que si le $DyVO_4$ a déjà subi un changement de symétrie. Une analyse aux rayons X [11] et des mesures de la chaleur spécifique [37], à basse température, ont montré l'existence de deux transitions de second ordre. L'une à $14^\circ K(T_D)$ où le $DyVO_4$ subit un changement de symétrie : de la symétrie tétragonale à une faible symétrie. Cette distorsion cristallo-graphique est appelée transition de Jahn-Teller. L'autre transition apparaît à $3^\circ K(T_N)$ de la phase orthorhombique vers la phase antiferromagnétique. Nous devons noter que seul le quadruplet $S = 3/2$ participe dans les deux transitions : à T_D il est séparé en deux doublets et à 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.

3.3 Etude du modèle de BC à spin-3/2 à interaction avec le second voisin

Ce modeste travail s'intéresse à l'étude des propriétés physiques d'un modèle, à spin d'ordre supérieur, sur réseau dit le modèle Blume-Capel à spin-3/2 et avec des interactions avec le second voisin. Nous allons nous intéresser uniquement à l'état fondamental et voir les nouvelles phases stables à configurations différentes qui vont apparaître dans les différentes régions des diagrammes de phase obtenus. Pour cela nous allons considérer quelques ordre de grandeur pour les différentes constantes de couplage du l'hamiltonien du modèle donné par l'équation (3-1).

Le modèle BC à spin-3/2 est proposé pour l'étude en considérant, bien entendu, deux types d'interaction une avec le premier voisin et l'autre avec le deuxième sous l'action du champ externe H . L'hamiltonien adopté considère aussi l'effet du champ cristallin. A notre connaissance, ce travail représente une extension à d'autres travaux antérieurs faisant référence à l'étude du modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 à interaction antiferro-

magnétique avec les seconds voisins [33] et l'étude des phases de transition dans le modèle de Blume-Capel à interaction avec second voisin [30].

Nous devons citer aussi une étude de ce modèle avec un spin 3/2 qui a conduit à divers points multicritiques avec un ordre supérieur en utilisant MFA [36, 34], la simulation MC et la méthode TMFSS [35].

Nous allons utiliser la méthode de Monte-Carlo pour la partie numérique pour trouver les différentes énergies minimales et pouvoir par la suite construire les différents diagrammes des états fondamentaux montrant les nouvelles phases et leurs régions.

L'hamiltonien décrivant le modèle considéré s'écrit de la façon suivante :

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle'} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (3.1)$$

où S_i ou $S_j = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$. Il est à noter que cet hamiltonien est la somme de quatre différentes quantités. Les deux premiers termes montrent l'aspect antiferromagnétique du système car $J_1 < 0$ et $J_2 < 0$ portant sur les premiers et deuxièmes voisins respectivement. Les deux derniers termes introduisent l'effet du cristal et des champs magnétiques externes D et H.

3.4 Résultats des simulations

3.4.1 Diagramme de phase à T=0

L'état fondamental correspond aux phases thermodynamiquement stables du modèle. Pour construire les diagrammes de phase, on considère l'équation de l'Hamiltonien du modèle et on décompose le système en quatre sous réseaux a,b,c et d. Puis on calcule l'énergie par plaquette ε_p . Cette énergie est donnée par la formule suivante :

$$\varepsilon_p = -\frac{J_1}{4}(S_a S_b + S_b S_c + S_c S_d + S_d S_a) - \frac{J_2}{2}(S_a S_c + S_b S_d) + \frac{D}{4}((S_a^2 + S_b^2 + S_c^2 + S_d^2) - \frac{H}{4}((S_a + S_b + S_c + S_d) \quad (3.2)$$

3.4.2 Discussions des résultats

Ce travail vise à trouver de nouvelles phases si elles existent pour les différentes valeurs proposées de la constante de couplage J_2 , à savoir $J_2 = 0.5$, $J_2 = 1$ et $J_2 = 1.5$.

Les résultats de la simulation ont montré de nouvelles phases situées dans différentes régions des trois diagrammes construits et donnés comme suit :

-Pour de grandes valeurs de $H(H \rightarrow +\infty)$, l'état fondamental pour les trois cas (figures 3-1, 3-2 et 3-3) est ferromagnétique avec des spin up : $S = +3/2$ et la configuration est donnée par $(3/2 \ 3/2 \ 3/2 \ 3/2)$.

-Pour de petites valeurs de $H(H \rightarrow -\infty)$, l'état dominant est ferromagnétique avec des spin $S = -3/2$ et la phase est donnée par la configuration suivante $(-3/2 \ -3/2 \ -3/2 \ -3/2)$.

-Pour des régions de grandes valeurs du champ cristallin $D(D \rightarrow +\infty)$, nous avons trouvé que seulement les phases dont les configurations comportent le spin $S = +1/2$ ou $S = -1/2$ apparaissent pour les trois cas considérés, et deviennent défavorables dans des régions où le champ cristallin est négatif ($D \rightarrow -\infty$) ou tous les spins sont soit $S = +3/2$ ou $S = -3/2$.

-Pour des valeurs intermédiaires de D et de H , on remarque l'apparition de nouvelles phases à cause de la grande compétition entre spin dans des régions à grande dégénérescence.

3.4.3 Conclusion

Les diagrammes de phase de l'état fondamental ont montré l'apparition de nouvelles phases dégénérées, des phases non trouvées par Bakchich et al. [34] et non présentes dans

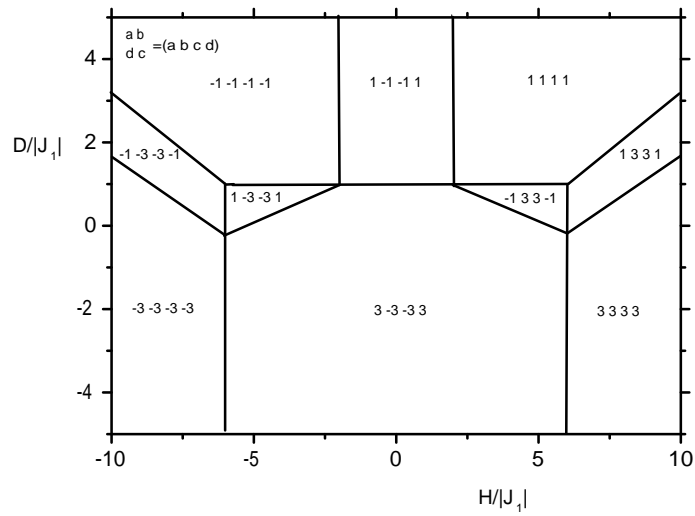


FIGURE 3.1 – Diagramme de phase de l'état fondamental pour $|J_1| = 1$ et $|J_2| = 0.5$

[33]. Nous pouvons aussi ajouter que pour des valeurs de $J_2 < 0.5$, nous avons trouvé les memes diagrammes de phase que ceux trouvés dans l'étude [35].

Chapitre 4

Conclusion générale

Comme nous avons étudié le modèle de Blume-Emery-griffiths avec des grandeurs de spin différentes sur des réseaux variés, on a proposé pour l'étude un autre modèle important, dérivé du premier, à savoir le modèle de Blume-Capel. A notre connaissance, l'étude est originale du fait qu'on introduit le spin $3/2$ et en considérant l'interaction avec le second voisin. Nous nous sommes intéressé à l'étude des états fondamentaux pour construire les diagrammes de phase associés.

Pour ce fait, nous avons donné, dans une première partie, des notions générales sur le magnétisme. Nous avons mis l'accent sur les transitions de phase qui se manifestent au niveau des matériaux à cause de quelques modifications des paramètres extérieures. Nous avons donné aussi des informations sur la classification des substances magnétiques avant de parler par la suite des phénomènes critiques qui accompagnent les transitions continues en donnant l'exemple de quelques exposants critiques qui résultent de ces phénomènes.

Dans une deuxième partie, nous nous sommes intéressé aux différentes méthodes utilisées dans la mécanique statistique pour résoudre ce type de système. Nous avons parlé des méthodes approximatives et nous avons expliqué avec détails une des méthodes exactes utilisées. Il s'agit de la méthode de Monte-Carlo, avec tout son poids, et du l'algorithme de Métropolis. Nous avons expliqué quelques généralités sur les modèles de spin sur réseau en donnant quelques exemples de ces fameux modèles.

Dans une troisième partie, nous avons présenté notre travail de simulation qui concerne

l'étude de l'état fondamental du modèle de Blume-Capel BC à spin-3/2 avec interaction avec second voisin. De nouvelles phases dégénérées sont apparues dans les diagrammes de phase construits associés à différentes valeurs proposées pour les constantes d'interaction. Cette nouvelle topologie fera, sans doute, l'objet des études approfondies du système considéré à des températures finies différentes du zéro en utilisant quelques méthodes de la mécanique statistique utilisées pour résoudre ces systèmes physiques.

Bibliographie

- [1] H. Fedner, Propriétés magnétiques de systèmes à deux dimensions : système frustré de spins sur réseau carré et propriétés magnétiques de systèmes, thèse de doctorat, Université de Strasbourg, (2012).
- [2] R.Yessoufou, Magnétisme de systèmes de spins mélangés sur des réseaux ordinaires et récursifs, thèse de doctorat, Université d.Abomey-Calavi, BÉNIN, (2012).
- [3] F.Benrezzak, Etude du modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 antiferromagnétique sur réseau triangulaire, thèse de master, Université Abou-Bekr Belkaid - Tlemcen, (2017).
- [4] S.Zriouel, Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone, thèse de doctorat, Université Mohammed V-Rabat, (2016).
- [5] W. E. Hatfield, "Theory and Applications of Molecular Paramagnetism", Eds. E.A. Boudreaux, L. N. Mulay, Wiley New York, (1976) 491.
- [6] A. Pacault, Rev. Sci., 86, (1948) 38.
- [7] P. Pascal, Ann. chim et Phys.,19, (1910) 5.
- [8] P. Pascal, Ann. chim et Phys.,25, (1912) 289.
- [9] " Théorie du magnétisme ", Eds CEA, (1910) 34.
- [10] " Physique de l'état solide ", 7^{ime} Ed., Eds Dunod, Paris, (1998) 379.

- [11] A.H. Cooke, D.M. Martin and M.R. Wells, *J. Phys.(Paris) C1* (1971) 488.
- [12] L. D. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion* 11, 26, (1937); reprinted in *Collected Papers of L. D. Landau* ed. D. ter Haar (Pergamon Press, New York, 1965).
- [13] M. E. J. Newman et G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statical Physics*, Oxford University press, 2002.
- [14] Y. Dodge et G. Melfi, *Premiers pas en simulation*, Springer, 2008.
- [15] M. P. Allen et D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, 1991.
- [16] N. Metropolis et S. Ulam, the monte carlo method, *Journal of the American Statistical Association*, 44 (1949) 335.
- [17] M.Yezli, *Etude de quelques modèles de spin sur réseaux*, Thèse de doctorat, Université Abou-Bekr Belkaid - Tlemcen, (2016).
- [18] M.Heritier, *Mécanique statistique et transitions de phase*, DEA, région parisienne, (1998).
- [19] C. Gaetan et X. Guyon, *Modélisation et statistique spatiales*, Springer, (2011).
- [20] B. A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*, World Scientific, (2004).
- [21] A. Bakkali, M. Kerouad and M. Saber, *Physica A* 229 (1996) 563.
- [22] P.D. Beale, *Phys. Rev. B* 33 (1986) 1717
- [23] M. Blume, *Phys. Rev.* 141, 517 (1966); H.W. Capel, *Physica* 32, 966 (1966).
- [24] M. Blume, V.J. Emery, R.B. Griths, *Phys. Rev. A* 4, 1071 (1971).
- [25] H. W. Capel, *Physica (Utrecht)* 32, 966 (1966); 33, 295 (1967).
- [26] B.L. Arora, D.P. Landau, *Proc. AIP* 5, 352 (1972).

- [27] P.D. Beale, Phys. Rev. B 33, 1717 (1986).
- [28] J.G. Brankov, J. Przystawa, E. Praveczi, J. Phys. C 5, 3387 (1972); D.M. Saul, M.
- [29] M. Takana, K. Takahachi, Phys. Stat. Sol. B 93, L 85 (1979).
- [30] M. Badehdah, S. Bekhechi, A. Benyoussef and M. Touzani, Eur. Phys. J. B 4, (1998) 431.
- [31] C. Buzano, L.R. Evangelista, A. Pelizzola, Phys. Rev. B 53, 15063 (1996).
- [32] D.A.Dias, J.A. Plascak, Phys. Lett. A (2011) 2089.
- [33] M.Yezli, Phase transition in the spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths model with antiferromagnetic second neighbor interactions, Physica A 448 (2016) 81.
- [34] A. Bakchich, S. Bekhechi, A. Benyoussef, Physica A 210 (1994) 415.
- [35] S. Bekhechi, A. Benyoussef, Phys. Rev. B 56 (1997) 13954.
- [36] S. Krinsky and D. Mukamel, Phys. Rev. B 11 (1975) 399.
- [37] A.H. Cooke, D.M. Martin and M.R. Wells, Solid State Communications, Vol. 08 (1970) 689.

Abstrat:

We try to study the model of spin on lattice which is the Blume-capel model (BC) having as particularities, with other previous works, the introduction of the $S = 3/2$ and considering interactions with the first $\langle i; j \rangle$ and the second $\langle i; j \rangle'$ neighbors. The proposed Hamiltonian emphasizes these two types of interactions with, of course, effect of the crystal field in addition to that of the magnetic field. We have constructed phase diagrams for zero temperatures, in order to highlight the new stable phases that appear in different regions

Keywords:

Blume–Capel model (BC) ; Spin-3/2 ; second neighbor ; Monte-Carlo simulations (MC).

Résumé :

Nous essayons d'étudier le modèle de spin sur réseau qui est le modèle de Blume-capel (BC) ayant pour particularités, avec d'autres travaux antérieurs, l'introduction du $S = 3/2$ et en considérant les interactions avec le premier $\langle i; j \rangle$ et le second $\langle i; j \rangle'$ voisins. L'hamiltonien proposé met l'accent sur ces deux types d'interactions avec, bien entendu, l'effet du champ cristallin en plus de celui du champ magnétique. Nous avons construit des diagrammes de phase pour les températures nulles, afin de mettre en évidence les nouvelles phases stables qui apparaissent dans différentes régions.

Mots clés :

Le modèle de Blume-Capel (BC) ; spin-3/2 ; interaction avec second voisin ; les simulations de Monte-Carlo.

الملخص:

نحاول دراسة نموذج الدوران على الشبكة وهو نموذج (BC) Blume-capel الذي يتميز بخصوصيات ، مع الأعمال السابقة الأخرى ، وإدخال $S = 3/2$ والنظر في التفاعلات مع الجيران الأول $\langle i; j \rangle$ والثاني $\langle i; j \rangle'$. يؤكد هاميلتوني المقترح على هذين النوعين من التفاعلات مع تأثير المجال البلوري بالطبع بالإضافة إلى تأثير المجال المغناطيسي. لقد أنشأنا مخططات لدرجات الحرارة الصفرية ، من أجل إبراز المراحل المستقرة الجديدة التي تظهر في مناطق مختلفة.

كلمات رئيسية:

نموذج (BC) Blume-Capel ; طريق (MC) Monte-Carlo ; التفاعل مع الجار الثاني.