



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



**UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN**

## MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

**MASTER EN PHYSIQUE**

Spécialité : Modélisation, Simulation et Applications de la Physique

Par :

**M<sup>me</sup> BENREZZAK Fatiha ép. BELMOKHTAR**

Sur le thème

---

### **Etude du modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 antiferromagnétique sur réseau triangulaire**

---

Soutenu publiquement le 20/06/2017 devant le jury composé de :

Mr Abdelkrim MERAD	Professeur à l'Université de Tlemcen	Président
Mr Smaïne BEKHECHI	Professeur à l'Université de Tlemcen	Encadreur
Mr Nasr-Eddine CHABANE SARI	Professeur à l'Université de Tlemcen	Examineur
Mr Tayeb BENOUAZ	Professeur à l'Université de Tlemcen	Examineur
Mr Abdelhak CHIKHAOUI	MCA à l'Université de Tlemcen	Examineur
Mr Nabil BRAHMI	MCB à l'Université de Tlemcen	Examineur

*Laboratoire Automatique Tlemcen(LAT)  
Tlemcen - Algérie*

# Dédicaces

*J'exprime ici ma grande gratitude à mes chers parents,  
pour leurs soutiens tout le long de ma vie*

*À ma belle mère et beau père.*

*À mon cher mari pour son soutien, son encouragement*

*À mes chères sœurs, et belles sœurs*

*À mes chers frères, et beaux frères*

*Et pour mes chères collègues (Benmokrane Sara,*

*Brahimi Asma, Benmansour Amel et Amimer*

*Zakariya)*

*À tous ceux qui me sont chers.*

*Fatiha*

# Remerciements

Je tiens à remercier de manière très particulière et à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur *Smaine BEKHICHI*, professeur à l'université *Abou-Bekr BELKAID*, Tlemcen, directeur de mémoire de m'avoir proposé et dirigé ce sujet, ainsi que pour sa disponibilité et son soutien, Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à Monsieur *Tayeb BENOUAZ* Professeur à l'Université de Tlemcen

Par ailleurs, je voudrais vivement remercier le professeur *Mr Abdelkrim MERAD*, Professeur à l'Université de Tlemcen pour avoir accepté de participer à ce jury en tant que président de Jury. A l'ensemble des membres du jury, j'adresse toute ma reconnaissance aux messieurs *Nasr-Eddine CHABANE SARI* et *Mr Tayeb BENOUAZ* professeurs à l'Université de Tlemcen et *Mr Abdelhak CHIKHAOUI MCA* à l'Université de Tlemcen et *Mr Nabil BRAHMI MCB* MCB à l'Université de Tlemcen pour avoir accepté d'être membres à mon jury de mémoire.

Je voudrais également remercier madame *Rania Boudefla*, ce qui m'a aidé dans cette période de leur expérience dans le domaine de physique.

Nos remerciements s'étendent également à tous nos enseignants durant les années des études.

Enfin j'adresse mes plus sincères remerciements à mes parents et à mon tendre époux pour avoir toujours été à mes côtés pendant cette année.

# Table des matières

Dédicaces.

Remerciements.

Table des matières

Table des figures.

Liste des tableaux.

.Introduction générale.....1

## **Chapitre I Considérations générales sur le magnétisme et les matériaux magnétiques**

I.1 Etude du magnétisme.....5

I.2 Les différents comportements magnétiques de la matière.....6

I.2.1 Le diamagnétisme.....6

I.2.2 Le paramagnétisme.....7

I.2.3 Le ferromagnétisme.....8

I.2.4 L'antiferromagnétisme.....8

I.2.5 Le ferrimagnétisme .....9

I.3 Origine microscopique.....10

I.4 Anisotropie magnétique .....11

I.4.1 L'anisotropie magnéto cristalline.....11

I.4.2 Anisotropie magnéto élastique.....12

I.4.3 L'anisotropie de forme.....13

I.4.4 Anisotropie de surface.....13

I.4.5 Anisotropie d'échange.....14

I.5 Aimantation des matériaux ferromagnétiques.....15

I.5.1 Domaines et parois.....15

I.5.2 Processus d'aimantation.....	16
a) Courbe de première aimantation.....	16
b) Modèle de Rayleigh .....	16
c) L'hystérésis.....	18
I.6 Classification des matériaux ferromagnétiques.....	19
I.7 L'influence de la température sur le comportement magnétique .....	20
BIBLIOGRAPHIQUES .....	21

## **Chapitre II Généralités sur les transitions de phase**

II.1 Introduction.....	24
II.2 Transitions de phase.....	27
II.3 Classification des transitions de phase.....	27
II.2.1 Classification d'Ehrenfest (1880-1933).....	28
II.2.2 Classification de Landau (1908-1968).....	30
II.4 Théories de Landau des transitions de phases.....	32
II.4.1 Développement de l'énergie libre.....	33
II.4.2 Transition du second ordre.....	33
II.4.3 Transition du premier ordre.....	35
II.5 Phénomènes critiques.....	36
II.5.1 Exposants critiques.....	38
II.5.2 L'invariance d'échelle.....	38
II.6 Modèle d'Ising: introduction.....	40
II.6.1 Définition.....	40
II.6.2 Le modèle d'Ising à une dimension.....	41
II.6.3 Modèle d'Ising à deux dimensions.....	42
II.7 Le modèle d'Ising dans l'approximation du champ moyen.....	43
II.7.1 Version simple.....	43
BIBLIOGRAPHIQUES.....	45

## **Chapitre III Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 frustré sur un réseau triangulaire**

III.1 Introduction.....	48
III.2 Définition du modèle BEG .....	49
III.3 Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 frustré sur un réseau triangulaire .....	50

III.3.1 L'Hamiltonien du modèle .....	50
III.3.2 Diagramme de phases à l'état fondamental $T=0$ .....	50
III.3.3 La méthode du champ moyen $T \neq 0$ .....	56
III.3.4 Résultat.....	58
BIBLIOGRAPHIQUES.....	61
III.4 Conclusion générale.....	63

# Table des figures

I.1 – Schématisation présente l'arrangement des spins par rapport à la température le champ magnétique $H$ .....	7
I.2 – (a) ; Schématisation de la structure en domaines d'un matériau antiferromagnétique. (b) ; Antiferromagnétisme.....	9
I.3 – Ferrimagnétisme.....	10
I.5 – Définition des angles $\theta$ et $\varphi$ pour respectivement l'aimantation $M$ et e champ magnétique $H$ par rapport à la normale $n$ de l'échantillon.....	12
I.7– Structure de la paroi de Bloch séparant deux domaines .....	15
I.8 – (a) Courbe de première aimantation OA, (b) décomposition de la courbe de première aimantation.....	17
I.9 – Cycle d'hystérésis d'un matériau aimanté.....	19
II.1 – Diagramme de phase d'un fluide (l'eau). Toute la transition de phase est du premier ordre sauf au point critique $(P_c, T_c)$ . Delà de $(P_c, T_c)$ il est possible de se déplacer en continu d'un liquide à un gaz. On pense que la frontière entre les phases solide et liquide est toujours du premier ordre et ne se termine pas dans un point critique.....	25
II.2 – (a) diagramme de phase d'un ferromagnétique simple. Une ligne de transitions de premier ordre à $H = 0$ se termine en un point critique à une température $T_c$ . (b) Courbe d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique à différentes températures. Pour $T < T_c$ , l'aimantation présente une discontinuité quand le champ magnétique change de signe. Cette discontinuité n'excite plus pour $T > T_c$ .....	26

II.3 – Exemple de diagramme de phase montrant un point tricritique. Dans le cas présent ici, il s’agit d’un matériau antiferromagnétique. On suppose dans le cas présent, que l’ordre de la transition change sous l’effet d’un champ magnétique uniforme. Ce champ n’est pas le champ couple à l’aimantation.....	27
II.4 – Schématisation d’une ligne de transition séparant deux phases I et II.....	28
II.5 – Enthalpie libre, entropie, et capacité thermique en fonction de la température pour une transition de phase du premier ordre.....	32
II.6 – Enthalpie libre, entropie, et capacité thermique en fonction de la température pour une transition de phase du second ordre.....	32
II.7 – Théorie de Landau. Allure générale de l’énergie libre pour $a > 0$ , $a = 0$ et $a < 0$ .....	34
II.8 – Théorie de Landau d’une transition du premier ordre.....	36
II.9 – Configuration aléatoire du modèle d’Ising en $T = T_c$ .....	39
II.10 – Le réseau carré est replié sur lui-même pour former un tore sur lequel chaque site a exactement 4 voisins.....	41
II. 11– Principe de l’approximation du champ moyen.....	43
III.1 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $J_1 = -1$ et $J_2 = -1,25$ .....	51
III.2 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $J_1 = -1$ et $J_2 = -0,25$ .....	52
III.3 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $J_1 = -1$ et $J_2 = 0$ .....	53
III.4 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour $J_1 = -1$ et $J_2 = 0,25$ .....	54

# Liste des tableaux

I.1 : donne quelques matériaux diamagnétiques et leur susceptibilité.....	6
III.1 : Les différentes phases stables et ses énergies.....	55

**INTRODUCTION GENERALE**

# Introduction générale

---

## Introduction générale

La physique statistique est une branche sur laquelle est basé ce travail de mémoire, elle est appelée aussi mécanique statistique, qui est l'un des domaines essentiels de la physique moderne, est à la base de nombreux développements actuels à la frontière de la science des matériaux, pour lesquels une approche classique macroscopique est inadaptée. Elle permet de justifier la thermodynamique statistique, qui exploite le comportement collectif des molécules pour faire des prévisions sur les propriétés macroscopiques d'un système à l'équilibre. Elle intervient dès que l'on doit traiter des systèmes constitués d'un grand nombre de particules microscopiques qui peuvent être elles-mêmes composites (molécules, atomes, électrons, quarks, . . .). Tout physicien ou chimiste a un jour besoin, au cours de ses études ou de sa vie professionnelle, de notions de physique statistique. Cette dernière et la modélisation numérique permettent de définir de nombreux paramètres mesurables ( $T, P, V . . .$ ) pour décrire les propriétés macroscopiques d'un système à l'équilibre [1].

Le terme magnétisme provient du nom Magnésia, région de la Thessalie, d'où est extraite la magnétite. Les premières discussions scientifiques autour du magnétisme sont attribuées à Aristote et Thalès de Millet vers 600 av. J.C. et la découverte de l'aimantation est attribuée à Platon vers 500 av. J-C. Ainsi, la première application du magnétisme fut une boussole inventée environ 4000 ans av. J-C. en chine pour trouver le chemin vers l'harmonie, à cause de son aimant qui s'aligne sur le champ magnétique terrestre. Le modèle d'Heisenberg et le modèle d'Hubbard sont les deux modèles fondamentaux permettant l'étude du magnétisme. On considère en général des modèles de spins pour étudier le magnétisme d'un composé à électrons localisés sur les sites du réseau, la géométrie du réseau et la nature quantique des spins affecte fortement les états ordonnés résultants s'ils existent [2].

L'étude des propriétés des matériaux magnétiques sont toujours d'actualité pendant le monde qui donne toujours les ordres de nouvelles perspectives. Cette étude a commencé durant les moyens âges. A la fin du 16<sup>ème</sup> siècle William Gilbert (1544 – 1603) réalisait une étude expérimentale du champ magnétique d'une sphère aimantée qui apportait à équilibrer la terre elle-même à un grand aimant sphérique [3].

# Introduction générale

---

Du fait de leur nombreuses applications technologiques, les matériaux magnétiques ont, à l'échelle mondiale une importance économique [4]. A l'échelle internationale, les travaux de recherche n'abandonnent de fortifier dans le domaine des matériaux au sein de toutes les disciplines des sciences qu'elles soient technologiques, biologiques, médicales .... Principalement, les travaux s'intéressent dans le domaine des sciences technologiques. Ces matériaux ont des potentialités très importantes pour réaliser des fonctions hyperfréquences qui nécessitent la présence de phénomènes non réciproques. Dans la recherche de propriétés (optimales mécaniques, électriques, magnétiques, thermiques...) ce qui conduit généralement à la construction d'un problème dont les propriétés physiques du matériau (perméabilité magnétique, conductivité électrique, conductivité thermique, permittivité électrique ...) sont dépendantes de la contrainte appliquée [5].

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. Le réseau de Bethe en est un exemple et de nombreux problèmes sont exactement solubles sur un tel réseau. 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 [6].

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) [7].

Les premières transitions de phase observées ont été des changements d'état tels que la fusion de la glace ou la vaporisation de l'eau. Lors d'un changement d'état, le système, au sens de la thermodynamique, se présente comme la réunion de deux sous-systèmes homogènes possédant des propriétés distinctes. On appelle phase chacun de ces sous-systèmes. Plus précisément, une phase est une partie homogène, physiquement distincte, séparée des autres parties du système par une surface définie. La phase sous laquelle un système se présente est déterminée par la connaissance d'un certain ensemble de paramètres : température, pression, champ électrique ou magnétique, etc. Si, pour diverses valeurs de ces paramètres, le système

# Introduction générale

---

peut se présenter sous des phases différentes, il est possible d'observer le passage d'une phase à l'autre en modifiant continûment la valeur des paramètres. Dans ce cas, on dit qu'il y a un changement de phase, ou transition de phase. Généralement, le comportement d'un paramètre d'ordre au point critique peut être de deux types: discontinu ou continu. Le paramètre d'ordre est donc une quantité physique [8].

Cette thèse est divisée en trois chapitres principaux :

**Dans le premier chapitre,** nous rappellerons les différents comportements magnétiques de la matière. Nous allons parler aussi sur les aimantations des matériaux et quelques notions des systèmes magnétiques.

**Dans le deuxième chapitre,** est consacrée à la présentation des transitions de phase où nous avons présenté les critères de classification telle que la théorie de Landau, sans oublier quelques explications sur le modèle d'Ising.

**Le dernier chapitre** sera consacré à la présentation de notre travail de fond. Nous avons étudié le modèle Blume-Emery-Griffiths (BEG) spin  $-3/2$  par la méthode exacte qui concerne à trouver le diagramme de phase des états fondamentaux ( $T = 0$ ).

Ensuite par la méthode du champ moyen à  $T \neq 0$ .

# **CHAPITRE I**

### I.1 Etude du magnétisme

Le magnétisme désigne l'ensemble des phénomènes qui ont existé autour des matériaux aimantés, cette aimantation soit naturelle ou qu'elle soit le résultat d'un champ d'induction électrique ou magnétique. 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) [9]. 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 des statistiques quantiques.

Comme le magnétisme a plusieurs applications, On s'intéresse sur la physique des particules au niveau de l'atome c'est du niveau microscopique, le mouvement des électrons crée un champ magnétique, Ceci conduit à définir deux notions élémentaires qui sont : le moment orbital et le moment de spin selon le sens de rotation. Enfin, le moment magnétique total de l'atome est la somme des moments orbitaux et des moments de spin.

Naturellement, les électrons de moments magnétiques opposés ont l'objectif à faire collecter par paires. Donc l'aimantation  $\vec{M}$  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, nickel et les terres rares, sont les seuls éléments à porter un tel moment magnétique.

La caractéristique fondamentale des matériaux magnétiques est leur réponse à un champ magnétique qui leur est appliqué. Cette réponse est décrite par une grandeur sans unité qui est la susceptibilité magnétique  $\chi$ . Elle est définie comme suit [10]:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (I. 1)$$

## I.2 Les différents comportements magnétiques de la matière

### I.2.1 Diamagnétisme

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 [11]. 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. Un matériau diamagnétique isotrope est donc caractérisé par une susceptibilité magnétique négative et varie entre  $10^{-6}$  et  $10^{-5}$ , selon le (tab I.1) [10]. Il existe plusieurs matériaux diamagnétiques comme le cuivre ; l'argent ; l'or ; sont les plus connus.

<b>Matériaux</b>	<b><math>-\chi (10^{-6})</math></b>
<b>Cu</b>	<b>11.8</b>
<b>Au</b>	<b>34</b>
<b>Si</b>	<b>3.4</b>
<b>Ge</b>	<b>7.25</b>
<b>Alumine</b>	<b>12</b>

**Tab I.1 : Quelques matériaux diamagnétiques et leur susceptibilité.**

Dans un champ magnétique, on un matériau diamagnétique s'aimante, il provoque son propre champ magnétique  $\vec{H}_D$ . Donc Le champ magnétique global  $\vec{H}$  c'est la somme du champ propre et le champ imposé  $\vec{H}_0$ .

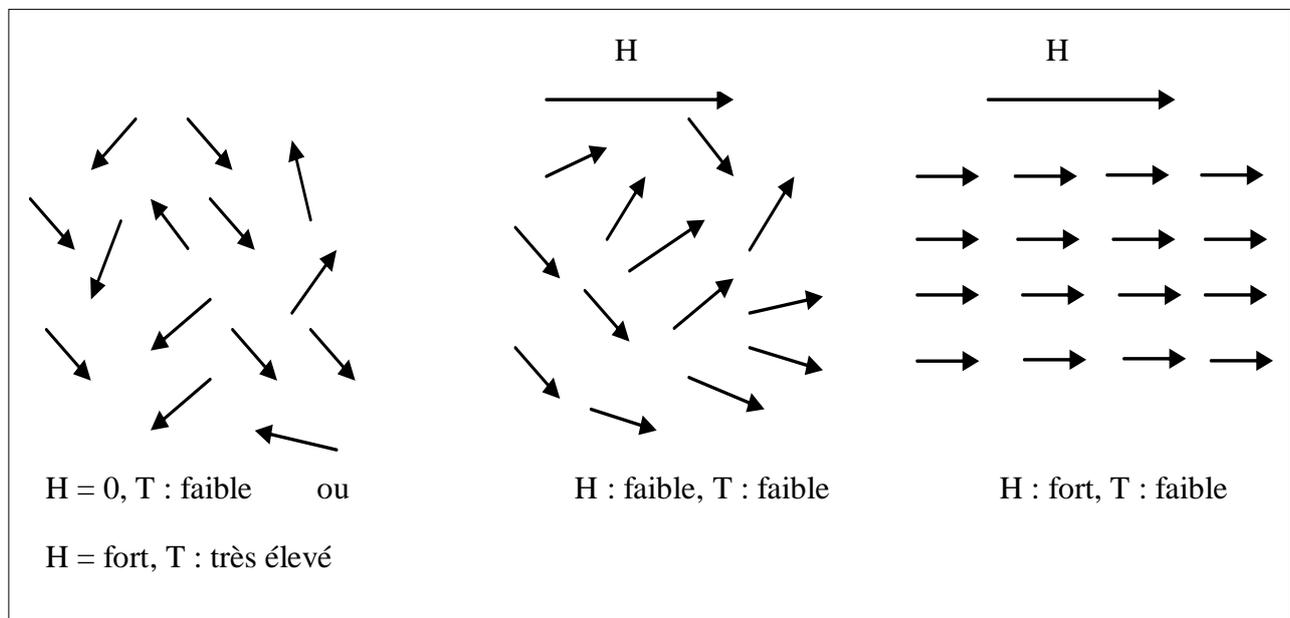
$$\vec{H} = \vec{H}_D + \vec{H}_0 \quad (1. 2)$$

### I.2.2 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 [12], les moments magnétiques s'alignent selon sa propre direction (figure I.1), 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.

Ce genre de matériaux a une susceptibilité positive, faible et dépendante de la température (selon la loi dite de Curie) à l'ambiante elle varie entre  $10^{-6}$  et  $10^{-4}$  [9].



**Figure I-1 : Schématisation présente l'arrangement des spins par rapport à la température et le champ magnétique H.**

### I.2.3 Le ferromagnétisme

La théorie classique du ferromagnétisme (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 [9].

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

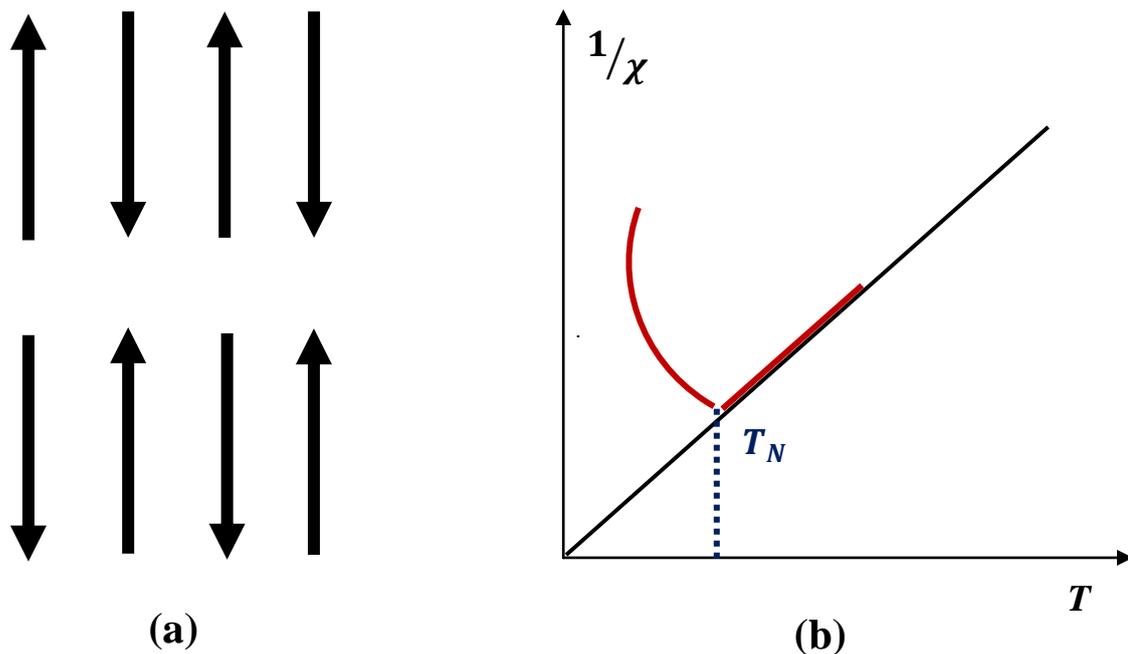
Ces matériaux capables de conserver une aimantation même en l'absence de champ magnétique extérieur. Par contre, l'application d'un champ magnétique inverse ou l'augmentation de la température (température de Curie, ex. Fer : 770°C) l'aimantation persiste plus ou moins. En conséquence, leur susceptibilité est importante, varie de 100 à  $10^6$ .

### I.2.4. L'antiferromagnétisme

Il existe deux réseaux de moments magnétiques opposés et d'amplitudes identiques sur leur structure cristalline. La résultante de ces moments à l'échelle du matériau est donc nulle: les moments se compensent.

Les atomes ont un moment magnétique permanent, ce dernier s'organise de façon antiparallèle ce qui produit en l'absence du champ magnétique une aimantation globale nulle et la susceptibilité est faiblement positive (figure I.2(a)).

A cause d'une certaine température dite de Néel ( $T_N$ ), L'agitation thermique perturbe l'ordre antiferromagnétique c.à.d. le couplage entre les moments s'annule, donc on trouve un comportement paramagnétique (figure I.2 (b)).



**Figure I-2 ; (a) Schématisation de la structure en domaines d'un matériau antiferromagnétique. (b) ; Antiferromagnétisme**

### I.2.5 Le ferrimagnétisme

Comme pour les antis ferromagnétiques ils ont des réseaux de moments magnétiques opposés, mais cette fois d'amplitudes différentes. Le moment magnétique résultant n'est donc pas nul. Ils se comportent comme des matériaux ferromagnétiques mais avec des champs coercitifs très élevés et des valeurs de saturation de l'aimantation faibles .c.à.d., pour le ferrimagnétisme, n'a pas de compensation exacte des aimantations, à cause des deux structures de réseau qu'on appellera A et B qui sont déséquilibrées en ayant des moments  $m_a$  et  $m_b$  de modules différents et avec des orientations antiparallèles [10].

Dans un matériau ferrimagnétique, les sens des moments magnétiques voisins sont opposés et les directions sont parallèles et ce qui devrait mener à une aimantation globale non nulle car les différents moments magnétiques élémentaires ne présentent pas le même module. La figure (I.3 (a)) donne un exemple extrêmement schématique d'un tel corps; bien qu'il existe à l'état ordonné des moments de direction opposé.

Aussi, ce genre de matériau comme les ferrites [5], spinelles, les corps cristallins à base d'oxyde de fer dont les propriétés magnétiques se situent entre celles des matériaux antiferromagnétiques et ferromagnétiques. Au dessus de la température de Curie, le comportement global est très proche du paramagnétisme, leur susceptibilité suivant alors la loi de Curie-Weiss (figure I.3(b)).

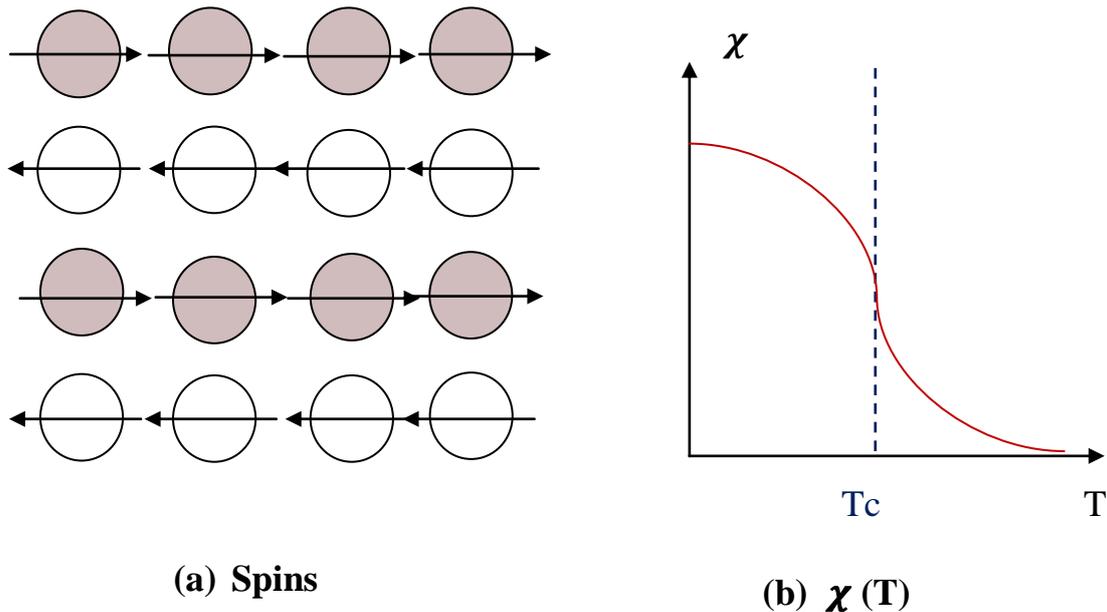


Figure I-3 : Ferrimagnétisme

### I.3 Origine microscopique

Pour comprendre les mécanismes qui ont lieu dans les matériaux magnétiques, dont la susceptibilité magnétique est déterminée dans un calcul quantique il est indispensable de revenir à des considérations basiques de thermodynamique et de physique statistique [13]. Dans un matériau paramagnétique, il est obligatoire la présence d'un champ magnétique externe pour une aimantation non nulle, cette dernière a une propriété du système hors-équilibre et peut être caractérisée par la variation d'énergie totale du système ( $E$ ) engendrée par un champ magnétique externe  $\vec{H}$ .

$$\vec{M} = -\partial E / \partial \vec{H} \quad (I.3)$$

Au niveau microscopique et comme l'aimantation s'aligne, des moments magnétiques portés par les atomes ou les molécules qui constituent le matériau, l'aimantation sera d'écrire par :

$$\vec{M} = \sum \overline{\mu\vec{n}} \quad (I.4)$$

Avec  $\overline{\mu\vec{n}}$ , le moment magnétique d'un atome ou d'une molécule dans l'état électronique.

### I.4 Anisotropie magnétique

Anisotropie magnétique est présente lorsque les propriétés magnétiques d'un système sont fonction de la direction : traduit le fait que son énergie libre dépend de la forme du matériau et de l'orientation de son aimantation par rapport à ses axes cristallographiques. C'est le cas par exemple lorsque l'aimantation suit des directions privilégiées. Des types principaux d'interaction sont à l'origine de l'anisotropie magnétique:

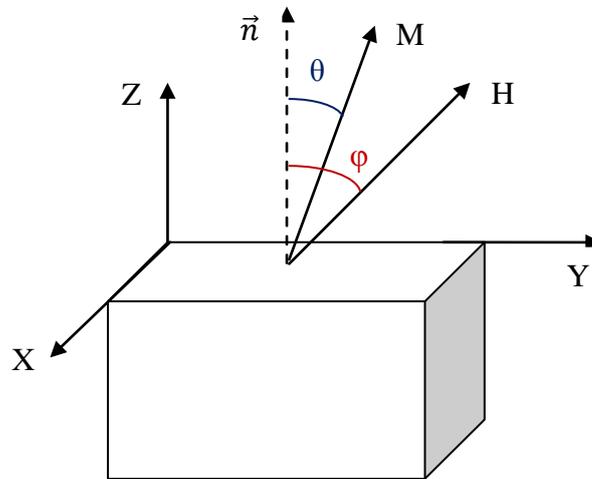
#### I.4.1 L'anisotropie magnéto cristalline

L'anisotropie magnéto-cristalline [14] a principalement pour origine le couplage spin-orbite, c'est à dire au couplage qui lie le spin de l'électron et son mouvement orbital. Cette anisotropie dépend de l'orientation de l'aimantation  $\vec{M}$  par rapport aux axes cristallographiques. Suivant certains axes du réseau cristallin et à la présence d'un champ appliqué l'aimantation sera donc plus facile à aligner comme le cas du fer. Au contraire, dans certaines directions il est plus difficile d'aimanter un échantillon monocristallin.

Dans le cas des cristaux hexagonaux (cas du cobalt), on peut développer l'énergie en fonction de l'angle  $\theta$  de l'aimantation par rapport à l'axe  $\vec{n}$  à température ambiante pour une symétrie uni axiale l'expression s'écrit :

$$E_{mc} = K_u \cos^2 \theta \quad (I.5)$$

Où  $K_u$  la constante d'anisotropie uni axiale et  $\theta$  l'angle entre la normale  $\vec{n}$  et la direction de l'aimantation  $\vec{M}$ , voir (figure I.4).



**Figure I-4 : Définition des angles  $\theta$  et  $\varphi$  pour respectivement l'aimantation  $M$  et le champ magnétique  $H$  par rapport à la normale  $n$  de l'échantillon.**

### I.4.2 Anisotropie magnéto élastique

L'énergie magnéto-élastique [14] est due à l'interaction entre l'aimantation et les déformations mécaniques du réseau cristallin. Lorsqu'un matériau ferromagnétique (dans le cas des matériaux présentant un fort moment magnétique) est soumis à une tension ou à une compression, sa courbe d'aimantation est modifiée. Ainsi, tout changement de direction de l'aimantation spontanément en jeu une énergie élastique, appelée énergie d'anisotropie magnéto-élastique ou magnétostriction. Ces directions étant alignées dans des directions cristallines, il en résulte une légère déformation de la maille, qui se traduit pour un monocristal par une déformation macroscopique.

La magnétostriction est positive pour le fer c'est-à-dire que la maille est légèrement allongée dans le sens de la magnétisation, pour le nickel la maille est légèrement aplatie c'est-à-dire la magnétostriction est négative.

Pour exprimer la dépendance de l'énergie d'anisotropie due aux déformations, on peut développer l'énergie en série de Taylor sur les composantes du tenseur de déformation :

$$E = E_0 + \sum_{i \geq j} \left( \frac{\partial E}{\partial e_{ij}} \right)_0 e_{ij} + \dots \quad (I.6)$$

Où les  $e_{ij}$  désignent les composantes du tenseur de déformation.  $E_0$  doit satisfaire la symétrie cubique mais les termes  $\left( \frac{\partial E}{\partial e_{ij}} \right)_0 e_{ij}$  peuvent avoir une symétrie plus basse car ils se réfèrent au cristal déformé.

### I.4.3 L'anisotropie de forme

Dans un matériau magnétique, l'existence du champ démagnétisant est responsable de l'anisotropie de forme, Si le matériau est de forme allongée il est plus facile de l'aimanter selon la plus grande direction [15].

Le champ démagnétisant d'un solide d'aimantation  $M$  de forme ellipsoïdale est donné par :

$$\vec{H}_d = -\overline{N}_d \vec{M} \quad (I.7)$$

Où  $\overline{N}_d$  est le tenseur démagnétisant.

L'énergie du système d'interaction d'un aimant permanent d'aimantation  $M$  s'écrit :

$$E = -\frac{1}{2} \mu_0 M \cdot H = \frac{1}{2} \mu_0 M \cdot (\overline{N}_d \cdot M) \quad (I.8)$$

Le facteur  $\frac{1}{2}$  est introduit pour ne pas compter les interactions entre dipôles deux fois

### I.4.4 Anisotropie de surface

Dans le cas des surfaces anisotropes [15], La connaissance des degrés d'anisotropie d'une surface, l'identification des directions privilégiées et de leurs orientations contribuent de manière prépondérante à l'optimisation fonctionnelle des systèmes dans leur entier.

Cette anisotropie se manifeste à cause de la rupture de symétrie à la surface et de la baisse du nombre de plus proches voisins. L'énergie associée s'écrit comme :

$$E_{an}^{surf} = K_s V \sin^2 \alpha \quad (I.9)$$

Où  $K_s$  l'anisotropie de surface.

Et  $\alpha$  l'angle entre l'aimantation et la normale à la surface.

Elle peut devenir prépondérante pour des particules de petite taille en raison de l'augmentation du rapport surface/volume.

### I.4.5 Anisotropie d'échange

L'anisotropie d'échange a été découverte en 1956 par Meikle John et Bean sur des particules de cobalt micrométriques oxydées à l'air [16]. Ce phénomène est observé dans certains systèmes comprenant une interface ferromagnétique-antiferromagnétique. En présence d'un champ magnétique extérieur les auteurs ont mis en évidence un décalage du cycle d'hystérésis mesuré après avoir refroidi les particules à partir d'une température supérieure à sa température de Néel  $T_N$ . La même mesure réalisée en l'absence de champ magnétique extérieur pendant le refroidissement des particules, conduit à un cycle d'hystérésis symétrique et centré. On définit le décalage du cycle d'hystérésis par un champ de décalage  $H_E$  qui s'exprime par :

$$H_E = \frac{H_C^+ + H_C^-}{2} \quad (I.10)$$

Où  $H_C^+$  et  $H_C^-$  représentent les champs coercitifs obtenus le long des branches du cycle d'hystérésis décrites respectivement dans le sens décroissant et croissant du champ magnétique.

Pour comparer les systèmes  $F/AF$  entre eux, plutôt que d'utiliser  $H_E$ , on peut définir une densité d'énergie de couplage inter-facial :

$$\sigma = H_E M_s V_F / S \quad (I.11)$$

Où  $M_s$  est l'aimantation à saturation du matériau  $F$  par unité de volume.

$V_F$  : le volume du matériau  $F$ .

$S$ : la surface de contact entre le  $F$  et l' $AF$ .

La densité de couplage inter-facial permet de rendre compte de l'intensité du couplage d'échange entre un matériau  $F$  et un  $AF$ .

### I.5 Aimantation et pertes magnétiques des matériaux ferromagnétiques

#### I.5.1 Domaines et parois

Les domaines ont été inventés par Pierre Weiss en 1906, Leur existence a été validée expérimentalement par Bitter en 1931. La théorie de ces domaines permet d'expliquer les mécanismes responsables de l'aimantation des matériaux ferromagnétiques usuels.

Un domaine magnétique est défini comme étant une région à l'intérieur d'un matériau magnétique présentant une aimantation uniforme à une échelle intermédiaire, afin d'abaisser l'énergie interne de l'échantillon.

Les domaines sont séparés par des parois qui portent le nom parois de Bloch, à l'intérieur de laquelle l'aimantation tourne progressivement de la direction facile du premier domaine vers celle du deuxième domaine (figure I.6). L'épaisseur d'une paroi résulte de la concurrence entre l'énergie magnéto cristallin et l'énergie d'échange.

Il existe des parois de Bloch dans lesquelles les spins tournent de  $180^\circ$ . Ainsi, le cas des domaines dont les vecteurs aimantations sont perpendiculaires (domaines de fermeture) où les parois sont à  $90^\circ$  [17,18].

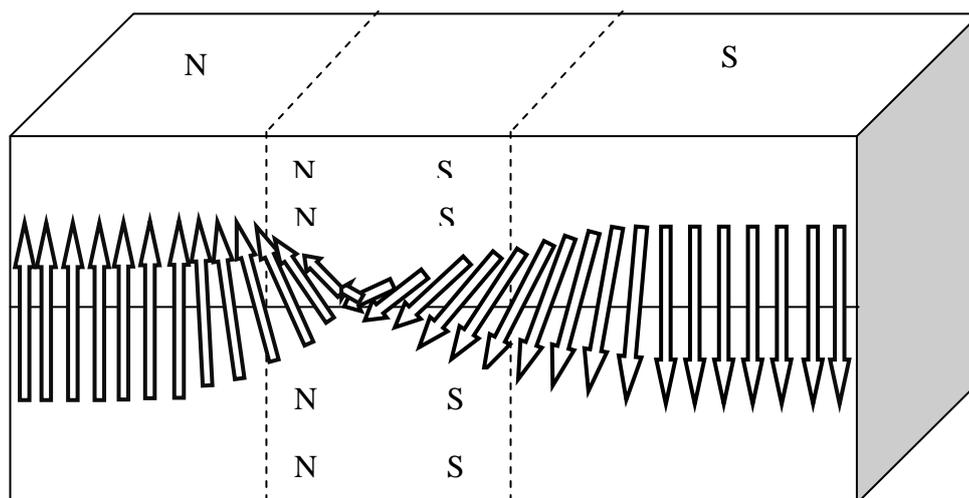


Figure I-6 : Structure de la paroi de Bloch séparant deux domaines

### I.5.2 Processus d'aimantation

D'un point de vue phénoménologique, Lorsqu'un champ magnétique est appliqué certains corps peuvent acquérir et conserver une aimantation importante [18], cette dernière, se trouve dans la même direction que celle du champ magnétique  $H$ . La variation de l'aimantation d'un échantillon ferromagnétique est due au déplacement des parois de Bloch en fonction du champ appliqué, l'existence de ce champ extérieur provoque la rotation des moments élémentaires qui se produira dans les champs faibles.

En l'absence d'un champ magnétique extérieur chaque domaine de Weiss présente une aimantation dont l'orientation est aléatoire, conduisant alors à une aimantation macroscopique moyenne nulle.

#### a) Modèle de Rayleigh

Rayleigh [5] propose une loi de variation de la perméabilité en fonction du champ magnétique :

$$\mu(H) = \mu_{in} + \eta \cdot H \quad (1.12)$$

$\mu_{in}$  : Perméabilité initiale du matériau.

$\eta$  : constante dite de Rayleigh.

#### b) Courbe de première aimantation

La courbe de première aimantation s'obtient en exploitant la forme :

$$B(H) = \mu_{in} \cdot H + \frac{1}{2} \eta \cdot H \quad (1.13)$$

Tel que,  $\frac{1}{2} \eta \cdot H \rightarrow$  Composante irréversible de l'induction.

$\mu_{in} \cdot H \rightarrow$  Composante réversible de l'induction.

A partir d'un état désaimanté ( $B = 0$ ), sous l'action du champ  $H$  d'excitation régulièrement croissant, les domaines et parois évoluent progressivement jusqu'à obtenir un seul domaine correspondant à une valeur critique  $H_S$  et une induction de saturation  $B_S$  (figure I.7(a)).

La courbe de première aimantation (figure I.7(b)) présente les cas suivant :

La zone linéaire: pour des faibles valeurs de l'excitation magnétique, le champ magnétique augmente proportionnellement à l'excitation magnétique.

Le coude de saturation : la relation entre  $B$  et  $H$  n'est plus linéaire. Lorsque  $H$  augmente,  $B$  augmente de moins en moins fortement.

La zone de saturation : L'aimantation du circuit magnétique est quasiment maximale ; le circuit magnétique est saturé.

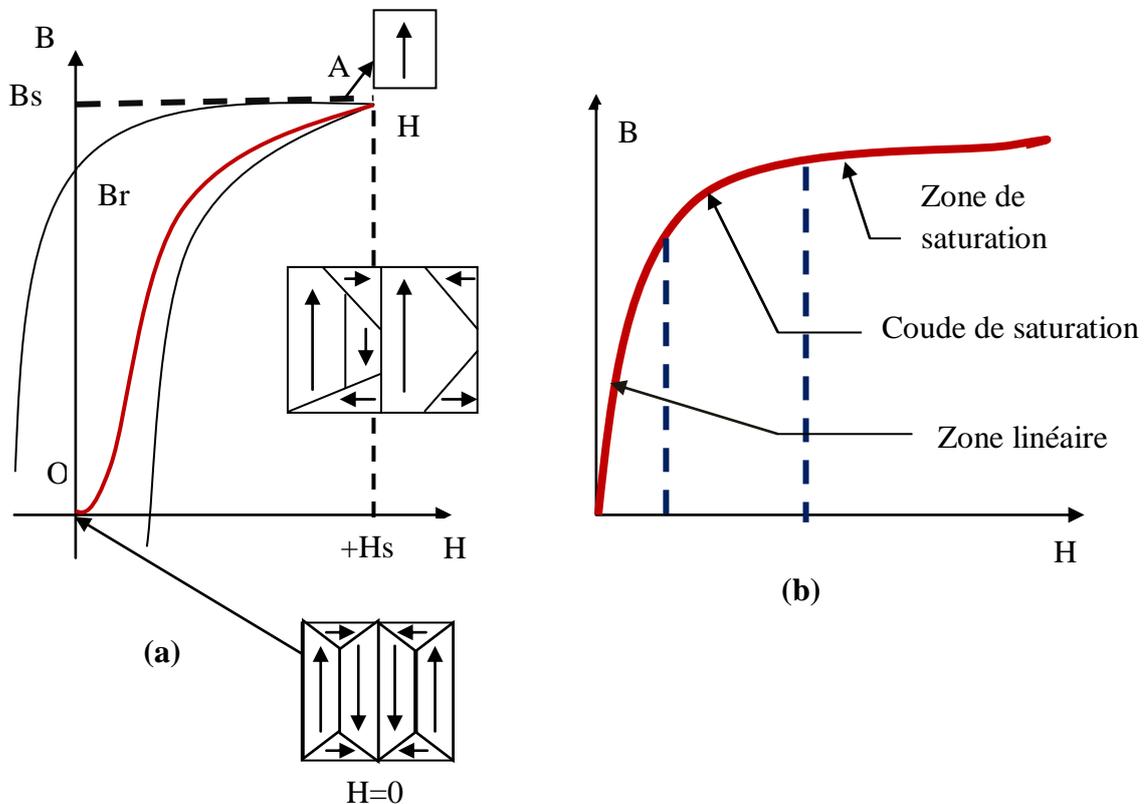


Figure I-7 : (a) Courbe de première aimantation  $OA$ , (b) décomposition de la courbe de première aimantation

### c) L'hystérésis

L'hystérésis [19] est une conséquence directe de l'existence des domaines élémentaires et des processus d'aimantation par déplacements et déformations de parois de Bloch dans un matériau, c'est un phénomène par lequel l'aimantation provoquée par un champ magnétique dépend, non seulement de l'intensité actuelle de ce champ, mais aussi des états magnétiques antérieurs du corps aimanté.

J-A. Ewing, un expérimentateur remarquable montre ce comportement dans le cas du fer, et qui l'a appelé "hystérésis" (figure I.8), cette dernière évident quand l'échantillon est soumis à un champ d'excitation cyclique, lentement variable entre  $+\hat{H}$  et  $-\hat{H}$ . Le point représentatif de l'état magnétique décrit alors un cycle qu'on appelle le cycle d'hystérésis. La majorité des applications technologiques sont basées sur l'existence de ce cycle qui est le tracé de l'induction «  $B$  » en fonction du champ appliqué.

Pour chaque cycle d'hystérésis décrit entre  $+\hat{H}$  et  $-\hat{H}$ , on peut définir au moins deux points remarquables du cycle :

L'aimantation rémanente  $M_r$  (ou induction rémanente ' $B_r$ '): aimantation qui subsiste après suppression du champ magnétique extérieur  $H$  (le champ magnétique dans le matériau en champ d'excitation nul).

L'aimantation à saturation  $M_s$ : spécifique à tout matériau, et correspond à l'état où il n'existe plus de structure en domaines dans le système.

Le champ coercitif  $H_c$  : point correspondant au champ d'excitation pour lequel l'aimantation s'annule. En d'autres termes, c'est le champ d'excitation qu'il faut appliquer au matériau dans la direction opposée à son aimantation initiale pour annuler son induction.

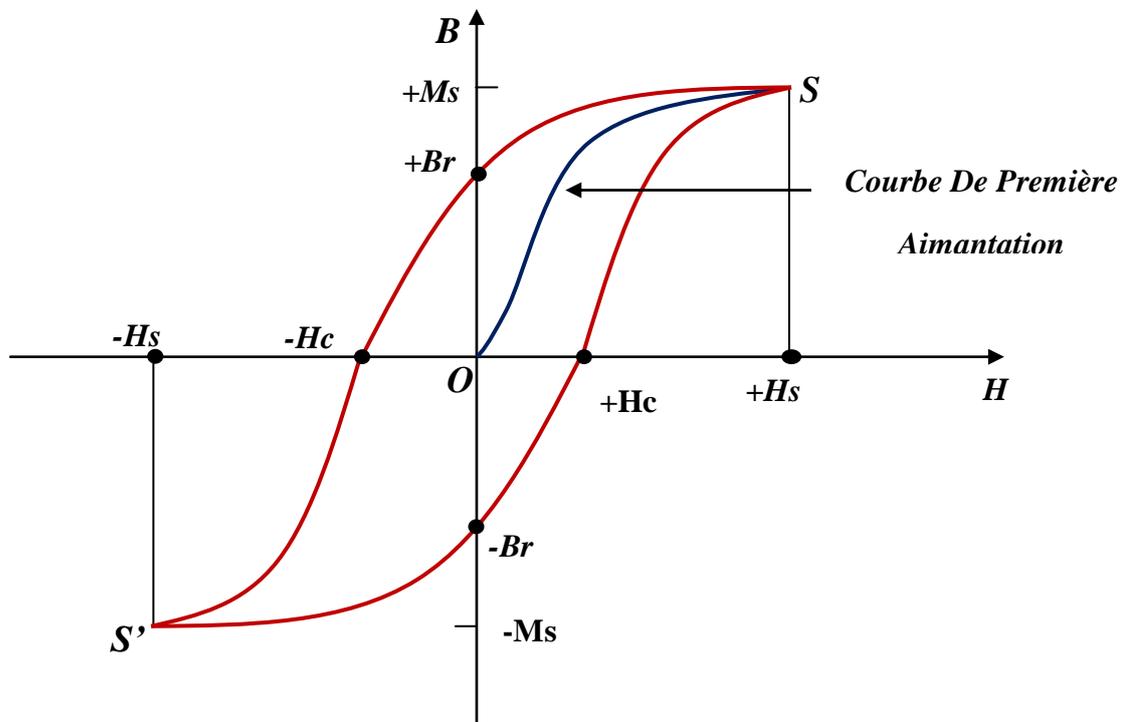


Figure I.8 : Cycle d'hystérésis d'un matériau aimanté.

### I.6 Classification des matériaux ferromagnétiques

Les composés ferromagnétiques sont souvent classés en deux catégories : les matériaux magnétiques doux et les matériaux magnétiques durs, dont les différentes caractéristiques sont décrites ci-dessous :

Pour Les matériaux magnétiques durs (aimants) : présentent un cycle d'hystérésis très large, ce qui correspond à une aimantation rémanente très grande et possédant une grande valeur du champ coercitif ( $H_c > 1000$  A/m). Ils présentent une aimantation permanente même si le champ magnétique extérieur n'existe pas.

Contrairement au comportement des matériaux doux, le cycle d'hystérésis associé est très étroit et resserré. Ces matériaux possèdent un champ coercitif faible ( $H_c < 1000$  A/m) et ils peuvent être aimantés facilement à l'aide de champs magnétiques faibles. Ils sont caractérisés par une très haute perméabilité, une induction à saturation  $B_s$  élevée. On les utilise dans les noyaux des transformateurs.

### I.7 L'influence de la température sur le comportement magnétique

La température peut aussi influencer les caractéristiques des matériaux. L'augmentation de température augmente l'amplitude des vibrations thermiques des atomes [19]. Elle peut modifier les propriétés magnétiques des matériaux essentiellement par 2 processus :

Soit par une évolution irréversible de leur composition locale, en température du matériau la durée de maintien est également importante puisqu'il s'agit d'une réaction chimique lente, soit par la variation réversible de leurs paramètres électromagnétiques avec la température [6].

Dans le cas d'un ferromagnétisme L'effet de la température est très important, ainsi, avec l'augmentation de la température, l'énergie thermique tend de plus en plus à rompre l'alignement spontané des atomes, avec ou sans la présence de champ magnétique externe.

Lorsque les vibrations thermiques sont au minimum, La magnétisation de saturation est maximale à 0 K, A la température de Curie  $T_c$ , les forces d'échanges sont complètement surmontées et le ferromagnétisme disparaît, le matériau se comporte comme un matériau paramagnétique si les températures supérieures au point de Curie [6, 20].

Chaque matériaux a une valeur de la température par exemple, les valeurs des températures de Curie : 768, 1120, 335 et 585°C pour le fer, le cobalt, le nickel, et le  $Fe_3O_4$  respectivement [19].

### BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Christian Ngô, Hélène Ngô. « physique statistique ». paris, écoles d' ingénieurs : s.n.,2008
- [2] Hélène Feldner. « Propriétés magnétiques de systèmes à deux dimensions », Université de Strasbourg, 7 Mar 2012. France.
- [3] Philippe Robert. « Matériaux de l'électrotechnique », Presse Polytechniques Romandes, 1989.
- [4] J. Degauque. « Magnétisme et matériaux magnétiques : introduction ». 1 Jan 19.
- [5] OULD OUALI, Samy Hassani. « Electrotechnique ». 26 sep 2010 .
- [6] BOUDEFLA Rania. « Etude numérique du modèle Ashkin Teller », Décembre 2015. Tlemcen.
- [7] Mr Yezli Mohamed, « Etude numérique de quelques modèles de spin sur réseaux ». Laboratoire Matériaux et Structures(LMS) BP, 13000, TLM –ALGERIE. 2016.
- [8] NINO BOCCARA, « MATIÈRE (physique) - Transitions de phase ». février 2017.
- [9] Élie, Frédéric . « Magnétisme et transitions en physique ».. France : s.n., 08 Mai 2004.
- [10] DJERFAF, Fatima. DOCTORAT EN SCIENCES. UFAS (ALGERIE) : Département d'Électronique, 2012.
- [11] Gallay Roland. « Génie électrique et électronique », (2005-2006 BACHELOR).
- [12] Nadia, BOUKHERROUB. Thèse de Doctorat, faculté UMBB, algérie : s.n., 2015. [13] Julie Jung. « Etude ab initio de molécules aimants à base d'ions lanthanide », UNIVERSITÉ DE RENNES 1, 2015.
- [14] Intissar DJOUADA. « Etude de propriétés structurales et magnétiques des couches minces ferromagnétiques à base de métaux de transition », Physique du Solide, (UFAS). 2012.
- [15] Houmed M. GARAD. « L'anisotropie magnétique perpendiculaire induite par oxydation et recuit thermique », Physique des matériaux, CNRS/UJF. avril 2012.
- [16] Céline PORTEMONT. « Étude de l'anisotropie d'échange dans des agrégats de cobalt nanométriques », octobre 2006. CEA-Grenoble.
- [17] P. Brissonneau. « Les domaines magnétiques ». Revue de Physique Appliquée, 1974, 9 (5), pp.783-792.

- [18] R. Vergne, J.C. Cotillard, J.L. Porteseil. « Quelques aspects statistiques des processus d'aimantation dans les corps ferromagnétiques ». 1981, 16 (9), pp.449-476.
- [19] Anh Tuan Bui. « Caractérisation et modélisation du comportement des matériaux magnétiques doux sous contrainte thermique ». Autre. Université Claude Bernard - Lyon I, 2011. Français.
- [20] José-Philippe Pérez, Robert Carles et Robert Fleckinger, « Électromagnétisme Vide et milieux matériels », Paris, Masson (1990).

# CHAPITRE II

## II.1 Introduction

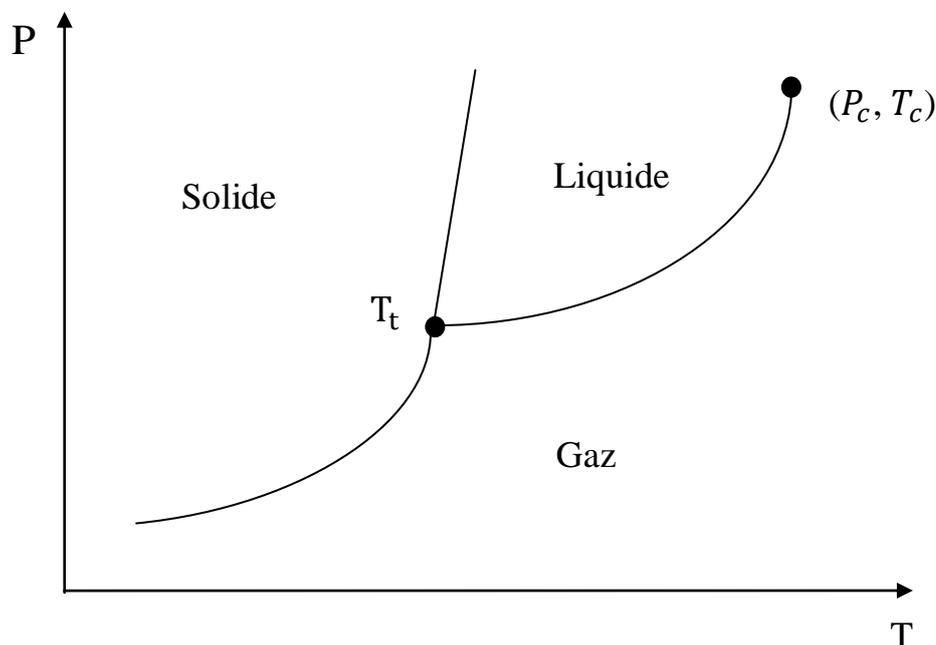
Le phénomène de transition de phase occupe une place importante en Physique de la Matière Condensée, pour diverses raisons : sa fréquence et sa diversité, son caractère spectaculaire et l'intérêt des problèmes conceptuels qui s'y rattachent. On prend un exemple bien connu, l'eau et ses diverses phases : solide (glace), liquide, gaz (vapeur), qu'on peut distinguer dans l'expérience quotidienne. Les transitions d'une phase à l'autre, qu'un changement de température permet d'observer, sont très familières [1] :

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

Le changement qualitatif caractérise ces transitions, la discontinuité des propriétés : une petite variation d'un paramètre (température, pression ...) déclenche une modification qualitative spectaculaire.

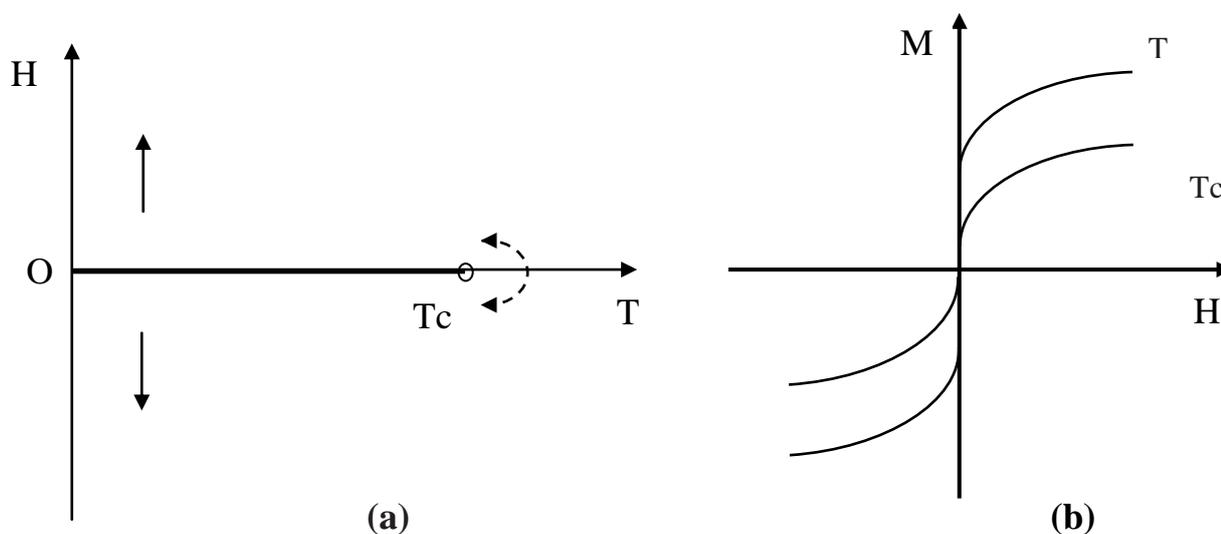
La Physique de la Matière Condensée est très riche d'exemples de telles transitions, citons les transitions magnétiques, ferroélectriques, suprafluides, supraconductrices, démixtion de mélange, ordre-désordre dans les alliages, les transitions structurales solide-liquide ou entre différents phases cristallines ou encore entre mésophases des cristaux liquides...etc.

Pour fixer quelques idées, considérons trois diagrammes de phases particuliers [1,2]: Le premier, C'est le diagramme (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 liquide et gaz. En tournant autour du point critique, on peut passer continûment de la phase liquide à la phase gazeuse sans transition discontinue (figure II.1).



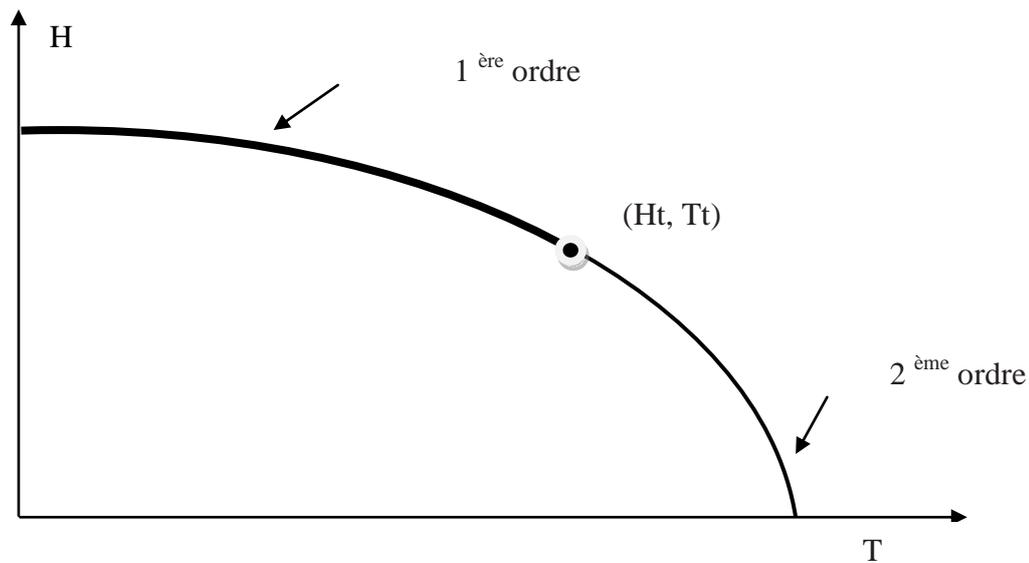
**Figure II-1 : Diagramme de phase d'un fluide (l'eau). Toute la transition de phase est du premier ordre sauf au point critique  $(P_c, T_c)$ . Delà de  $(P_c, T_c)$  il est possible de se déplacer en continu d'un liquide à un gaz. On pense que la frontière entre les phases solide et liquide est toujours du premier ordre et ne se termine pas dans un point critique.**

Le deuxième, c'est le diagramme (champ magnétique, température) pour un corps qui présente une transition ferromagnétique (figure II.2(a)) : Ce diagramme présente une frontière sur l'axe  $H = 0$  avec un point d'arrêt, qu'on appelle aussi point critique. En champ nul, quand T diminue, on observe, haute température une phase désordonnée, dite paramagnétique, sans aimantation ; lorsque  $T = T_c$ , au point critique, une transition se produit, et pour  $T < T_c$ , on observe une phase ordonnée, dite ferromagnétique, présentant une aimantation spontanée. Il y a une analogie avec la transition liquide-gaz, H et p jouant des rôles similaires. Dans le 2ème diagramme (figure II.2(b)) si on traverse la frontière ( $H = 0$ ,  $0 < T < T_c$ ), on observe un saut de l'aimantation ; ce saut diminue quand le point de franchissement de la frontière se rapproche du point critique ; au point critique, il n'y a plus de saut de l'aimantation.



**Figure II-2: (a) diagramme de phase d'un ferromagnétique simple. Une ligne de transitions de premier ordre à  $H = 0$  se termine en un point critique à une température  $T_c$ . (b) Courbe d'aimantation  $M(H)$  pour un ferromagnétique à différentes températures. Pour  $T < T_c$ , l'aimantation présente une discontinuité quand le champ magnétique change de signe. Cette discontinuité n'excite plus pour  $T > T_c$ .**

Le 3ème diagramme est un diagramme (champ magnétique, température) mais pour un corps qui présente une transition antiferromagnétique (avec une aimantation alternée dans la phase ordonnée) : 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 ; quand on franchit la ligne fine, il n'y a pas de saut. Cette dernière ligne est une ligne de points critiques (puisque'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.



**Figure II-3 : Exemple de diagramme de phase montrant un point tricritique. Dans le cas présent ici, il s'agit d'un matériau antiferromagnétique. On suppose, dans le cas présent, que l'ordre de la transition change sous l'effet d'un champ magnétique uniforme. Ce champ n'est pas le champ couple à l'aimantation uniforme.**

## II.2 Transitions de phase

La transition d'un liquide en gaz, d'un matériau conducteur en supraconducteur, ou le passage du ferromagnétisme au paramagnétisme sont des phénomènes que l'on dénomme transitions de phase. Une transition se produit lorsqu'il existe une singularité dans une fonction thermodynamique ou dans les dérivées de celles-ci.

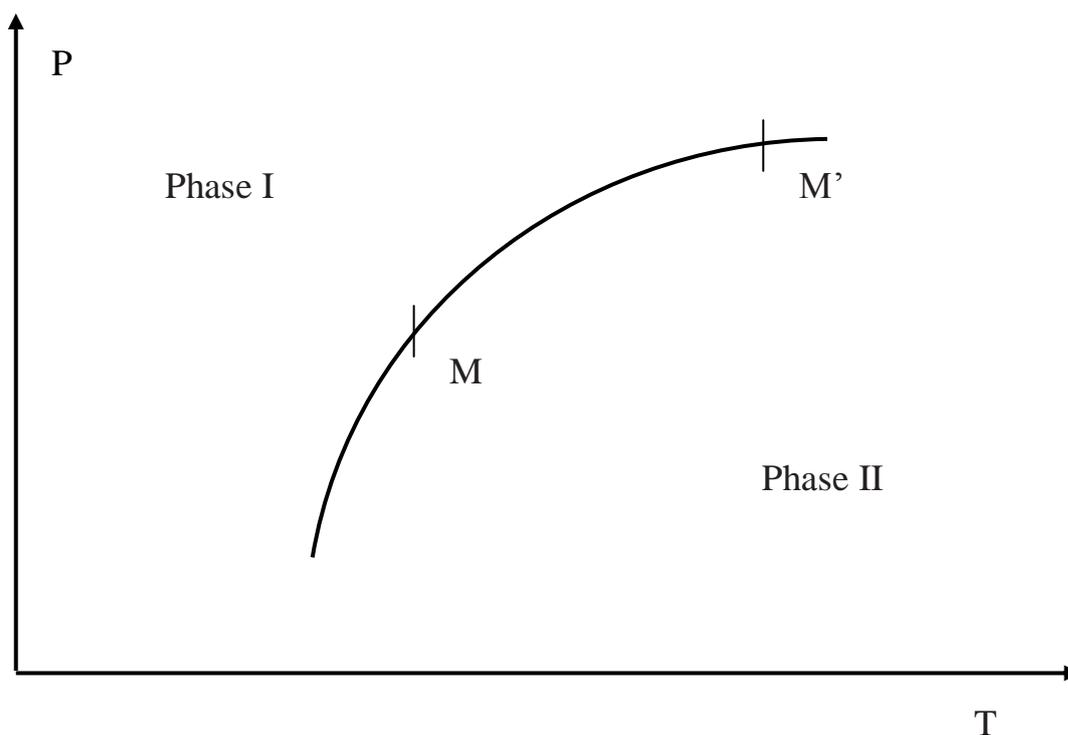
## II.3 Classification des transitions de phase

Le domaine des transitions de phase connaît, une diversité foisonnante extrêmement riche, mais aussi de nombreuses propriétés communes, voire universelles. 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, diverses façons de discuter ces singularités ont été, en leur temps, 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 de la

potentielle thermodynamique. Puis est apparue, avec L.D. Landau, la notion très importante de brisure spontanée de symétrie, qui correspond à une classification différente [3].

### II.3.1 Classification d'Ehrenfest (1880-1933).

Considérant le potentiel thermodynamique  $G = U - TS + pV$ , Ehrenfest proposa d'appeler transition du premier ordre les transitions s'accompagnant de discontinuités dans les grandeurs physiques, comme l'entropie, qui sont reliées à des dérivées premières du potentiel thermodynamique, et transitions du second ordre les transitions s'accompagnant 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. Si toutes les dérivées d'ordre  $n-1$  de  $G$  sont continues et qu'une dérivée d'ordre  $n$  est discontinue, la transition sera d'ordre  $n$  [4].



**Figure II-4 : Schématisation d'une ligne de transition séparant deux phases I et II**

Dans le plan des variables intensives ( $p, T$ ), soit une ligne de transition séparant deux phases I et II (figure II.4). En tout point de la courbe, l'équilibre est assuré si :

$$G_I(p, T) = G_{II}(p, T) \quad (II.1)$$

Dans toute évolution le long de la courbe de M vers M' voisins on a :

$$dG_I = -S_I dT + V_I dp \quad (II.2)$$

$$dG_{II} = -S_{II} dT + V_{II} dp \quad (II.3)$$

Et comme  $dG_I = dG_{II}$  :

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{courbe}} = \frac{S_{II} - S_I}{V_{II} - V_I} = \frac{\Delta S}{\Delta V} = \frac{L}{T} * \frac{1}{\Delta V} \quad (II.4)$$

C'est la relation de Clapeyron, où L est la chaleur latente de transformation. Nous sommes ici dans le cas d'un changement de phase du 1er ordre puisque les dérivées premières de G (ici S et V) sont discontinues. Si, au contraire elles étaient continues, on aurait  $dS_I = dS_{II}$  :

$$dS_I = \frac{1}{T} C_{pI} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T_I} dp \quad (II.5)$$

$$dS_{II} = \frac{1}{T} C_{pII} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T_{II}} dp \quad (II.6)$$

D'où une autre relation similaire, mais pour une transition du second ordre :

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{courbe}} = \frac{1}{T} \frac{\Delta C_p}{\Delta \left(\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T\right)} = \frac{1}{TV} * \frac{\Delta C_p}{\Delta \alpha} \quad (II.7)$$

$$\text{Où } \alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T$$

$\alpha$  : Désigne le coefficient de dilatation isotherme.

De même, en écrivant  $dV_I = dV_{II}$  :

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{courbe}} = \frac{\Delta\alpha}{\Delta\chi_T} \quad (II.8)$$

$$\text{Avec} \quad \chi_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

Les deux équations (II.7) (II.8) entraînent l'égalité :

$$TV (\Delta\alpha)^2 = \Delta C_p \Delta\chi_T \quad (II.9)$$

Cette relation a bien été observée pour la transition Hélium normal - Hélium superfluide dans une certaine gamme de température. En fait, Ehrenfest pensait à des discontinuités des dérivées de la potentielle thermodynamique du type saut, par analogie avec la chaleur latente de la transition liquide - gaz  $\Delta S = L/T$  ; mais dans bien des cas, la chaleur spécifique diverge à la transition, quand celle-ci est du second ordre.

### II.3.2 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  $\psi$  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  $V_g - V_l$  ou la différence d'entropie [1,5].

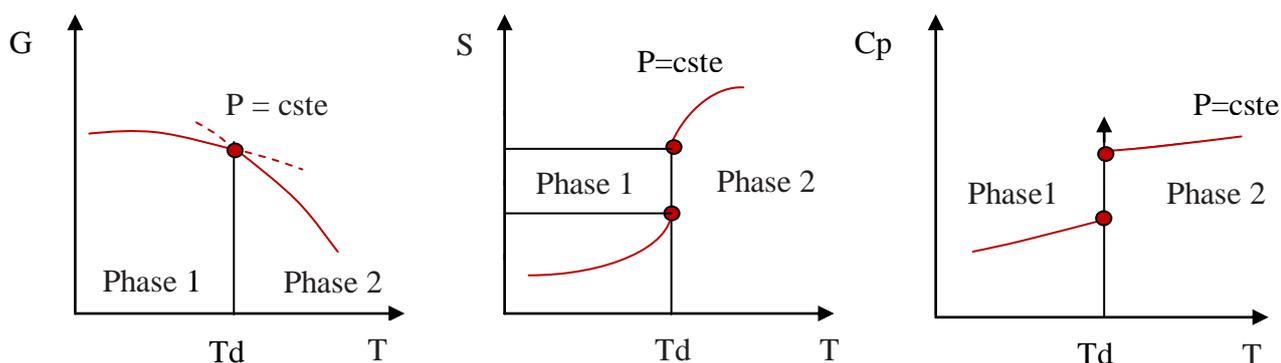
On peut aussi parfois définir un paramètre d'ordre (mais pas toujours) pour certaines transitions avec chaleur latente. C'est le cas par exemple du titanate de Baryum : le paramètre

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.

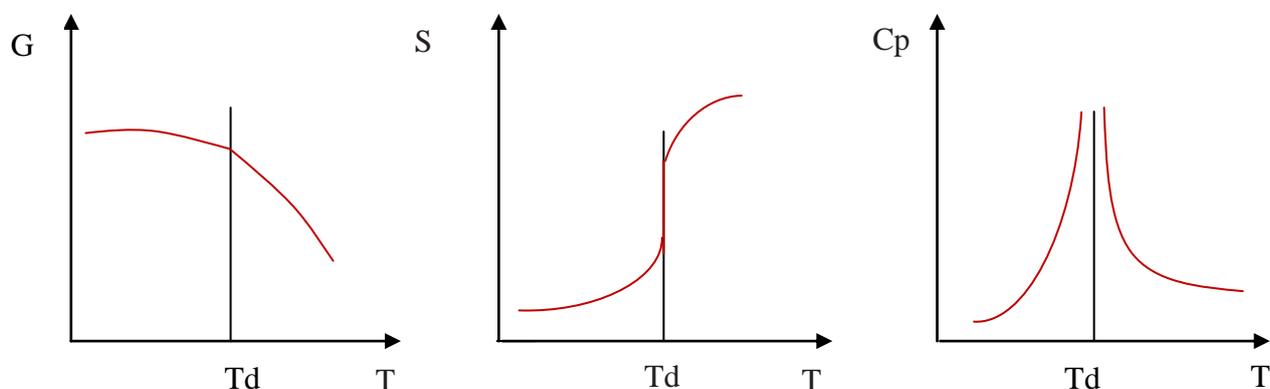
Par contre, pour certaines transitions avec chaleur latente non nulle, il est impossible de définir un paramètre d'ordre. C'est le cas, par exemple, pour les transitions entre variétés polymorphes du soufre ou la transition liquide-gaz : au point critique (ou dans le domaine de coexistence) la compressibilité 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 [2] :

**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 (figure II.5); si au contraire le paramètre d'ordre est continu, on dit que la transition est du second ordre (figure II.6).



**Figure II-5 : Enthalpie libre, entropie, et capacité thermique en fonction de la température pour une transition de phase du premier ordre.**



**Figure II-6 : Enthalpie libre, entropie, et capacité thermique en fonction de la température pour une transition de phase du second ordre.**

## II.4 Théories de Landau des transitions de phases

La théorie de Landau offre un cadre théorique simple et élégant pour aborder les problèmes de transition de phase. Le modèle d'Ising décrivant la transition ferro-paramagnétique d'un métal ou encore l'étude des phases mésomorphes comme les cristaux liquides nématiques sont ainsi des exemples particulièrement adaptés au traitement par la théorie de Landau [6].

Bien que basée sur des hypothèses très simples, la théorie de Landau (1936) permet d'appréhender l'essentiel des idées physiques relatives aux transitions de phases. Dans cette théorie qui est encore largement utilisée aujourd'hui, on développe l'énergie libre  $F$  en fonction du paramètre d'ordre  $m$  à proximité du point critique. On ne retient que les termes compatibles avec la symétrie du système.

### II.4.1 Développement de l'énergie libre

Considérons une transition de phase avec changement de symétrie pour laquelle on peut définir un paramètre d'ordre  $m$ . A une température donnée, l'état d'équilibre stable correspond à une valeur de  $m$  qui minimise l'énergie libre  $F(m, T)$ .

Au voisinage de la température de transition  $T_0$ , on peut développer  $F$

$$F(m, T) = F_0(T) + A_0(T)m + A(T)m^2 + B(T)m^3 + C(T)m^4 \dots \dots \dots (II.10)$$

Pour  $T > T_c$ ,  $F$  doit être minimale pour  $m = 0$  et  $A(T) > 0$ .

Pour  $T < T_c$ ,  $F$  doit être minimale pour  $m \neq 0$  et  $A(T) < 0$  (concavité).

Le choix le plus simple  $A(T) = a(T - T_0)$  avec  $a > 0$  [7].

### II.4.2 Transition du second ordre

Une analyse théorique de ce type de transition a été réalisée par Landau et Lifchitz. La transition avec brisure de symétrie et dont le paramètre d'ordre est une fonction continue de  $T$  (s'annule à la température de transition) est de type second ordre. La température où s'effectue la transition  $T_c$ , sépare les domaines d'existence de deux phases. La première phase, la plus ordonnée et la moins symétrique est opposée à la phase la plus symétrique mais avec un paramètre d'ordre égal à zéro [8].

- La transition s'effectue d'une phase à l'autre sans la coexistence des deux phases.
- L'entropie des deux phases tend vers la même valeur lorsque la température tend vers  $T_c$ .
- Il n'y a pas de chaleur latente de transformation.

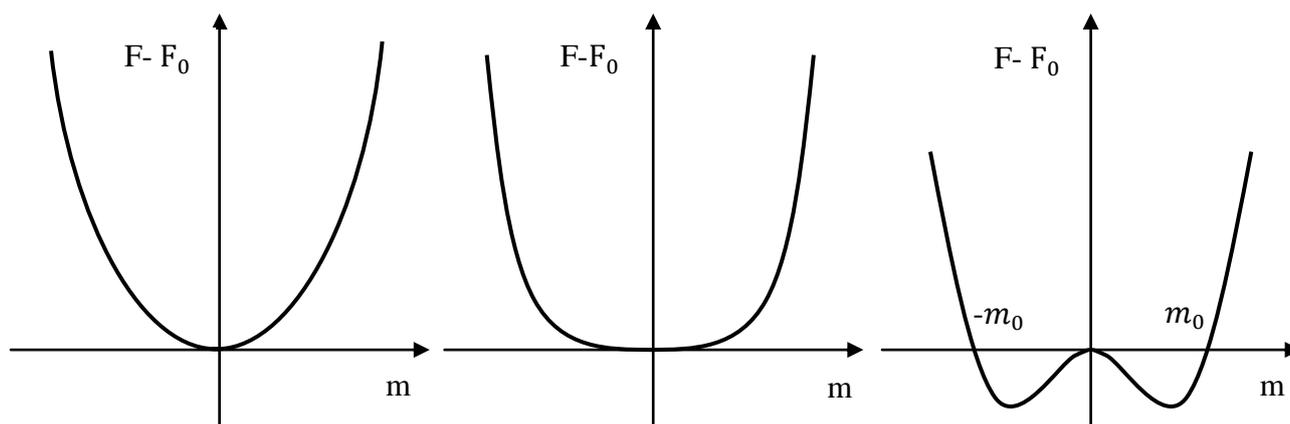
Pour la transition ferromagnétique-paramagnétique, on ne garde que les termes de degré pair dans le développement de Landau.

Pour une transition du second ordre, on peut montrer que  $B(T) = 0$  et  $C(T) = c > 0$  donc :

$$F(m, T) = F_0(T) + a(T - T_0)m^2 + cm^4 \dots \dots \dots (II.11)$$

Car le système doit être invariant lors d'un changement du paramètre d'ordre de  $m$  en  $-m$ . Comme  $m$  est une quantité bornée, on doit obligatoirement avoir  $c > 0$ . Lorsque  $a > 0$ , on obtient un minimum de l'énergie libre en  $m = 0$ . Le système est donc paramagnétique à

l'équilibre. Ce comportement est observé lorsque  $T > T_c$ . Lorsque  $a < 0$ , on observe deux minima non-nuls respectivement en  $m = m_0$  et en  $m = -m_0$ , soit deux états qui coexistent (figure II.7). Le système est ferromagnétique. C'est ce qui est observé en  $T < T_c$  [9].



**Figure II-7 : Théorie de Landau. Allure générale de l'énergie libre pour  $a > 0$ ,  $a = 0$  et  $a < 0$ .**

On va donc poser  $a = \left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)$ .

Avec un coefficient  $\alpha > 0$ . Et si on recherche les situations d'équilibre à l'aide de :

$$\left.\frac{dF}{dm}\right|_{m=m_0} = 0 = 2am_0 + 4bm_0^3 \quad (II.12)$$

On obtient bien les 2 valeurs non-nulles du paramètre d'ordre sous  $T_c$ .

$$m_0 = \mp \sqrt{\frac{\alpha(T_c - T)}{2bT_c}} \quad (II.13)$$

On a donc bien une discontinuité du paramètre d'ordre en  $T_c$ . Si on calcule l'entropie via

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right) \quad (II.14)$$

On obtient une entropie continue en  $T_c$ , ce qui signifie qu'il n'y a pas de chaleur latente lors de la transition. On assiste donc bien à une transition du second ordre dans le sens originnaire d'Ehrenfest [9].

### II.4.3 Transition du premier ordre

La théorie de Landau est aussi utile pour étudier les transitions au voisinage d'un point triple dans un diagramme de phase (figure II.8). Dans ce cas, on développe l'énergie libre  $F$  jusqu' à l'ordre 6 [10].

$$F(m, T) = F_0(T) + am^2 + bm^4 + cm^6 \quad (II.15)$$

Qui décrit aussi bien les transitions du premier ordre que celles du second ordre. En effet,  $c$  doit être positif car  $m$  est borné. La recherche des minimas de  $F$  via la condition

$$\left. \frac{dF}{dm} \right|_{m=m_0} = 0 = 2am_0 + 4bm_0^3 + 6cm_0^5 \quad (II.16)$$

Conduit à  $m_0 = 0$ , qui est la solution triviale et deux minimas.

$$m_0^2 = \frac{b}{3c} \quad (II.17)$$

Lorsque la condition  $b^2 = 3ac$  est respectée. On a donc,  $a > 0$ ,  $b < 0$  et  $c > 0$ . Dans ce cadre, on peut passer de la solution triviale du paramètre d'ordre à une valeur non-nulle de façon discontinue en fonction des paramètres.

Cependant, le développement de Landau est souvent trop simpliste. Tout d'abord,  $F$  n'est pas analytique en  $T_c$  comme nous le verrons plus loin. Ensuite, la nature des interactions ainsi que la dimension du système n'apparaissent pas dans la théorie de Landau alors que ces paramètres sont pourtant essentiels. Pour décrire les transitions de phase, il va donc falloir se placer à l'échelle des entités microscopiques et de leurs interactions.

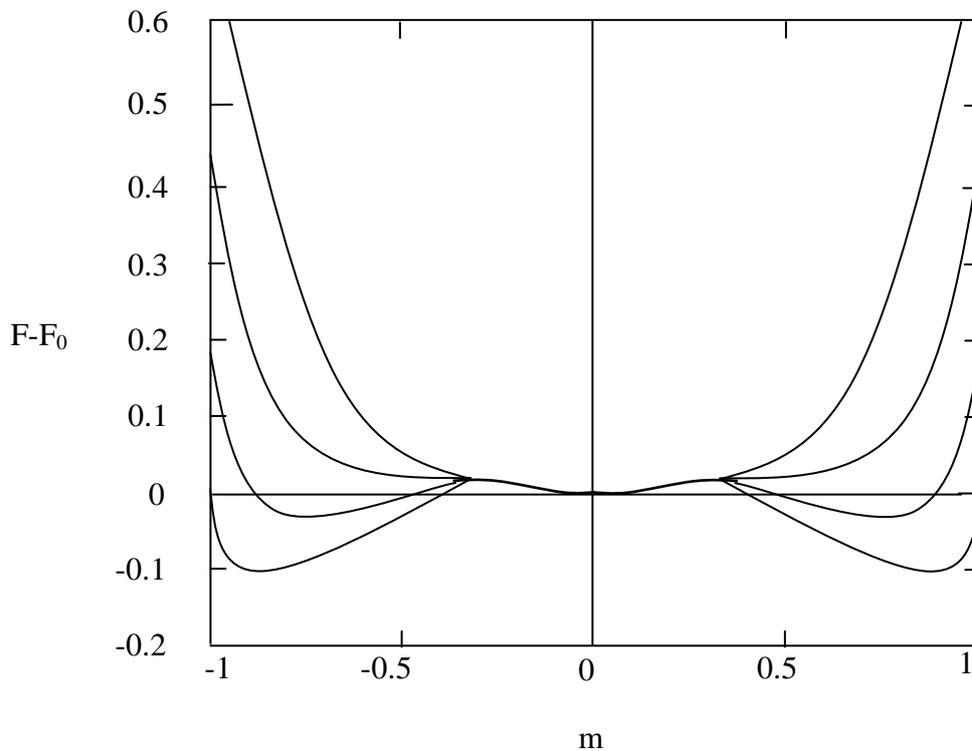


Figure II.8 : théorie de Landau d'une transition du premier ordre.

## II.5 Phénomènes critiques

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 :

$$\begin{aligned}
 C_v &\sim \text{Log } |T - T_c| \\
 m &\sim (T_c - T)^{1/8} \\
 \chi &\sim (T_c - T)^{-7/4}
 \end{aligned}
 \tag{II.18}$$

La température critique exacte est plus basse que celle obtenue dans l'approximation du champ moyen :  $T_c \text{ exacte} \approx 0,57 T_c \text{ Landau}$ .

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

Chaleur spécifique  $C \sim (T_c - T)^{-\alpha'}$  si  $T < T_c$

$\sim (T - T_c)^{-\alpha}$  si  $T > T_c$

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

Susceptibilité relative

au paramètre d'ordre  $\chi \sim (T_c - T)^{-\gamma'}$  si  $T < T_c$

$\sim (T - T_c)^{-\gamma}$  si  $T > T_c$

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),  $\beta = 1/8$ ,  $\gamma = \gamma' = 7/4$ . Le modèle d'Ising étant un des rares modèles exactement solubles, on a cherché à déterminer les valeurs des exposants critiques par des méthodes d'approximations successives pour rendre compte de ce que négligeait la théorie de Landau : les fluctuations critiques.

Dans l'étude du comportement critique, Widom a émis l'hypothèse d'homogénéité : au voisinage d'un point de transition l'énergie libre est donnée par

$$F(T, m) = (T - T_c)^{2-\alpha} f\left(\frac{m}{(T - T_c)^\beta}\right) \quad (II.19)$$

Cette forme exprime que la partie singulière de l'énergie libre est une fonction homogène généralisée du paramètre d'ordre  $m$  et de  $T - T_c$ . Puis Kadanoff proposa l'hypothèse de similarité : près de  $T_c$ , si on divise le réseau de spins en blocs dont les dimensions sont grandes devant elles de la maille, mais petites par rapport à la longueur de corrélation, chaque bloc se comporte comme un spin unique. Ceci conduit à la forme de Widom pour l'énergie libre et à une propriété d'homogénéité pour la fonction de corrélation. On en déduit des relations entre exposants critiques, ou lois d'échelle.

En 1972, Wilson a montré qu'il était possible d'exprimer certains exposants critiques sous la forme d'une série de puissances de  $\varepsilon = 4 - d$ , où  $d$  est la dimensionnalité d'espace du système [1].

### II.5.1 Exposants critiques

L'archétype des modèles sur réseau, imaginé par William Lenz en 1920. Ce modèle a été conçu comme un problème que Lenz aurait proposé à son étudiant au doctorat, Ernst Ising, afin d'étudier le caractère magnétique de certains matériaux. La version bidimensionnelle est définie comme suit. Soit  $\Gamma$  un réseau carré comprenant  $N$  sites étiquetés par un entier  $i$  et munis d'un spin  $S_i \in \{\pm 1\}$ . L'ensemble  $S = (S_i)_{i \in \Gamma}$  est appelé configuration de spins et  $\Sigma$  est l'ensemble de toutes ces configurations [11].

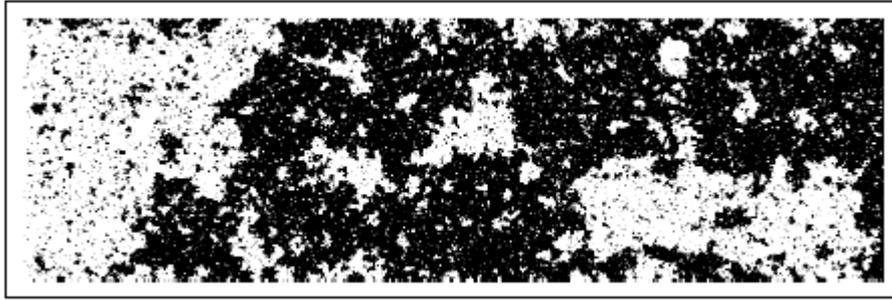
L'hamiltonien d'une configuration  $S$ , en présence d'un champ magnétique externe  $B$ , est donné par :

$$H_S = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J' \sum_{\langle i,k \rangle} S_i S_k - B \sum_{i \in S} S_i \quad (II.20)$$

Où les première et deuxième sommes sont prises sur les plus proches voisins d'une même ligne et d'une même colonne du réseau, respectivement. Les paramètres  $J$  et  $J'$  caractérisent l'interaction entre les spins. En particulier, lorsque  $J', J > 0$ , ce modèle simule le ferromagnétisme : les configurations comprenant des amas de spins de même valeur (domaines de Weiss) sont favorisées, puisque celles-ci minimisent l'énergie  $H_S$ . La présence d'un champ magnétique  $B > 0$  favorise les configurations avec des amas de valeur  $+1$ . À l'opposé, lorsque  $J, J' < 0$ , ce sont les configurations comportant beaucoup de plus proches voisins de valeurs différentes ( $S_i S_j = -1$ ) qui sont favorisées, ce qui correspond à l'antiferromagnétisme.

### II.5.2 L'invariance d'échelle

Pour un modèle de spins, la divergence de la longueur de corrélation au point critique implique qu'il est probable que des amas arbitrairement grands de spins de même valeur se forment dans les configurations  $S$ . Un exemple typique d'une telle configuration du modèle d'Ising est présenté à la (figure II.9).



**Figure II-9 : Configuration aléatoire du modèle d'Ising en  $T = T_c$ .**

La présence d'amas de toutes tailles au point critique, comme le laisse imaginer la figure, signifie que les phénomènes observés dépendent peu de l'échelle utilisée. Ce concept est appelé hypothèse d'invariance d'échelle. On peut justifier théoriquement cette hypothèse par la construction de Kadanoff à l'aide d'arguments du groupe de renormalisation. Dans ce travail, nous allons nous contenter de décrire les idées derrière cette construction, ainsi que certaines de ses conséquences. Cette construction consiste à regrouper les spins adjacents d'une configuration  $S$  en blocs et d'exprimer l'hamiltonien du système en termes de ces blocs plutôt qu'en termes des spins. Ceci permet de mettre en relation l'énergie libre des systèmes avec spins et avec blocs. La relation obtenue indique comment l'énergie libre  $f(t, B)$  est affectée par une transformation d'échelle  $t \rightarrow \lambda^a t$  et  $B \rightarrow \lambda^b B$ , où  $a, b, \lambda \in \mathbb{R}$  :

$$f(\lambda^a t, \lambda^b B) = \lambda f(t, B) \quad (II.21)$$

Une fonction  $f$  avec cette propriété est appelée fonction homogène généralisée. La démarche de Kadanoff permet également de conclure que [11]:

$$G(\lambda r) = \lambda^{-2\chi} G(r) \quad (II.22) \quad \text{Avec } \chi \in \mathbb{R}.$$

## II.6 Modèle d'Ising: introduction

L'étude d'un problème de mécanique statistique de la matière ou l'effet des interactions est importante. Le modèle que nous avons d'abord choisi de discuter ici est connu sous le nom de Modèle d'Ising, ce dernier est certainement le plus célèbre modèle de Physique Statistique, et a été le sujet de milliers d'articles de recherche depuis son introduction par Wilhelm Lenz en 1920. Le nom « modèle d'Ising » (parfois, mais beaucoup plus rarement, appelé plus justement modèle de Lenz-Ising, comme suggéré par Ising lui-même) a été créé par Rudolph Peierls en référence à la thèse de 1925 d'Ernst Ising, effectuée sous la direction de Lenz, et consacrée à la version unidimensionnelle du modèle. Ainsi, ce modèle est également l'un des modèles les plus simples présentant une transition de phase. Durant les premières décennies du XXème siècle, il était loin d'être universellement admis que la Physique Statistique, une théorie encore jeune à l'époque, puisse expliquer les transitions de phase. Cette question fut réglée par Lars Onsager en 1944, grâce à son analyse détaillée du modèle d'Ising bidimensionnel prouvant l'existence d'une transition de phase dans la limite thermodynamique; ce travail amorça le développement de la théorie moderne des phénomènes critiques [12].

### II.6.1 Définition

Le modèle d'Ising peut être défini sur un graphe arbitraire, mais nous nous contenterons de considérer le cas classique d'un réseau cubique sur lequel sont disposés  $N$  spins. Sur chaque site  $i$  du réseau on place une particule qui est caractérisée par une variable dont la valeur  $s_i$  peut prendre deux valeurs :  $s_i = +1$  ou  $s_i = -1$ . Un spin  $s_i$  représente l'état microscopique du site  $i$  du réseau. On qualifie souvent cette variable de spin par abus de langage car on applique le modèle d'Ising au ferromagnétisme. Dans ce cas, la variable  $s_i$  est liée à l'orientation du spin de la particule. On suppose que l'interaction de chaque particule avec ses proches voisins est de la forme [13]:

$$V = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (II.23)$$

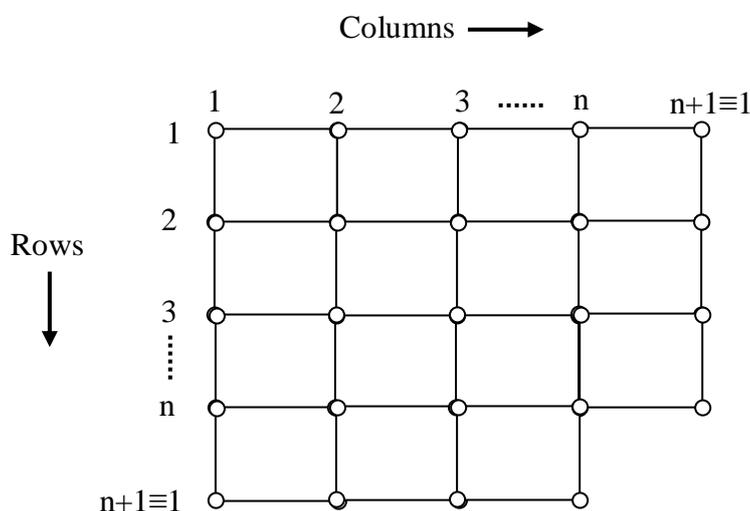
Où la constante  $J > 0$  caractérise l'intensité de l'interaction. La somme est prise sur tous les couples  $\langle ij \rangle$  correspondant aux proches voisins de  $i$  (4 dans le cas du réseau carré considéré

ici). Cette interaction favorise l'alignement des spins. En effet,  $V$  est négatif lorsque  $s_i$  et  $s_j$  sont de même signe. Il est positif lorsqu'ils sont opposés.

Les spins sont soumis à un champ extérieur  $H$ . Ils auront tendance à s'orienter selon ce champ. De plus, les spins ne sont pas indépendants. Chaque spin interagit uniquement avec ses plus proches voisins. L'énergie interne du système pour une distribution de spins  $\{S_i\}$  s'écrit [9]:

$$U(\{S_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (II.24)$$

Où l'énergie de couplage définie entre les paires de spins voisins  $\langle ij \rangle$  est  $J$  et le champ extérieur est  $H$ . Ce système de spins est mis en contact avec un thermostat à température  $T$ . Le nombre de spins étant conservé, on travaillera dans l'ensemble canonique. Pour éviter des effets de bord le long des côtés du réseau carré, on considère des conditions périodiques. Le réseau est en quelque sorte replié sur lui-même pour former un tore. Ainsi, tous les spins ont bien 4 plus proches voisins (figure II.10).



**Figure II-10 : Le réseau carré est replié sur lui-même pour former un tore sur lequel chaque site a exactement 4 voisins.**

## II.6.2 Le modèle d'Ising à une dimension

On imagine que les particules constitutives sont situées aux nœuds d'un réseau infini régulier. Seules interagissent les particules mitoyennes, c'est-à-dire voisines immédiates. On notera  $\pm J$  cette interaction, le signe  $-$  correspondant au cas où les spins sont parallèles et le signe  $+$  au cas des spins opposés. A cela s'ajoute un éventuel champ externe  $H$  [14].

Nous nous intéressons au cas plus simple l'espace unidimensionnel cyclique. On suppose qu'il y a  $N$  sites ( $N$  tendra vers l'infini : limite thermodynamique). Dans le modèle cyclique, on identifie le site de rang  $q+N$ , pour  $q$  valant  $0, 1, 2, \dots, N-1$ , avec le site  $q$ . Les quantités thermodynamiques du système (énergie libre, magnétisation, ...) s'obtiennent à partir de la fonction de partition  $Z$  :

$$Z(N, \beta J, \beta H) = \sum_{\mu} \exp \beta \left( J \sum_{q=0}^{N-1} \mu_q \mu_{q+1} + H \sum_{q=0}^{N-1} \mu_q \right) \quad (II.25)$$

Où  $\beta = (kT)^{-1}$ ,  $T > 0$  est la température absolue,  $k > 0$  est la constante de Boltzmann,  $\mu_q = \pm 1$  suivant le signe de la particule  $q$ . la somme sur  $\mu = (\mu_0, \mu_1, \mu_{N-1})$  est étendue aux  $2^N$  positions correspondant à une configuration du système.

### II.6.3 Modèle d'Ising à deux dimensions

La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel a été donnée pour la première fois par le norvégien américain chimiste Lars Onsager.

Considérons un réseau régulier carré (Figure II.10) dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs  $\pm 1$ . Il est géré par l'hamiltonien:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \beta \sum_i S_i \quad (II.26)$$

Où  $\langle i, j \rangle$  désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins, et  $J$  le paramètre d'interaction. La méthode de matrice de transfert, c'est une matrice  $2 \times 2$  dont chaque élément est un facteur de Boltzmann de l'énergie d'une paire de spins  $\{(1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1)\}$ . Elle est donnée par :

$$T = \begin{pmatrix} \exp[\beta(J+\beta)] & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp[\beta(J-\beta)] \end{pmatrix} \quad (II.27)$$

La matrice T peut être diagonalisable et les valeurs propres  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont les racines du déterminant :  $\det (T-\lambda I) = 0$ .

Où I est la matrice identité. La trace de  $T^N$  est la somme des valeurs propres :

$$\text{tr } T^N = Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (II.28)$$

Cette méthode peut être facilement étendue au modèle à deux dimensions. Chaque spin prend deux valeurs ( $\pm 1$ ) (deux états, *up* et *down*), on aura donc  $2^N$  états pour un réseau de N spins. La fonction de partition Z s'écrit [15]:

$$Z = \sum_{S_i} \exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right) = \text{tr } T^N \quad (II.29)$$

## II.7 Le modèle d'Ising dans l'approximation du champ moyen

### II.7.1 Le champ moyen : version simple

Partons du modèle d'Ising sur réseau. On néglige les corrélations entre fluctuations des spins voisins et on suppose que le spin du site i «voit» la moyenne des spins de ses  $C = 2D$  voisins. Cette moyenne vaut  $e$  et elle est déterminée de façon auto-cohérente.

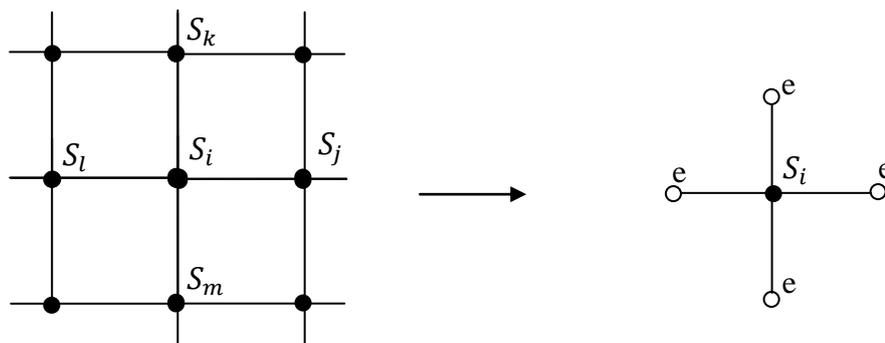


Figure II. 11: Principe de l'approximation du champ moyen

Dans le Hamiltonien d' Ising en remplaçant les  $S_j$  par  $e$  pour les voisins de  $i$  :

$$H_e(S) = -(2DJ_e + B)S \quad , \quad S = \pm 1 \quad (II.30)$$

(La température est absorbée dans  $J$  et  $B$ , si bien que  $T = 1$ ). Les valeurs moyennes de l'aimantation  $S$  et de l'énergie par site  $\varepsilon$  sont :

$$\langle S \rangle = \tanh(2DJ_e + B) \quad , \quad \varepsilon = (DJ_e + B)\langle S \rangle \quad (II.31)$$

Noter le facteur  $D$  au lieu de  $2D$  qui vient du fait que l'énergie  $-JS_iS_j$  d'un lien est partagée entre les sites  $i$  et  $j$ . La condition d'auto-cohérence est que l'aimantation moyenne  $m$  soit égale à  $e$ .

$$m = \langle S \rangle = e \rightarrow m = \tanh(2DJ_e + B) \quad (II.32)$$

En champ nul  $B = 0$ , cette équation admet une seule solution  $m = 0$  si

$$2DJ < 1 \rightarrow m = 0 \text{ phase paramagnétique}$$

Si le couplage  $J$  est plus grand que la valeur critique

$$J_c = 1/2D$$

L'équation admet deux solutions non nulles supplémentaires

$$2DJ > 1 \rightarrow m = \pm m_0 \text{ phase ferromagnétique}$$

Au voisinage du point critique  $J_c$  il suffit de développer  $\tanh(2DJm+B)$  à l'ordre trois pour obtenir l'équation d'état approchée

$$m = 2DJm - \frac{1}{3}m^3 + B + \dots \quad (II.33)$$

On en déduit les quatre exposants.

$$\alpha = 0, \quad \beta = 1/2, \quad \gamma = 1, \quad \delta = 3$$

La chaleur spécifique par unité de volume  $C_v$  est discontinue à  $J_c$  [16].

---

**BIBLIOGRAPHIQUES**

- [1] Mr Yezli Mohamed, « Etude numérique de quelques modèles de spin sur réseaux ». Laboratoire Matériaux et Structures(LMS) BP, Thèse de doctorat –ALGERIE. 2016.
- [2] NINO BOCCARA, « MATIÈRE (physique) - Transitions de phase ». février 2017
- [3] R.HILFER, “Classification Theory for Phase Transitions”. J.G. Universitat Mainz, WA 331/339, D-55099 Mainz, Germany. P. O. Box 7606, 0205 Oslo, Norway. 27 April 1993
- [4] Michel HERITIER « Chapitre 2 : TRANSITIONS DE PHASE –GÉNÉRALITÉS »March 30, 2007
- [5] J. M. Yeomans,” Statistical Mechanics of Phase Transitions”, Oxford University Press. New York (1992).
- [6] Jaeger and Gregg, “the Ehrenfest classification of phase transition: introduction and Evolution”, Archive for history of exact science, 53 (1998) 51.
- [7] Walter Greiner, Luding Neise, Horst Stöcker. « Thermodynamique et Mécanique Statistique» ,Trad. De l’anglais par Hans Aksa, 1999
- [8] Éric Brillaux, « Théorie de Landau ». Volume 1. No. 1. - Février 2016. Pages 23 – 30
- [9] Vincent Dupuis, «Transition de phase 2 », Université Pierre et Marie Curie .19 Novembre 2009
- [10] Guillaume Ferlat. « transition de phase 2 ». Université Pierre et Marie Curie. 25 Novembre 2015
- [11] Alexandre Gighère, « Transitions De Phase Magnétique Du Premier Ordre Méta magnétisme Et Effet Magnétocalorique Dans Des Alliages Intermet Alliques Choisis ». Novembre 1998 Université du Québec à Trois-Rivières
- [12] Nicolas Vandewalle, Stéphane Dorbolo, « Introduction à la Physique Statistique », Institut de Physique B5a. Université de Liège B-4000 Liège, Belgique.
- [13] Guillaume Provencher. « Exposants géométriques des modèles de boucles dilués et idempotents des TLn-modules de la chaîne de spins XXZ ». Université de Montréal .31 décembre 2012.
- [14] Y. Velenik, « LE MODELE D’ISING ». Version du 25 mai 2009.université de Genève
- [15] L. Onsager, Phys Rev, 65, (1944) 117.
- [16] François David. « Introduction à la théorie statistique des champs et au groupe de renormalisation ». Service de Physique Théorique - CEA-Saclay 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France. 13 novembre 2006

[15] G F. Newell and EW. Montroll, “On the Theory of the Ising Model of Ferromagnetism”,  
Reviews of Modern Physics 25, (1953) 353.

# Chapitre III

### III.1 Introduction

Le modèle Blume-Emery-Griffiths (BEG) est un modèle en treillis simple qui présente des transitions de phase de premier ordre et de second ordre. Depuis son introduction en 1971 en tant que modèle d'Ising qui capture le diagramme de phase du mélange  $He^3 - He^4$ , 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 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 telles que les algorithmes de Monte Carlo [1].

L'hamiltonien de modèle d'Ising spin-3/2 avec des interactions d'échange bilinéaires et biquadratiques de plus proche voisin, ce qui est également connu sous le nom spin-3/2 isotrope de modèle Blume-Emery-Griffiths (BEG) sur l'analogie du modèle BEG isotrope de spin-1, a attiré beaucoup d'attention car il a été initialement introduit pour expliquer la transition de phase  $DyVO_4$  et son diagramme de phase a été obtenu dans l'approximation du champ moléculaire. Un autre spin-3/2 de modèle d'Ising a été plus tard introduit pour étudier les propriétés tricritiques dans les mélanges de fluides ternaires. Un modèle d'Ising de spin -3/2 avec les interactions d'échange voisin le plus proche, bilinéaire et biquadratique, et avec une interaction de champ de cristal ou un potentiel à ion unique (D) est connu sous le nom de modèle BEG de spin-3/2, qui est une extension du modèle BEG spin-1. Les propriétés d'équilibre du modèle BEG spin-3/2 ont été étudiées par des méthodes bien connues dans la physique statistique à l'équilibre comme le MFA (approximation de champ moléculaire).

Le modèle Blume-Capel (BC) de spin-3/2 est un hamiltonien du modèle d'Ising spin-3/2 avec seulement des interactions J et D. Le modèle BC de spin-3/2 est aussi une extension du modèle BC spin-1, introduit par Blume et indépendamment par Capel [2]. Et sa généralisation, le modèle Blume-Emery-Griffiths (BEG) sont utiles pour représenter une variété de systèmes physiques et chimiques à l'équilibre tels que le MFA, l'approximation de la paire, la simulation MC, l'échelle de taille finie de matrice de transfert (TMFSS), les

méthodes d'expansion en série et approche à couplage constant. Toutes ces méthodes affirment l'existence du point tricritique dans le diagramme de phase [3].

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.

### III.2 Définition du modèle BEG :

Le modèle Blume Emery Griffiths (BEG) est important dans la mécanique statistique. Il a été utilisé pour étudier une variété de systèmes physiques et chimiques dans les dernières décennies. L'étude de ses propriétés magnétiques a suscité une attention considérable car a été proposé par Blume, Emery et Griffiths. Il est l'un des rares et simples modèles connus pour présenter, dans sa version du champ moyen, la transition de phases de second et premier ordre. Cette dernière étant due à une séparation de phase. En raison de cette propriété, le modèle a été largement étudié comme un modèle de nombreux systèmes, y compris le mélange He3-He4, microémulsions, les alliages de semi-conducteur, etc....

Le modèle BEG permet de modéliser des mélanges binaires dont une des composantes a un degré de liberté de type magnétique ou superfluide [4,5].

Blume, Emery et Griffiths ont choisi de modéliser le mélange  $He^3 - He^4$  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 Blume-Emery-Griffiths est un modèle général de spin-1 Ising donné par :

$$H = -J \sum_{(i,j)} S_i S_j - K \sum_{(i,j)} S_i^2 S_j^2 - \Delta \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (III.1)$$

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 les couplages bilinéaires et biquadratiques, et D 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  $S_i = \pm 1$ . Le système est considéré comme un système

magnétique dilué dans lequel le nombre de sites vacants varie en fonction de la Température (T). Ce modèle peut également décrire la phase de mélange u superfluide He-4 ( $S_i = +1, -1$ ) et du fluide normal He-3 ( $S_i = 0$ ) à basse température. Autrement dit, une aimantation spontanée nulle pour compléter le désordre spatial, tandis que les états avec  $\langle S \rangle > 0$  sont interprétés comme ordonnés. Les plus proches voisins interagissent avec l'énergie potentielle  $V = -(K + J)$  sont sur le même sous-réseau, sinon  $V = -(K - J)$  [6].

### **III.3 Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 anti-ferro frustré sur un réseau triangulaire :**

#### **III.3.1 L'Hamiltonien du modèle :**

Nous travaillons dans ce chapitre sur le modèle de Blume-Emery-Griffiths, à interactions antiferromagnétiques avec le premier plus proche voisin. Nous introduisons le spin-3/2 avec un réseau triangulaire frustré sous l'influence d'un champ externe. Nous faisons référence à une étude de M. Zukovic du même modèle mais à spin-1. Le modèle est donné par l'Hamiltonien suivant :

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 - D \sum_i S_i^2 - h \sum_i S_i \quad (III.2)$$

$S_i = \pm 3/2, \pm 1/2$ ,  $J_1$  et  $J_2$  sont les paramètres d'interaction bilinéaire et biquadratique.  $D$  est le champ cristallin et  $h$  est le champ externe.

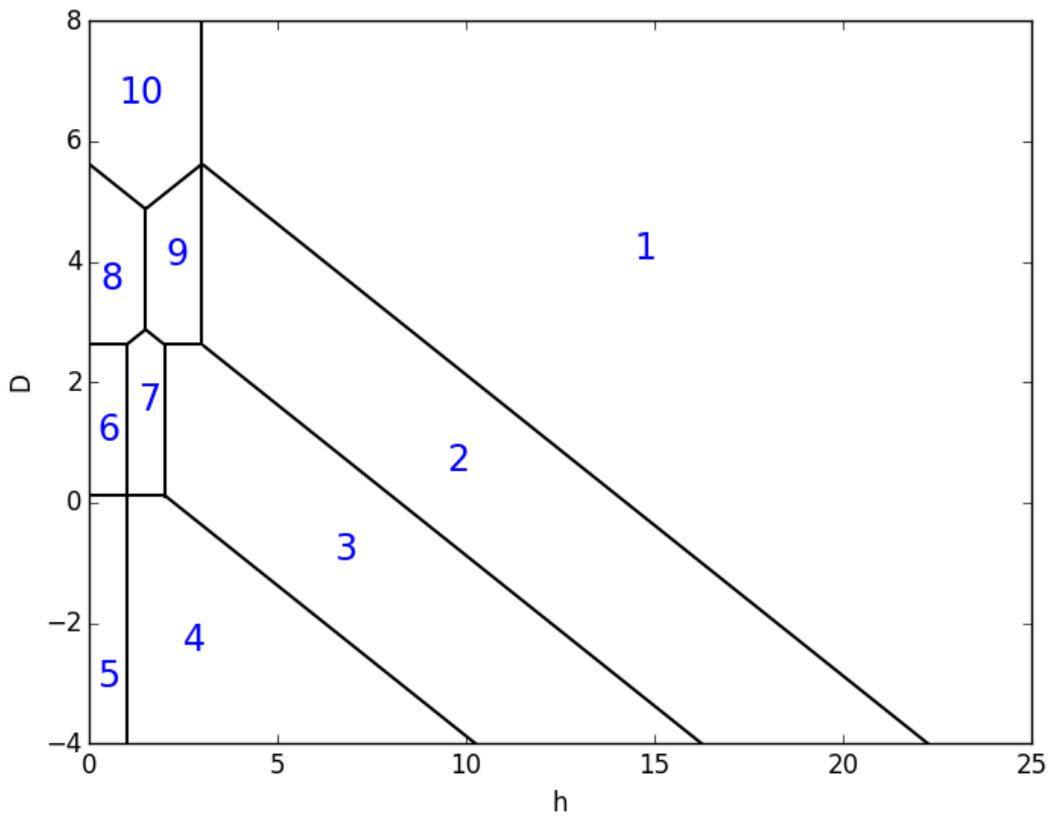
L'énergie par plaquette  $E_p$  se calcule de la façon suivante :

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

#### **III.3.2 Diagramme de phases à l'état fondamental T=0**

A partir de l'équation (III.3), Nous avons calculé les énergies des différentes configurations possibles par un calcul analytique. Après les avoir comparé par paire nous avons eu les configurations ayant des énergies minimum et nous les avons introduits dans le programme. Le calcul numérique, pour différentes valeurs du paramètre d'interaction  $J_2$ , en gardant  $J_1 = -1$ , Puis nous a donné les plus stables. Afin de calculer cette dernière, nous avons

calculé 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.



**Figure III.1 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour  $J_1 = -1$  et  $J_2 = -1,25$ .**

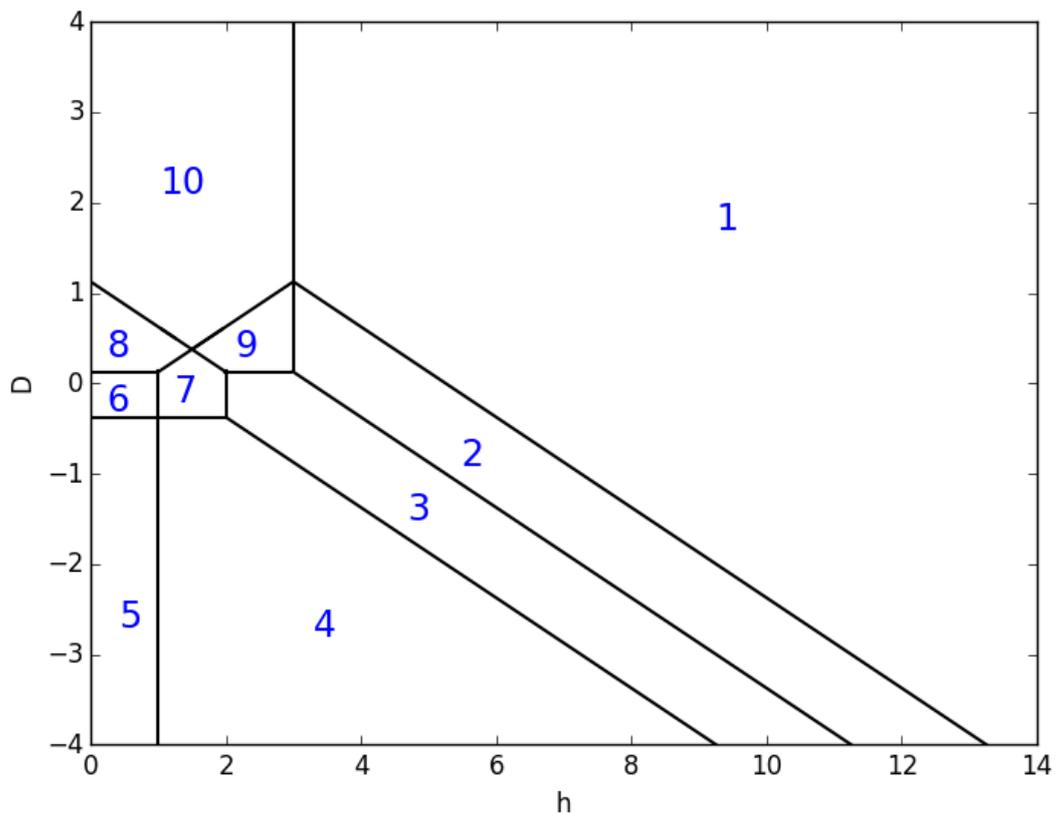


Figure III.2 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour  $J_1 = -1$  et  $J_2 = -0,25$ .

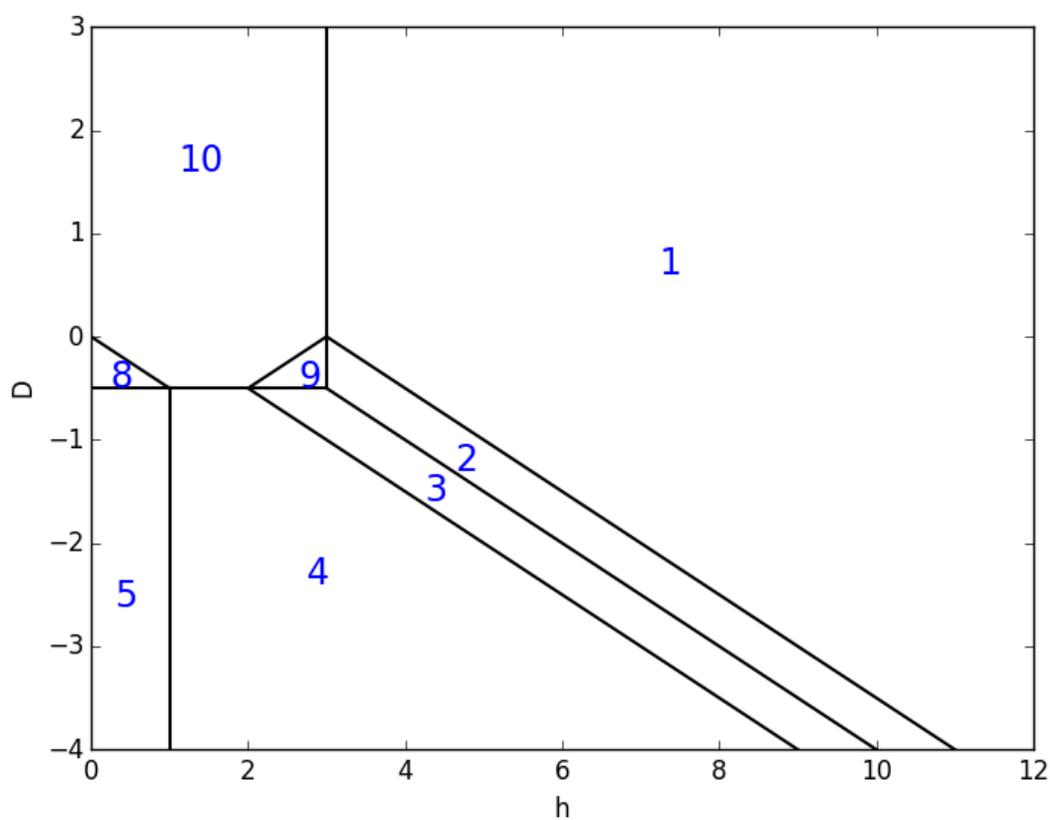


Figure III.3 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour  $J_1 = -1$  et  $J_2 = 0$ .

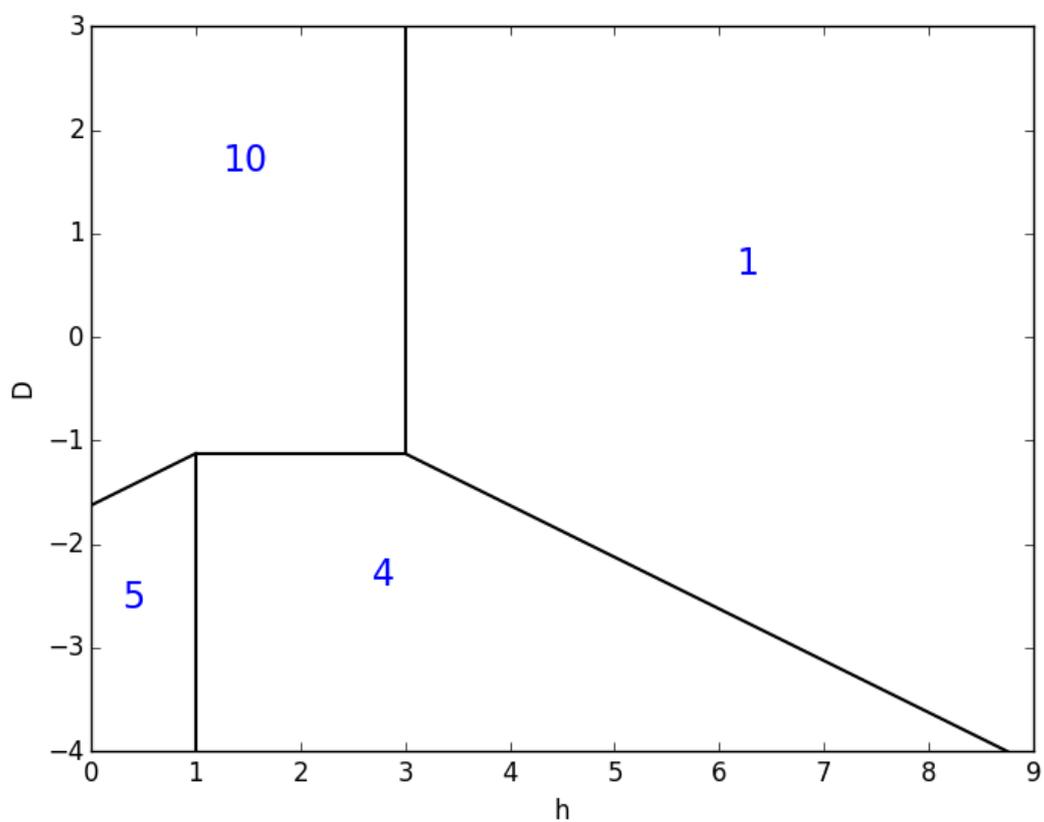


Figure III.4 – Diagramme de phase des états fondamentaux du modèle de Blume-Emery-Griffiths pour  $J_1 = -1$  et  $J_2 = 0, 25$ .

### Chapitre III Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 frustré sur un réseau triangulaire

Les différentes phases stables sont indiquées dans le tableau comme suit :

La phase	$S = \{S_a S_b S_c\}$	$E_p$
1	{3,3,3}	$\frac{-27 J_1}{12} - \frac{243 J_2}{48}$ $-\frac{27D}{12} - \frac{9h}{6}$
2	{3,3,1}; {3,1,3}; {1,3,3}	$\frac{-15 J_1}{12} - \frac{99 J_2}{48}$ $-\frac{19D}{12} - \frac{7h}{6}$
3	{3,1,1}; {1,3,1}; {1,1,3}	$\frac{-7 J_1}{12} - \frac{19 J_2}{48}$ $-\frac{11D}{12} - \frac{5h}{6}$
4	{1,1,1}	$\frac{-3 J_1}{12} - \frac{3 J_2}{48} - \frac{3D}{12}$ $-\frac{3h}{6}$
5	{1,1,-1}; {1,-1,1}; {-1,1,1}	$\frac{1 J_1}{12} - \frac{3 J_2}{48} - \frac{3D}{12}$ $-\frac{1h}{6}$
6	{-1,3,-1}; {-1,-1,3}; {3,-1,-1}	$\frac{5 J_1}{12} - \frac{19 J_2}{48} - \frac{11D}{12}$ $-\frac{1h}{6}$
7	{3,1,-1}; {3,-1,1}; {1,3,-1}; {1,-1,3}; {-1,3,1}; {-1,1,3}	$\frac{1 J_1}{12} - \frac{19 J_2}{48} - \frac{11D}{12}$ $-\frac{3h}{6}$
8	{3,-3,1}; {3,1,-3}; {-3,3,1}; {1,3,-3}; {1,-3,3}; {-3,1,3}	$\frac{9 J_1}{12} - \frac{99 J_2}{48} - \frac{19D}{12}$ $-\frac{1h}{6}$

9	$\{3,3,-1\}; \{3,-1,3\}; \{-1,3,3\}$	$\frac{-3J_1}{12} - \frac{99J_2}{48}$ $-\frac{19D}{12} + \frac{5h}{6}$
10	$\{3,-3,3\}; \{-3,3,3\}; \{3,3,-3\}$	$\frac{9J_1}{12} - \frac{243J_2}{48}$ $-\frac{27D}{12} - \frac{3h}{6}$

**Tab III.1: Les différentes phases stables et ses énergies**

Pour  $J_2 = (-1.25, -0.25)$  nous avons trouvé les mêmes phases et pour  $J_2 = (0, 0.25)$  nous avons remarqué que certaines phases ont disparu.

### III.3.3 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 He3-He4.

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 sont explicitement introduits. Nous considérons l'hamiltonien suivant :

$$\begin{aligned}
 H_0 = & -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^B - J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^C - J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^B S_j^C \\
 & -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{B^2} - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{C^2} - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{B^2} S_j^{C^2} \\
 & - D \left( \sum_{i \in A} S_i^{A^2} + \sum_{i \in B} S_i^{B^2} + \sum_{i \in C} S_i^{C^2} \right) \\
 & - h \left( \sum_{i \in A} S_i^A + \sum_{i \in B} S_i^B + \sum_{i \in C} S_i^C \right)
 \end{aligned}
 \tag{III.4}$$

### Chapitre III Modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 frustré sur un réseau triangulaire

---

Où  $S_i = \pm 3/2, \pm 1/2$ ,  $J_1$  et  $J_2$  sont les paramètres d'interaction bilinéaire et biquadratique.  $D$  est le champ cristallin et  $h$  est le champ externe.

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

$$\langle S_i \rangle = m, \quad \langle S_i^2 \rangle = Q$$

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 :

$$\begin{aligned} \langle S_i^A \rangle &= mA, & \langle S_i^B \rangle &= mB, & \langle S_i^C \rangle &= mC \\ \langle S_i^{A^2} \rangle &= QA, & \langle S_i^{B^2} \rangle &= QB, & \langle S_i^{C^2} \rangle &= QC \end{aligned}$$

Tel que :

$$mA = \frac{\text{Tr} S_i^A e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; \quad mB = \frac{\text{Tr} S_i^B e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; \quad mC = \frac{\text{Tr} S_i^C e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0} \quad (III.5)$$

$$QA = \frac{\text{Tr} S_i^{A^2} e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; \quad QB = \frac{\text{Tr} S_i^{B^2} e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0}; \quad QC = \frac{\text{Tr} S_i^{C^2} e^{-\beta H_{MF}}}{Z_0} \quad (III.6)$$

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

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

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

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

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

Avec  $\{Z_{AB}, Z_{AC}, Z_{BC}\}$  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 :  $F = \ln Z_0 + \langle H - H_0 \rangle$ .

### III.3.4 résultat

Nous avons calculé analytiquement les aimantations  $m$ , les moments quadripolaires  $Q$ , la valeur moyenne de  $Heff$ , 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 :

$m_A$

$$= - \frac{\left[ 3 \sinh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(m_B + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(Q_B + Q_C)) \right] + \sinh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(m_B + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(Q_B + Q_C)) \right] \right]}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(m_B + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(Q_B + Q_C)) \right] + 2 \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(m_B + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(Q_B + Q_C)) \right] \right]} \quad (III.7)$$

$m_B$

$$= - \frac{\left[ 3 \sinh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_C)) \right] + \sinh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_C)) \right] \right]}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_C)) \right] + 2 \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_C)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_C)) \right] \right]} \quad (III.8)$$

$m_C$

$$= - \frac{\left[ 3 \sinh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_B)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_B)) \right] + \sinh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_B)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_B)) \right] \right]}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_B)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_B)) \right] + 2 \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(m_A + m_B)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(Q_A + Q_B)) \right] \right]} \quad (III.9)$$

QA

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{9}{2} \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \right. \\
 & \left. \frac{1}{4} \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \right] \\
 = & \frac{\left[ \frac{9}{2} \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \right.}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] + \right.} \\
 & \left. \left. \frac{1}{4} \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \right]}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mB + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QB + QC)) \right] \right]} \quad (III. 10)
 \end{aligned}$$

QB

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{9}{2} \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \right. \\
 & \left. \frac{1}{4} \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \right] \\
 = & \frac{\left[ \frac{9}{2} \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \right.}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] + \right.} \\
 & \left. \left. \frac{1}{4} \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \right]}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mC)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QC)) \right] \right]} \quad (III. 11)
 \end{aligned}$$

QC

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{9}{2} \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \right. \\
 & \left. \frac{1}{4} \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \right] \\
 = & \frac{\left[ \frac{9}{2} \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \right.}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[ -\frac{9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] + \right.} \\
 & \left. \left. \frac{1}{4} \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \right]}{\left[ 2 \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \times \exp \left[ -\frac{1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \right]} \quad (III. 12)
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} & \times \left[ 2 \cosh \left[ \frac{3}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \exp \left[ \frac{-9}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \right. \\ & \quad \left. + 2 \cosh \left[ \frac{1}{2} B(-h - 3J_1(mA + mB)) \right] \cdot \exp \left[ \frac{-1}{4} B(-D - 3J_2(QA + QB)) \right] \right] \end{aligned} \quad (III.13)$$

$$F = \ln Z_0 + \langle \quad J_1 \left( \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^B + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^A S_j^C + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^B S_j^C - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \right) + J_2 \left( \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{B^2} + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{A^2} S_j^{C^2} + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{B^2} S_j^{C^2} - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 \right) \quad \rangle \quad (III.14)$$

Nous avons essayé de déterminer les solutions des équations self consistantes mais nous avons eu un problème de convergence.

**BIBLIOGRAPHIQUES**

- [1] Woo Chang Chung, “Application of the Blume-Emery-Griffiths Model to Cold-Atom Mixtures Department of Physics”, 02139, USA (Dated: May 18, 2015).
- [2] Osman Canko, Mustafa Keskin. “ Relaxation theory of spin-3/2 Ising system near phase transition temperatures”. *Department of Physics, Erciyes University, 38039 Kayseri, Turkey.*
- [3] M. Badehdah, S. Bekhechi, A. Benyoussef, and M. Touzani, *Eur. Phys. J. B* 4, 431-440 (1998).
- [4] M. Yezli, S. Bekhechi, F. Hontinfinde, H. EZ-Zahraouy. *Physica A* 448 (2016) 81–90.
- [5] Ibtissam DANI, « Contribution à l'étude théorique des propriétés magnétiques des matériaux cuprates multiferroiques en multicouches et nano-films », UNIVERSITE MOHAMMED V- Rabat.
- [6] Lev Gelb, “Theoretical Studies of Surface Phase Transitions”, August 1995.

# **Conclusion générale**

## Conclusion générale

Dans cette mémoire de master, nous avons étudié le modèle de Blume-Emery-Griffiths de spin  $-3/2$  sur réseaux triangulaire, par la méthode exacte et par l'utilisation du champ moyen nous avons présenté dans le premier chapitre, le comportement magnétique des matériaux pour différents paramètres extérieurs, nous avons détaillé l'origine du magnétisme dans les différents comportements magnétiques de la matière.

Dans le second chapitre, nous avons montré la théorie de transition de phase et leur classification tel que d'Ehrenfest et Landau, cette dernière le plus utile dans ce travail car elle a rentré la notion de paramètre d'ordre pour classifier les transitions de phase, nous avons présenté également le modèle d'Ising le plus célèbre modèle de la Physique Statistique, à 1D et 2D.

Dans le dernier chapitre, nous avons présenté notre travail de fond. Nous avons défini et réalisé le modèle à étudier à savoir le modèle de Blume-Emery-Griffiths spin  $-3/2$ . Ce dernier, à été consacré à l'étude de l'état fondamentale, Nous avons considéré un système triangulaire avec sa particularité de frustration. Les interactions sont antiferromagnétiques avec le premier plus proche voisin. L'étude analytique que nous avons établi, nous à fournie les énergies des différentes configurations. À partir d'une étude numérique, nous avons montré les phases les plus stables pour traiter les diagrammes, ces derniers sont riches de phases avec des transitions de phase du premier ordre.

La deuxième méthode que nous avons fait, c'est la méthode de l'approximation du champ moyen. C.-à-d. la présence de la température. Nous avons calculé analytiquement six paramètres d'ordre tel que l'aimantation et le moment quadripolaire, puis la fonction de partition. Nous essayerons de compléter ce dernier travail par des études numériques. Mais nous sommes confrontés des problèmes de convergence.

## **Abstract:**

This master's thesis deals with the study of the Blume-Emery-Griffiths model with spin-3/2 antiferromagnetic on triangular lattice by the statistical mechanics method such as the exact crystal field method in the ground state, The existence of the new rich phases frustrated at  $T = 0$  presented on rich phase diagrams, these diagrams also present first order transitions. Then we calculated the parameters of the mean field method analytically.

**Keywords:** BEG Model, Frustrated Phase, Phase Diagram, First Order Transition, Exact Method.

## **Résumé :**

Cette mémoire de master concerne l'étude du modèle de Blume-Emery-Griffiths à spin-3/2 antiferromagnétique sur réseau triangulaire par la méthode de mécanique statistique telle que la méthode exacte sous champ cristallin à l'état fondamentale, nous avons montré l'existence des nouvelles phases riches frustré à  $T=0$  présenté sur des diagrammes riches de phase, ces diagrammes présentent aussi des transitions du premier ordre. Puis nous avons calculé analytiquement les paramètres de la méthode du champ moyen.

**Mots clés:** Modèle BEG, Phase frustré, Diagramme de phase, transition de premier ordre, Méthode exacte.

## **الملخص :**

هذه رسالة ألما ستير تتناول دراسة نموذج بلوم-امري- جرفت نو السبين 2/3 مضاد الانجذاب المغنطيسي شعريية الثلاثي على الطريقة الميكانيكية الإحصائية مثل طريقة الضبط في المجال البلوري في الشرط الأساسية، لقد أظهرنا وجود مراحل غنية جديدة بالجسيمات ل  $T = 0$  قدم في مرحلة المخططات الغنية، كما تظهر هذه المخططات التحولات من الدرجة الأولى. ثم حسبنا الإعدادات التحليلية على حقل متوسط.

الكلمات المفتاحية: نموذج BEG ، منحنى، مرحلة بالجسيمات، أول تحول النظام، طريقة دقيقة.