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



UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEN

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 :

Mr AMIMER Zakaria

Sur le thème

Etude du model Ashkin-Teller à spins mélangés (1,3/2)

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

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

Laboratoire Automatique Tlemcen(LAT) Tlemcen - Algérie



Louange à Allah et à la paix et les bénédictions soient sur le sceau des prophètes et des messagers Je dédie cette thèse à ... 💉

Ma mère NASSIRA, qui a œuvré pour ma réussite, Dont le mérite, les sacrifices et les qualités humaines m'ont permis de vivre ce jour.

Mon père BACHIR, Ce travail est le fruit de tes sacrifices que tu as consentis pour mon éducation et ma formation.

Mes frères et ma sœur (SAMIHA) qui n'ont cessé d'être pour moi des exemples de persévérance, de courage et de générosité. Tous les fils de mon frère (KHADIDJA, FATIMA, ARWA, MILOUD)

Tous Les membres de ma famille

Tous les amis et les proches sans exception

Mes chers collègues de l'université ABOU BAKR BALKAID, TLEMCEN et surtout (Mlle. AMEL BENMANSOUR et Mlle. FATIHA BENRAZZAK) et les autres collègues Dans mon école de carrière.

Tous les gens m'aiment et tous ceux qui me sont chers

Qui m'a aidé de loin et à proximité

Enfin tous ceux et toutes celles qui m'ont accompagné et soutenu durant cette année de formation



REMERCIMENT

Louange à Dieu, qui nous a éclairé le chemin de la science et de la connaissance et nous a aidés à réaliser ce travail et nous accorde le succès à ce travail, nous avons dirigé ses sincères remerciements et sa gratitude.

La réalisation de ce mémoire a été faite au niveau de laboratoire d'automatique de l'Université *ABOU BAKR BELKAID de TLEMCEN* (LAT) sous la direction de professeure **Tayeb BENOUAZ**, je tiens à leur exprimer particulièrement ma gratitude, ils ont guidé mes travaux avec beaucoup de patience tout le long de la préparation de cette thèse.

Je voudrais tout d'abord adresser toute ma gratitude au directeur de ce mémoire Mr Smain **BEKHECHI**, pour sa patience, sa disponibilité et surtout ses judicieux conseils, qui ont contribué à alimenter ma réflexion.

Je désir aussi remercier le professeure **Tayeb** *BENOUAZ* qui accepte d'être président du jury de ma thèse avec fierté.

Nos vifs remerciements vont également aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions Et qui sont :Mr Nasr-Eddine *CHABANE SARI* Professeur à l'Université de Tlemcen et Mr Abdelkrim *MERAD* Professeur à l'Université de Tlemcen, Mr Abdelhak *CHIKHAOUI* MCA à l'Université de Tlemcen et Mr Nabil *BRAHMI* MCB à l'Université de Tlemcen.

Nous tenons à ne remercier toute personne qui a participé de près ou de loin à l'exécution de ce modeste travail et spécialement **Mme Rania** *BOUDEFLA* doctorat en physique théorique.

Ainsi que les membres de laboratoire LAT particulièrement Mlle Fouzia BELARIBI.

Enfin, nous tenons à remercier tous les membres qui ont bien voulu contribuer à mon encouragement durant ce période de la réalisation de cette thèse de mémoire. Principalement mes parents et nous adressons nos plus sincères remerciements à tous nos proches et amis.

Merci

Table des matières

Dédicace.		
Remerciem	ent.	
Table de ma	atière.	
Liste des fig	gures.	
Liste des ta	bleaux.	
INTRODU	CTION GENERALE	1
REFEREN	CE BIBLIOGRAPHIQUE	4
Chapitre I :	Fondement de la physique statistique	5
1.	Introduction à la physique statistique	6
2.	Les hypothèses fondamentales de la mécanique statistique	7
3.	Principales définitions et résultats de la mécanique statistique	8
	3.1 Entropie	8
	3.2 Température et équilibre thermique	8
	3.3 Potentiel chimique et équilibre des particules	10
4.	La fonction de partition et son importance	11
5.	Relation entre la fonction de partition et les grandeurs	
	thermodynamiques	13
	5.1 Énergie interne moyenne	14
	5.2 Capacité calorifique	14
	5.3 Entropie	15
	5.4 Energie libre	15
	5.5 La pression	16
	5.6 Potentiel chimique	16
6.	Les trois ensembles statistiques fondamentaux	18
	6.1 Ensemble Micro canonique	18
	6.2 Ensemble Canonique	19
_	6.3 Ensemble grand canonique	20
7.	Grandeurs relatives au champ magnétique	21
8.	Les types de magnétismes	23
	8.1 Le diamagnétisme	
	8.2 Le paramagnétisme	
	8.3 L'antiterromagnétisme	
	8.4 Le terromagnétisme	
	8.5 Le terrimagnetisme	

LES REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES28

Chapitre II	: Les transitions de phase	
1.	Introduction sur les transitions de phase	
2.	La classification de la transition de phase	
3.	Paramètre d'ordre	
4.	Le modèle d'Ising	41
5.	La théorie de Landau	46
LES REFE	RENCES BIBLIOGRAPHIQUES	50
Chapitre II	E: Etude du modèle Ashkin-Teller à spins mélangés (3/2,1)	51
1.	Introduction au modèle Ashkin-Teller	52
2.	Transitions de phase dans le modèle Ashkin-Teller	53
3.	Les propriétés critiques du modèle Ashkin-Teller	58
4.	Le modèle Ashkin-Teller à spin mélangés (1,3/2)	60
	4.1 Diagramme de phase à l'état Fondamental	60
		(0)
	4.2 L'approximation par la méthode de champ moyen	
LES REFE	4.2 L'approximation par la méthode de champ moyen	62 69

Liste des figures

La figure (I.1) : (a) dépendance sur le champ de l'aimantation et variation thermique de la
susceptibilité magnétique ;(b) pour des substances diamagnétiques ;(c)Pas de moment
magnétique
La figure (I.2) : le comportement paramagnétisme
La figure(I.3) : le paramagnétisme des atomes libres
La figure (I.4): Le comportement d'antiferromagnétisme
La figure (I.5) : Le comportement ferromagnétique
La figure (I.6) : Arrangement des moments magnétiques dans un matériau
ferrimagnétique
La figure (II.1): Schéma relative au divers changement de phase présenter les trios états
de la matière
La figure (II.2) : C'est le diagramme (pression, température) montrant les domaines
d'existence de trois phases (solide, liquide, gaz)
La figure (II.3) : Diagramme (champ magnétique, température) pour un corps qui
présente une transition ferromagnétique
La figure (II.4) : courbe d'aimantation M(H) pour un ferromagnétique à différentes
températures pour T < Tc
La figure (II.5) : Diagramme de phase montre un point tri critique pour un matériau
antiferromagnétique
La figure (II.6) : Transitions du premier ordre
La figure (II.7) : Transitions du deuxième ordre
La figure (II.8) : Transition de phase du 1 ^{er} et 2 ^{ème} ordre selon landau
La figure (II.9) : Model d'Ising à une dimension44
La figure (II.10) : Model d'Ising de deux dimensions
La figure (II.11) : Différent courbe représente la variation de l'énergie $(F - F_0)$ en
fonction du paramètre d'ordre m47
La figure (III.1) : Diagramme schématique de la surface critique σ dans l'espace w

Liste des figures

La figure (III.2) : Diagramme de phase à l'état fondamentale (T=0)62
La figure (III.3) : Trace les paramètres $\langle \sigma \rangle$, $\langle \sigma S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$ en fonction de la
température en utilisant l'approximation de champ moyen pour K4=2 et D=168
La figure (III.4) : Trace les paramètres $\langle \sigma \rangle$, $\langle \sigma S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$ en fonction de

latempérature en utilisant l'approximation de champ moyen pour K4=5 et D=2.....69

Liste des tableaux

Tableau (I.1) : Relation entre la fonction de partition et les grandeurs

thermodynamiques	17
Tableau(I.2) : quelque composante et la valeur de susceptibilité correspond pour le diamagnétisme.	23
Tableau(I.3) : quelque composante et la valeur de susceptibilité correspond pour le paramagnétisme.	24
Tableau (II.1) : paramètre d'ordre pour chaque transition de phase	41



Introduction générale

L a physique statistique est née au milieu du 19ème siècle de l'hypothèse atomique et de la volonté d'expliquer les mystérieuses lois de la thermodynamique dans ce cadre. Parmi les physiciens du 19ème siècle, très peu d'entre eux croient en cette hypothèse. En 1859, Maxwell découvre la loi de distribution des vitesses d'un gaz. Et en 1872, Boltzmann propose une interprétation statistique de l'irréversibilité et de l'atteinte de l'équilibre qui lui vaut de nombreuses critiques et ultérieurement Planck en 1900, utilise les travaux de Boltzmann pour résoudre le problème du corps noir. Il en profite pour définir deux constantes: $\mathbf{K}_{\mathbf{B}}$ et **h**; aussi Einstein travaille sur les fondements de la physique statistique appliquée à la mécanique quantique en l'année 1925. **[1]**

D'ailleurs, La physique statistique est un des piliers de la physique moderne avec la mécanique quantique et la relativité [1], et on définie comme la théorie physique des propriétés thermiques de Systèmes macroscopiques à partir d'une connaissance des forces microscopiques entre les particules constitutives. [2]

L'éducation de cette branche de physique consiste à :

- Expliquer le comportement macroscopique à partir des propriétés microscopiques, lesquelles sont régies par les lois de la mécanique quantique. Nous verrons que la mécanique quantique se manifeste à notre échelle macroscopique de façon frappante par le biais de la physique statistique.
- Atteindre cet objectif par une approche statistique. Les concepts d'irréversibilité, d'entropie, de température, de pression, de potentiel chimique etc. sont en effet des propriétés émergentes de nature statistique.
- 3. Donner un sens physique aux matériaux principes de la thermodynamique.
- Faire des prévisions quantitatives. Contrairement à la thermodynamique, la physique statistique a un grand pouvoir prédictif. [1]

Supplémentairement, la physique statistique utilise des concepts dont la portée dépasse le cadre de la physique : phénomènes collectifs, brisure de symétrie, transition de phase, marche aléatoire, simulation Monte Carlo, groupe de renormalisation etc.... [1]

Par conséquence, quand nous disons les concepts de physique statistique, en divers vers le terme de transition de phase ce qui est joue un rôle très important en ce branche de physique, à été commencée en 1944 lorsque Onsager a réussi à mener à bien un calcul statistique mécanique exact pour un modèle atomique interactif simple, c'est le modèle d'Ising. [3]

Introduction générale

Tant que nous parlons sur le modèle d'Ising, donc la généralisation de deux modèles qui mentionné donne un modèle très connu en physique statistique c'est le modèle d'ASHKIN-TELLER qui considérée en 1943 d'après Julius Ashkin et Edward Teller. **[4]**

Par analogie l'objectif de ce travail est l'étude de ce modèle à spins mélangés (3/2,1) par la méthode direct (exacte) telle que en travaille sur un réseau cubique simple, à chaque site de ce réseau en dépose deux spins (S et σ), par considération on a $S = \pm 1, 0$ et $\sigma = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$, donc nous obtenus le diagramme de phase à l'état fondamentale (T=0) et puis on utilise l'approximation de champ moyen quand la température est déférent de zéro. Par suite, ce document est organiser en Troie chapitre telle que :

Dans le chapitre I : nous avons décrit quelque notion fondamentale de la physique statistique sachant que les définitions principales (température, entropie,...) et montre les trois ensembles statistique, sans oublier la fonction de partition et la relation entre eux et les grandeurs thermodynamiques (la pression, l'énergie libre,....) ; enfin nous avons entamée sur déférent types de magnétisme.

Chapitre II présente un concept générale sur les transitions de phase, nous avons cites comment classifier ces transitions, puis nous avons parles sur le paramètre d'ordre. Et après ca rappelée la théorie de Landau et le modèle d'Ising.

Enfin en chapitre III, nous avons traite le modèle Ashkin Teller à spins mélangés (3/2,1), tous d'abord on a mentionnée une petit introduction sur ce modèle. Et ensuite, nous avons montres tous les résultats qui désigne l'étude de ce model par la méthode exacte dans le cas de température est nulle (l'état fondamentale) et on obtient le diagramme de phase à l'état fondamentales et avoir quelle est les phase stables dans ce cas, et par l'approximation de champ moyen pour une température élevée à l'aide de programme numérique après que nous calculons les équations du champ moyen (la fonction de partition, les aimentations et par suite l'énergie libre).

Finalement, ce document termine par une section de conclusion.

Introduction générale

Les références bibliographiques

[2] TEUNIS C DORLAS, *STATISTICAL MECHANICS FUNDAMENTALS AND MODEL SOLUTIONS*, Department of Mathematics University of Wales Swansea, London, 1999

[**3**] **C. Domb, M.S. Green**, *phase transition and critical phenomena*, volume 6, New York, 1976.

Référence web

[1] http://femt physique.fr/physique statistique/phystat_C1.php.

[4] https://en.wikipedia.org/wiki/Potts_model

Fondement de la physique statistique

1. Introduction à la physique statistique :

La physique statistique est la branche de la physique qui traite des systèmes seulement partiellement connus. Le manque de connaissance maximale de l'état initial du système est souvent dû au très grand nombre de degrés de liberté, comme dans le cas des gaz, mais ce n'est pas nécessairement toujours vrai, et la physique statistique fonctionne aussi bien pour les systèmes simples, Pour quelque raison que ce soit [1].

On peut dire que la nature générale de la procédure mécanique statistique pour le traitement des systèmes complexes consiste à abandonner la tentative de suivre les changements précis d'état qui se produiraient dans un système particulier et En étudiant plutôt le comportement d'une collection ou ensemble de systèmes de structure similaire au système d'intérêt réel, répartis sur une gamme d'états précis différents. A partir d'une connaissance du comportement moyen des systèmes dans un ensemble représentatif, choisi de manière appropriée pour correspondre à la connaissance partielle que nous avons sur l'état initial du système d'intérêt, nous pouvons alors faire des prédictions sur ce qui peut être en moyenne pour le système particulier qui nous intéresse [1].

L'outil théorique fondamental de la physique statistique est donc l'ensemble d'un nombre arbitraire de systèmes, statistique, une "collection mentale" tous préparés de la même manière que le système réel d'intérêt. Seuls les états accessibles, c'est-à-dire les états compatibles avec la connaissance partielle que nous avons du système, seront représentés dans l'ensemble. Plus précisément, en prenant au hasard un système dans l'ensemble, la probabilité de le trouver dans un état donné est égale à la probabilité de trouver le système réel dans cet état donné. Cette affirmation peut être considérée comme la définition de l'ensemble statistique [1].

2. Les hypothèses fondamentales de la mécanique statistique :

Lorsque nous avons une connaissance partielle du système d'intérêt, certains points de l'espace de phase représenteront des états compatibles avec la connaissance partielle que nous avons du système, d'autres ne le seront pas [1].

L'hypothèse fondamentale de la physique statistique classique est la probabilité a priori égale dans l'espace de phase. Selon cette hypothèse dans l'ensemble statistique d'un système isolé, tous les points dans la région accessible de l'espace de phase sont représentés avec des probabilités égales. Dans la mécanique statistique quantique, ce postulat est complété par l'hypothèse que toutes les phases des états dans l'ensemble sont présentes avec des probabilités égales [1].

Le postulat ci-dessus est cohérent avec un résultat important de la mécanique analytique: si dans une région d'espace de phase la densité des points d'un ensemble est uniforme, elle reste uniforme après une transformation canonique, de sorte que le postulat ne dépend pas du choix de la Coordonnées Hamiltoniennes [1].

Tous les micro-états accessibles à un système isolé en équilibre sont équiprobables. Si $\Omega(\epsilon)$ est le nombre de micro-états accessibles à un système isolé en équilibre, la probabilité pour qu'il soit dans un micro-état donné est égale à $\frac{1}{\alpha(\epsilon)}$. Si ce n'est pas le cas, le système est hors d'équilibre et il va évoluer de manière à satisfaire au postulat d'équiprobabilité. Si la seule information que nous ayons sur un système est que son énergie est égale à ϵ , avec éventuellement d'autres contraintes sur certains paramètres externes comme le volume ou le nombre de particules par exemple, il n'y a, a priori, aucune raison de favoriser un des micro-états plutôt qu'un autre. En ce sens, ce premier postulat est l'hypothèse la plus raisonnable que l'on puisse formuler [2].

3. Principales définitions et résultats de la mécanique statistique :

3.1. Entropie :

Dans le cas générale ou on a un système quelconque on définie l'entropie comme une grandeur statistique a été proposer par Gibbs qui est [3] :

$$S = -K_B \sum_i P_i \ln P_i \tag{I.1}$$

Avec P_i la probabilité de l'état microscopique l du système et K_B est la constante de Boltzmann est définie par la relation :

$$K_B = \frac{R}{N} \tag{I.2}$$

R : Constante des gaz parfait et *N* : le nombre d'Avogadro.

L'unité de ce constante et J. K^{-1} . Et la valeur de K_B est $K_B \approx 1,3806 \times 10^{-23} J. K^{-1}$

Particulièrement ; dans un système n'a pas interagir avec les autres systèmes ce qui signifie un système isolé, dans ce cas on suppose le nombre total microscopiques accessible Ω , on obtient l'expression de probabilité microscopique de réaliser l'état *i* de système [4] :

$$P_i = \frac{1}{\Omega} \tag{I.3}$$

Donc l'entropie statistique du système isolé donné par :

$$S = K_B \sum_i \frac{1}{\Omega} \ln \Omega = K_B \frac{1}{\Omega} \ln \Omega \sum_i 1 = K_B \ln \Omega$$
 (I.4)

L'entropie est une grandeur extensive, qui est nul quand l'état microscopique du système est parfaitement connu.

3.2. Température et équilibre thermique :

Pour un système isolé, avec l'énergie ϵ , et à partir de l'expression suivant [5] :

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{1}{K_B T} = \frac{\partial}{\partial \epsilon} ln(\boldsymbol{\Omega}(\epsilon)) = \frac{1}{K_B} \frac{\partial S}{\partial \epsilon}$$
(I.5)

On déduire la relation de température comme suit :

$$\frac{1}{r} = \frac{\partial S}{\partial \epsilon} \tag{I.6}$$

On considère deux systèmes à l'équilibre, avec les énergies $\epsilon^{(1)}$ et $\epsilon^{(2)}$ respectivement, donc les températures et les entropies équivalentes pour chaque système sont :

$$oldsymbol{eta}^{(1)}$$
 , $S^{(1)}$ et $oldsymbol{eta}^{(2)}$, $S^{(2)}$

Maintenant, l'énergie totale reste constante et on suppose l'énergie d'interaction des deux sous –système est négligeable de sorte que l'échange d'énergie est le seule effet de leur contact, et les états des deux sous-systèmes sont encore bien définie, donc la probabilité de l'énergie du premier système soit :

$$P(\epsilon^{(1)}) = \frac{\Omega(\epsilon^{(1)})}{\Omega_t}$$
 (I.7)

Ou $\Omega(\epsilon^{(1)})$ est le nombre d'état du système total avec une énergie $\epsilon^{(1)}$ dans le sous-système 1 et Ω_t est le nombre total de nombre d'états accessibles du système total. La valeur maximal de cette probabilité est obtenue lorsque :

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon^{(1)}} P(\epsilon^{(1)}) = 0 \tag{I.8}$$

Ou :

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon^{(1)}} \ln P(\epsilon^{(1)}) = 0 = \frac{\partial}{\partial (\epsilon^{(1)})} \{ \ln \Omega(\epsilon^{(1)}) - \ln \Omega_t \} = \frac{\partial}{\partial \epsilon^{(1)}} \ln \Omega(\epsilon^{(1)}) \quad (I.9)$$

Puisque le seconde terme ne dépend pas de $\epsilon^{(1)}$ donc sa dérivée est nulle, et comme les deux sous système ne peuvent échanger que de l'énergie nous avons :

$$\boldsymbol{\varOmega}\left(\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}\right) = \boldsymbol{\varOmega}^{1}\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}\boldsymbol{\varOmega}^{2}\boldsymbol{\epsilon}^{(2)} \tag{I.10}$$

Maintenant, on considère que $\epsilon^{(1)} + \epsilon^{(2)} = \epsilon_t$ et donc $\frac{\partial}{\partial \epsilon^{(1)}} = \frac{\partial}{\partial \epsilon^{(2)}}$, la condition en (I.9) donne alors :

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon^{(1)}} \ln \Omega^1(\epsilon^{(1)}) = \ln \frac{\partial}{\partial \epsilon^{(2)}} \Omega^2(\epsilon^{(2)}) \tag{I.11}$$

Ceci veut dire cela :

$$T^1 = T^2$$
, $S^{(1)} + S^{(2)} = maximum$

La partition le plus probable est celle qui rend les deux températures égales et l'entropie totale maximale [5].

3.3. Potentiel chimique et équilibre des particules :

Dans cette partie on a une situation à celle de la section précédente, mais la déférence est que les deux sous système peuvent échanger non seulement de l'énergie, aussi des particules, pour analyser cette situation il est nécessaire d'introduire une nouvelle quantité statistique.

Soit $\Omega(n,\epsilon)$ le nombre d'état accessible d'un système, quand elle contient *n* particule et l'énergie ϵ , si *n* est grand, et on peut supposer que $\Omega(n,\epsilon)$ est une fonction continu de*n*, on définie le potentiel chimique de ce système comme suit [5] :

$$\mu(n,\epsilon) = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial n} \ln \Omega(n,\epsilon) = -T \frac{\partial S}{\partial n}$$
(I.12)

Pour signifie cette quantité, on considère que l'entropie qui vérifier dans l'équation **(I.4)** d'un système par un gaz avec particule est fonction de son énergie, de son volume, de son nombre de particule, telle que :

$$S = S(\epsilon, V, n), dS = \frac{\partial S}{\partial \epsilon} d\epsilon + \frac{\partial S}{\partial V} dV + \frac{\partial S}{\partial n} dn \qquad (I.13)$$

Si le nombre de particule est modifié en conservant le volume et la constante d'entropie, l'équation ci-dessus donne :

$$d\epsilon = \mu dn \tag{I.14}$$

Alors, le potentiel chimique est l'énergie nécessaire pour ajouter une particule au système, en maintenant le volume et l'entropie constante.

Chapitre I : Fondement de la physique statistique

Dans le cas de l'équilibre thermique, on considère deux systèmes contienne des particules du même type ; on mettre-les en contactes et laisse-les échanger d'énergie et des particules. comme précédemment, on suppose que l'énergie d'interaction entre les deux sous-système est négligeable, maintenant on cherche les partitions les plus probables de l'énergie totale ϵ_t et du nombre de particules n_t entre les deux sous-système, pour cette but ,la probabilité que le premier sous-système contient des particules n_1 et d'énergie ϵ_1 est donné par la fonction d'état accessible Ω (n_1, ϵ_1), devisé par le nombre total d'états accessibles Ω_t au système total, telle que [5] :

$$p(n_1, \epsilon_1) = \frac{\Omega(n_1, \epsilon_1)}{\Omega_t}$$
 (I.15)

La condition de probabilité maximale est :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \epsilon_1} \ln \Omega(n_1, \epsilon_1) = \mathbf{0} \\ \frac{\partial}{\partial n_1} \ln \Omega(n_1, \epsilon_1) = \mathbf{0} \end{cases}$$
(I.16)

Puisque le contact a le seul effet de l'échange d'énergie et de particule, on peut écrire :

$$\Omega(\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{\epsilon}_1) = \Omega^1(\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{\epsilon}_1) \,\Omega^2(\boldsymbol{n}_t - \boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{\epsilon}_t - \boldsymbol{\epsilon}_1) \tag{I.17}$$

Ou Ω^1 et Ω^2 désignent séparément les deux sous- système .la condition de probabilité maximal devient :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \epsilon_1} \ln \Omega^1(n_1, \epsilon_1) + \frac{\partial}{\partial \epsilon_1} \ln \Omega^2(n_t - n_1, \epsilon_t - \epsilon_1) = \mathbf{0} \\ \frac{\partial}{\partial n_1} \ln \Omega^1(n_1, \epsilon_1) + \frac{\partial}{\partial n_1} \ln \Omega^2(n_t - n_1, \epsilon_t - \epsilon_1) = \mathbf{0} \end{cases}$$
(I.18)

C'est-à-dire:
$$\beta^{(1)} = \beta^{(2)} et \mu^{(1)} = \mu^{(2)}$$

La répartition la plus probable de l'énergie et du nombre de particule entre les deux soussystèmes mis en contact est celle qui fait égaler à la foi les deux températures et les potentiels chimiques, en gardent à l'esprit la signification physique du potentiel chimique, cette dernière condition indique que les deux systèmes n'ont aucun intérêt énergétique, à l'équilibre pour déplacer une particule d'un système à l'autre **[5]**.

4. La fonction de partition et son importance :

Comme mentionnée précédemment, βqu 'est la mesure de la température du système, alors que les niveaux d'énergie sont les caractéristiques du système lui-même, la quantité $\sum g_i exp(-\beta E_i)$ il est appelé la fonction de partition et est donné par Z, il s'avère la quantité la plus utile dans la physique statistique.

Telle que, g_i est la dégénérescence ou le nombre de micro-état d'énergie, et L'exponentiel indique le nombre d'occupation n_i comme une fraction du nombre total N des particules.et la somme n'étant qu'un facteur de normalisation.

Le premier point que nous devons souligner est que l'expression :

$$Z = \sum_{i} g_{i} e^{-\beta E_{i}} = g_{1} e^{-\beta E_{1}} + g_{2} e^{-\beta E_{2}} + \dots \dots \dots g_{i} e^{-\beta E_{i}}$$
(I.19)

Nous avons choisi de résumer sur chaque niveau d'énergie, le premier terme relatif au niveau e1, le second à e2 et ainsi de suite. La manière équivalente de définir Z peut être, comme somme de terme sur tout état quantique accessible qui pourrait être écrit comme :

$$Z = \sum_{i} e^{-\beta E_{i}} \tag{I.20}$$

Le deuxième point à faire est que z tel que défini par est la fonction de partition pour le système et n'a de sens que pour un système de particules indépendantes, la signification de la fonction de partition Z peut être comprise comme suit :

En utilisant la définition (**I.20**) pour la fonction de partition, la loi de répartition est exprimée comme :

$$\frac{n_i}{N} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \tag{I.21}$$

Dans (I.21) si *i* désigne l'état d'énergie le plus bas de sorte que $E_i = 0$ alors (I.21) devient :

$$\frac{n_i}{N} = \frac{1}{Z} \tag{I.22}$$

On peut définir la fonction de partition comme un inverse de la fraction de particules occupant l'état d'énergie la plus basse. En variante, il peut être défini comme le rapport entre le nombre total de particules dans un système et le nombre de particules dans l'état d'énergie la plus basse, à partir de ce point suivant autour de Z émergent:

- A- il indique le mode de distribution des particules dans différents niveaux d'énergie.
- B- c'est un nombre pur, donc une quantité sans dimension.
- C- elle ne peut jamais être nulle, la valeur la plus basse serait 1, au zéro absolu (0K) où toutes les particules occupent l'état d'énergie la plus basse à une température plus élevée, la valeur de Z est beaucoup plus grande que 1; Considérée comme une mesure de la mesure dans laquelle les molécules peuvent s'équiper de l'état fondamental [6].

5. Relation entre la fonction de partition et les grandeurs thermodynamiques :

Aux calculs de la fonction thermodynamique, il faut reconnaître que, tandis que la mécanique quantique traite de l'arrangement détaillé et du mouvement des molécules, la thermodynamique traite de leur comportement moyen. Par exemple, la pression exercée par le gaz est interprétée comme la force moyenne par unité de surface Exercée par la molécule et pour spécifier la pression il n'est pas nécessaire de savoir laquelle des molécules sont en collision avec la paroi à un instant. Thermodynamiques statique est basée sur le principe que les variables thermodynamiques sont la moyenne des propriétés moléculaires et il mit en place Le schéma de calcul de ces moyennes. Si on calcule une propriété moyenne d'un système sur tous ses constituants, la moyenne devrait nous donner la moyenne temporelle du système thermodynamique **[6].**

5.1. Énergie interne moyenne $\langle E \rangle$:

L'énergie moyenne du système de N particules est déterminée à partir de :

$$\langle E \rangle = \frac{\sum E_i g_i e^{-E/KT}}{Z}$$
 (I.23)

Cependant, reconnaissant que :

$$Z = \sum_{i} g_{i} e^{-E/KT} \qquad (I.24)$$

Et en différenciant Z, nous trouvons que :

$$\frac{\partial Z}{\partial T} = \sum_{i} KT^2 E_i e^{-E/KT} \qquad (I.25)$$

Maintenant, l'équation (I.23) devient :

$$\langle E \rangle = KT^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)$$
 (I.26)

L'équation (I.26) relie Z à l'énergie interne du système.

5.2. Capacité calorifique C_v :

De la thermodynamique C_v est défini comme :

$$C_{\nu} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V} \tag{I.27}$$

Donc en substituant E à partir de (I.26) et en simplifiant le différentiel, on obtient :

$$C_{v} = \frac{\partial}{\partial T} \left(KT^{2} \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right)_{V} \qquad (I.28)$$

Finalement :

$$C_{v} = \frac{K}{T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial (\frac{1}{T})^2} \tag{1.29}$$

5.3. Entropie S :

De la thermodynamique, l'entropie est définie comme :

$$S_T - S_0 = \int_0^T \frac{C_v}{T} dT \qquad (I.30)$$

En utilisant(**I.28**) pour C_v en (**I.30**) on obtient :

$$S_T - S_0 = \int_0^T \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial T} \left(KT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right) dT$$
 (1.31)

En le différenciant par parties, il devient :

$$S_T - S_0 = \frac{E}{T} + K \ln Z - |K \ln Z|_{T=0}$$
 (I.32)

Dans l'expression (I.32); comparer le terme indépendant de la température à la constante S_0 qui est l'entropie à t = 0K :

$$S_0 = |K \ln Z|_{T=0}$$
 (I.33)

De (I.32), on obtient ;

$$S_T = \frac{K}{T} + K \ln Z \tag{I.34}$$

Ou

$$S_T = KT\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right) + K\ln Z \qquad (I.35)$$

5.4. Energie libre A :

Énergie libre, a est défini thermodynamiquement par :

$$A = E - TS \tag{I.36}$$

En remplaçant S, il devient :

$$A = E - T\left(\frac{E}{T} + K \ln Z\right)$$
 (I.37)

Nous observons que :

$$A = -KT \ln Z \qquad (I.38)$$

5.5. La pression p :

En terme d'énergie libre A la pression est définie par :

$$\boldsymbol{p} = -\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_T \tag{I.39}$$

En utilisant (I.37) pour A, on obtient :

$$p = KT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_T \tag{I.40}$$

5.6. Potentiel chimique μ_i :

D'après la thermodynamique, le potentiel chimique μ_i de toute composante i est défini par :

$$\mu_i = \left(\frac{\partial A}{\partial n_i}\right)_{V,T,n_i} \tag{I.41}$$

En substituant A à partir de (I.37) :

$$-\frac{\mu_i}{KT} = \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial n_i}\right)_{V,T,n_i} \tag{I.42}$$

Nous avons donc un ensemble complet de fonctions thermodynamiques. Il est utile de mentionner que nous pouvons déterminer théoriquement la valeur de toutes les fonctions thermodynamiques d'équilibre du système à condition que nous puissions évaluer la fonction de partition z.la relation entre z et la fonction thermodynamique sont résumées dans le tableau suivant [6]:

Les fonctions thermodynamiques	Relation thermodynamique statistique
Énergie interne moyenne < E >	$\langle E \rangle = KT^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)$
capacité calorifique C _v	$C_{v} = \frac{K}{T^{2}} \frac{\partial^{2} \ln Z}{\partial (\frac{1}{T})^{2}}$
Entropie S	$S_T = KT\left(rac{\partial \ln Z}{\partial T} ight) + K\ln Z$
Energie libre A	$A = -KT\ln Z$
La pression p	$p = KT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_T$
Potentiel chimique µ _i	$-\frac{\mu_i}{KT} = \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial n_i}\right)_{V,T,n_i}$

Tableau (I.1) : Relation entre la fonction de partition et les grandeurs thermodynamiques.

Ou Z = la fonction de partition pour un system composé de N particules.

$$Z = \sum_{i} g_{i} e^{-E_{i}/KT} \qquad (I.43)$$

 g_i : Dégénérescence d'ième état d'énergie.

 E_i : Énergie d'ième niveau d'énergie.

6. Les trois ensembles statistiques fondamentaux :

Les ensembles statistiques ont été présentés comme de grands ensembles mentaux de systèmes obtenus comme des répliques du système d'intérêt réel. Toutes ces répliques doivent être pensées comme étant préparées avec les mêmes opérations que celles effectivement réalisées pour réaliser le système réel. Il ya plusieurs façons qui peuvent être suivies dans ce processus. Dans le cas le plus simple, nous générons les systèmes avec une énergie bien définie et le nombre de particules. L'ensemble résultant est appelé micro canonique. Son usage est assez limité, puisqu'il correspond à une situation physique rare et difficile à réaliser. Le deuxième cas le plus courant prépare les systèmes à les mettre en contact avec un bain thermique qui ne peut échanger avec le système que toute quantité d'énergie. Cela produit l'ensemble canonique. Le troisième ensemble, appelé grand canonique ou macro canonique, est obtenu en mettant les systèmes en contact avec un réservoir spécial qui peut échanger non seulement de l'énergie, mais aussi des particules. Les fluctuations d'énergie dans les systèmes d'un ensemble canonique et les fluctuations de l'énergie et du nombre de particules dans l'ensemble grand-canonique sont souvent très petites, de sorte que de nombreux résultats statistiques sont indépendants de l'ensemble utilisé **[7].**

6.1. Ensemble Micro canonique :

Dans l'ensemble micro canonique, tous les systèmes ont la même énergie ϵ , et si le système d'intérêt est constitué de particules, tous les systèmes de l'ensemble ont le même nombre de particules. Dans la physique classique, puisque l'énergie est une variable continue, il est plus commode de supposer, sans conséquences pratiques, que les systèmes de l'ensemble ont des énergies contenues dans un intervalle $\delta\epsilon$ Petit en ce qui concerne les variations d'énergie d'intérêt. La probabilité qu'un système de l'ensemble se trouve dans un état particulier est constant pour tous les états avec de l'énergie à l'intérieur de $\delta\epsilon$ Et zéro pour les autres. Si l'on désigne par $\rho(q_i, p_i)$ la densité des points représentant les états de l'ensemble dans l'espace de phase, l'ensemble micro canonique est alors défini par :

$$\rho(q_i, p_i) = \begin{cases} const & si \ \epsilon \le \ \epsilon(q_i, p_i) \le \epsilon + \ \delta \epsilon \\ 0 & autrement \end{cases}$$
(I.44)

Cette densité est fonction de l'énergie seule, il représente un système en équilibre [7].

6.2. Ensemble Canonique :

L'ensemble canonique est utilisé lorsque le système d'intérêt a été mis en contact avec un bain thermique. Par conséquent, tous les systèmes de l'ensemble ont pu échanger avec le réservoir de chaleur n'importe quelle quantité d'énergie. Il est maintenant important de trouver la distribution d'état des systèmes de l'ensemble, c'est-à-dire la probabilité qu'un système de l'ensemble, Une fois déconnecté du bain thermique, se trouve dans un état donné, car ce sera la probabilité que notre système réel puisse être trouvé dans cet état donné. Pour trouver cette probabilité, soit $\Omega^{(s)}(\epsilon_s)$ le nombre d'états accessibles à notre système quand il a une énergie ϵ_s , $\Omega^{(b)}(\epsilon_b)$ le nombre d'états accessibles au bain thermique quand il a énergie ϵ_b . Le nombre d'états $\Omega(\epsilon_s, \epsilon_b)$ accessible au système combiné pour la partition $\epsilon_s + \epsilon_b = \epsilon_0$ de l'énergie totale ϵ_0 est tel que :

$$\ln \Omega(\epsilon_s, \epsilon_b) = \ln \{ \Omega^{(s)}(\epsilon_s) \Omega^{(b)}(\epsilon_b) \} = \ln \Omega^{(s)}(\epsilon_s) + \ln \Omega^{(b)}(\epsilon_b)$$
(I.45)

Maintenant, nous savons que la définition même de bain thermique exige que

 $\epsilon_0 = \epsilon_s + \epsilon_b \gg \epsilon_s$ Afin que nous puissions écrire :

$$ln \Omega^{(b)}(\epsilon_b) = ln \Omega^{(b)}(\epsilon_0) + \frac{\partial}{\partial \epsilon} ln \Omega^{(b)}(\epsilon_0)(\epsilon_b - \epsilon_0)$$
$$= ln \Omega^{(b)}(\epsilon_0) + \beta(\epsilon_b - \epsilon_0) \qquad (I.46)$$

En remplaçant cette expression dans la précédente, nous avons :

$$\ln \Omega(\epsilon_s, \epsilon_b) = \ln \Omega^{(s)}(\epsilon_s) + \ln \Omega^{(b)}(\epsilon_0) - \beta(\epsilon_s)$$
 (I.47)

Ou

$$\Omega(\epsilon_s, \epsilon_b) = \Omega^{(s)}(\epsilon_s)\Omega^{(b)}(\epsilon_0)e^{-\beta\epsilon_s} \qquad (I.48)$$

Ainsi, la probabilité qu'un système dans l'ensemble ait de l'énergie ϵ_s est :

$$P(\epsilon_s) = const \, \Omega^{(s)}(\epsilon_s) e^{-\beta \epsilon_s} \tag{I.49}$$

Notons qu'ici β représente la température du bain thermique.

La probabilité que le système se trouve dans un état spécifique s avec de l'énergie ϵ_s est la probabilité que l'état ait une énergie ϵ_s donnée ci-dessus divisée par le nombre $\Omega^{(s)}(\epsilon_s)$ des états avec cette énergie:

$$P(s) \propto e^{-\beta \epsilon_s}$$

Ou

$$P(s) = \frac{1}{z} e^{-\beta \epsilon_s} , Z = \sum_s e^{-\beta \epsilon_s}$$
 (I.50)

C'est ce qu'on appelle la distribution canonique, et Z est la fonction de partition, telle $que \sum_{s} P(s) = 1$ [7].

6.3. Ensemble grand canonique :

L'ensemble grand canonique est spécifique aux systèmes composés de particules et est considéré lorsque le système peut échanger, avec le réservoir de chaleur, non seulement l'énergie, mais aussi n'importe quel nombre de particules. Dans le système combiné, le nombre total de particules est constant, de même que l'énergie. Supposons, pour simplifier, qu'il n'y ait qu'un seul type de particules. Nous avons déjà vu que la situation la plus probable après contact est que le système d'intérêt a la même température et le même potentiel chimique que le bain thermique. Mais maintenant notre but est de trouver la probabilité que le système se trouve dans un état s avec de l'énergie ϵ_s et de particules n_s .

Par analogie avec le cas canonique, on suppose que l'énergie b du bain thermique et son nombre de particules n_b sont beaucoup plus grandes que les mêmes quantités du système d'intérêt:

$$\epsilon_t = \epsilon_b + \epsilon_s \gg \epsilon_s, \quad n_t = n_b + n_s \gg n_s$$

Ainsi :

$$\ln \Omega^{(b)}(\epsilon_{b}, n_{b}) = \ln \Omega^{(b)}(\epsilon_{t}, n_{t}) + \frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln \Omega^{(b)}(\epsilon_{t}, n_{t})(\epsilon_{b} - \epsilon_{t}) + \frac{\partial}{\partial n} \ln \Omega^{(b)}(\epsilon_{t}, n_{t})(n_{b} - n_{t})$$
(I.51)

Où:

$$\ln \Omega^{(b)}(\epsilon_b, n_b) = \ln \Omega^{(b)}(\epsilon_t, n_t) + \beta_b(\epsilon_b - \epsilon_t) - \beta_b \mu_b(\epsilon_t, n_t)(n_b - n_t)$$
(I.52)

Remplacer ceci dans (I.17):

$$\ln \Omega(\epsilon_s, n_s) = \ln \Omega^{(s)}(\epsilon_s, n_s) + \ln \Omega^{(b)}(\epsilon_t, n_t) - \beta_b \epsilon_s + \beta_b \mu_b n_s$$
$$\Rightarrow \Omega(\epsilon_s, n_s) = \Omega^{(s)}(\epsilon_s, n_s) const \ e^{\beta_b(-\epsilon_s + \mu_b n_s)}$$
(I.53)

En conclusion,

$$P(\epsilon_s, n_s) \propto \Omega^{(s)}(\epsilon_s, n_s) e^{-\beta(\epsilon_s - \mu n_s)}$$
(I.54)

Où l'étiquette "b" a été abandonnée, étant clair la signification de l'équation. La probabilité que le système d'intérêt se trouve dans un état s avec n particules et énergie ϵ . Est donnée par la distribution grand-canonique.

$$P(s) = \frac{1}{z} e^{-\beta(\epsilon_s - \mu n_s)}, Z = \sum_s e^{-\beta(\epsilon_s - \mu n_s)}$$
(I.55)

Si plusieurs types de particules sont présents avec $n^{(i)}$ particules et potentiels chimiques $\mu^{(i)}$, le résultat est le même avec la substitution de μn_s à la somme des produits $\mu^{(i)}n^{(i)}$ [7].

7. Grandeurs relatives au champ magnétique :

Les propriétés magnétiques des matériaux jouent un rôle important dan les machines et les appareils électriques comme les moteurs, les transformateurs. Leur rôle est prépondérant dans le stockage de l'information qui se fait par l'intermédiaire d'un substrat doté de propriétés magnétiques spécifiques. Dans cette section, nous donnerons un aperçu des principales propriétés magnétiques des matériaux **[8]**.

Sous l'effet d'un *champ magnétique extérieur H*, il se crée dans les matériaux un *champ d'induction magnétique B* dont la valeur est donnée par:

$$B = \mu H \tag{I.56}$$

Où μ est une constante de proportionnalité appelée *perméabilité magnétique*. L'unité d'induction magnétique est le *tesla* (T). Le champ magnétique *H*, qui est en général créé par

la circulation d'un courant électrique dans un solénoïde, s'exprime en ampère par mètre $(A m^{-1})$ et la perméabilité magnétique en henry par mètre $(H m^{-1})$.

On utilise souvent, pour caractériser le comportement magnétique des matériaux, la *perméabilité relative* μ_r :

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \tag{I.57}$$

Où μ_0 est la *perméabilité magnétique du vide*($\mu_0 = 4 \pi 10^{-7} H m^{-1}$). En l'absence de matière, la valeur de l'induction magnétique B_0 est donnée par:

$$B_0 = \mu_0 H \tag{I.58}$$

L'induction magnétique dans la matière peut également être exprimée par :

$$B = \mu_0(H + M) \tag{I.59}$$

M Est la vectrice *aimantation*. Il représente le champ magnétique local induit par le champ magnétique extérieur H. La vectrice aimantation M est directement proportionnel à H et on peut écrire que:

$$M = \chi_r H \tag{I.60}$$

Et

$$B = \mu_0 H (1 + \chi_r) \tag{I.61}$$

En comparant **(I.56)** et **(I.60)** on obtient, pour la perméabilité magnétique, l'expression suivante:

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0 (1 + \boldsymbol{\chi}_r) \tag{I.62}$$

Où χ_r représente la susceptibilité magnétique relative. Cette grandeur, qui est sans dimension, est reliée à la perméabilité relative μ_r par:

$$\mu_r = 1 + \chi_r \tag{I.62}$$

8. Les types de magnétismes :

Sur la base de comportement magnétique, on peut diviser les matériaux en cinq types tels que se présente les déférents types de magnétismes.

8.1. Le diamagnétisme :

Le diamagnétisme caractérise des substances qui n'ont que des atomes non magnétiques: leur aimantation induite par le champ, est très faible et est opposée à la direction du champ. La susceptibilité pratiquement indépendante du champ et de la température est négative et est ordinairement de l'ordre 10^{-5} , ce magnétisme provient du changement du mouvement orbital électronique sous l'effet du champ magnétique appliqué. Selon la loi de Lenz, les courants induits donnent naissance à un flux d'induction opposé au changement dans le champ appliqué Ce magnétisme existe aussi dans les substances à atomes magnétiques, mais il est si faible qu'il est alors complètement masqué par la contribution de ces atomes magnétiques. Cependant, un diamagnétisme très fort est présent dans les substances supraconductrices, avec une susceptibilité égale a -1[9].



La figure (I.1) : (a) dépendance sur le champ de l'aimantation et variation thermique de la susceptibilité magnétique ; (b) pour des substances diamagnétiques

matière	susceptibilité
Si	- 1,2* 10 ⁻⁶
Cu	- 1,08 *10 ⁻⁶
Zn	- 1,9 [*] 10 ⁻⁶
Ge	- 1,5 *10 ⁻⁶

Tableau(I.2) : quelque composante et la valeur de susceptibilité correspond pour le diamagnétisme.

8.2. Le paramagnétisme :

Dans un grand nombre de cas, le magnétisme des substances paramagnétiques provient du moment magnétique permanent d'une partie ou de la totalité des atomes ou des ions constitutifs. Si ces moments ont une interaction négligeable les uns avec les autres et peuvent les orienter librement dans n'importe quelle direction, on appelle cela le paramagnétisme des atomes libres.

En appliquant un champ magnétique, la direction moyenne des mouvements est modifiée et une aimantation induite est parallèle au champ. Cette aimantation est inférieure à la hauteur, la susceptibilité au champ est positive, devient infinie à 0, cette susceptibilité est généralement de L'ordre 10^{-3} à 10^{-5} à température ambiante [9].



Figure (I.2) : le comportement paramagnétisme.

matière	susceptibilité
Na	8 ,6* 10 ⁻⁶
Al	7,7 [*] 10 ⁻⁶
Mn	1,2 *10 ⁻⁴
Та	1,1 *10 -4

Tableau(I.3) : quelque composante et la valeur de susceptibilité correspond pour le paramagnétisme.





8.3. L'antiferromagnétisme :

L'antiferromagnétisme, macroscopiquement semblable au paramagnétisme, est une forme faible de magnétisme, à savoir une susceptibilité faible et positive. Cependant, la variation thermique de la susceptibilité réciproque, mesurée sur un échantillon poly cristallin, présente un minimum à la température de Néel T_N . Maximum dans la susceptibilité provient de l'apparition, en dessous T_N , d'un arrachement antiparallèle du moment magnétique. Ces derniers se répartissent, dans les cas les plus simples, en deux sous-ensembles, avec leur aimantation égale et opposée, de telle manière qu'en l'absence du champ magnétique, l'aimantation résultante est nulle. Un assez grand nombre d'oxydes, de chlorures et autres composés des métaux de transition sont antiferromagnétiques.

C'est le cas le plus simple d'un matériau antiferromagnétique, constitué de deux sousensembles antiparallèles **[9]**.



La figure (I.3): le comportement d'antiferromagnétisme.

8.4. Le ferromagnétisme :

Contrairement au cas susmentionné, les interactions d'échange positives favorisent, dans les substances ferromagnétiques, un arrangement parallèle du moment magnétique dans les atomes voisins. L'effet est alors le même que celui d'un champ magnétique, appelé champ moléculaire ou d'échange, qui alignerait Comme pour un antiferromagnétisme, à haute température, l'agitation thermique conduit à une susceptibilité qui est semblable à celle d'un paramagnétisme. Au contraire, un compte de l'interaction magnétique, la susceptibilité au lieu d'être infini à 0 comme dans un paramagnétisme devient infinie à un température caractéristique, appelée température de Curie, est inférieure à cette température, l'interaction surmonte l'agitation thermique et une aimantation spontanée M_s apparaît en l'absence de champ magnétique appliqué. Cette aimantation spontanée atteint sa valeur maximale M_0 , à 0 correspondant à Parallélisme de tout le moment individuel **[9].**



La figure (I.4) : le comportement ferromagnétique.

Chapitre I : Fondement de la physique statistique

Le fer, le cobalt, le nickel et un certain nombre de leurs alliages sont ferromagnétiques. Quelques terres rares, et certains alliages de manganèse avec l'aluminium et le cuivre le sont aussi.

8.5. Le ferrimagnétisme :

Le ferrimagnétisme correspond à un arrangement partiellement antiparallèle des moments magnétiques **[10]** :



La figure (I.5) : Arrangement des moments magnétiques dans un matériau *ferrimagnétique*.
Les références bibliographiques

 [1] JACOBONI, Carlo. Theory of Electron Transport in Semiconductors: A Pathway from Elementary Physics to Nonequilibrium Green Functions. Springer Science & Business Media, 2010.

[2] NGÔ, Christian et NGÔ, Hélène. Physique statistique-3ème édition. Dunod, 2008.

[3] Claudine Hermann, *Physique statistique et illustration en physique du solide*, les éditions de l'école polytechnique, Mars(2003).

[4] Boudefla Rania, *Etude numérique du modèle Ashkin Teller*, Thèse de doctorat, Université Abou Bakr Balkaid, Tlemcen (2015).

[5] JACOBONI, Carlo. Theory of Electron Transport in Semiconductors: A Pathway from Elementary Physics to Nonequilibrium Green Functions. Springer Science & Business Media, 2010.

[6] M.C.GU PTA, Statical thermodynamics, second édition, (2003).

[7] JACOBONI, Carlo. Theory of Electron Transport in Semiconductors: A Pathway from Elementary Physics to Nonequilibrium Green Functions. Springer Science & Business Media, 2010.

[8] Mercier, Jean P., Gérald Zambelli, and Wilfried Kurz. Introduction à la science des *matériaux*. Vol. 1. PPUR presses polytechniques, 1999.

[9] LACHEISSERIE, EdTd, GIGNOUX, Damien, et SCHLENKER, Michel. Magnetism: fundamentals. 2005.

[10] Boudefla Rania, *Etude numérique du modèle Ashkin Teller*, thèse doctorat, université Abou Bakr Balkaid, Tlemcen (2015).

Les transitions de phase

1. Introduction sur les transitions de phase :

Il est usuel de considérer les trois états de la matière : gaz, liquide et solide sans toutefois, toujours préciser que dans le cas de ce dernier, il faut généralement entendre solide cristallin.la figure (II-1) indique alors les différents changements de phase que l'on peut observer [1].

Nous appellerons phase tous domaine de matière homogène limitée par une surface et présentant une composition, une organisation atomique et des propriétés bien définie.une transformation de phases correspond au passage d'un système initialement sous forme de phase A, vers l'état B ; on préférera plutôt l'appellation transition de phase quand seule une propriété diffère entre phase initiale et phase finale, la composition et l'organisation atomique restant identique **[1]**.



La figure (II.1): Schéma relative au divers changement de phase présenter les trios états de la matière.

Prenons 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 [2]:

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

Ce qui caractérise ces transitions, c'est le changement qualitatif, la discontinuité des propriétés : une petite variation d'un paramètre (température, pression ...) déclenche une modification qualitative spectaculaire [2].

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

Pour fixer quelques idées, considérons trois diagrammes de phases particuliers [2] :



La figure (II.2) : 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) est le 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.

Un autre exemple très connu de transition de phase est observé dans les matériaux ferromagnétiques. Ceux-ci présentent une aimantation permanente en l'absence de champ magnétique extérieur. Ils constituent, par exemple, les aimants que l'on peut trouver dans de nombreux dispositifs, notamment les boussoles. Le ferromagnétisme s'observe pour certains métaux de transition, comme le fer, le cobalt ou le nickel. Il est lié à un comportement coopératif des spins des atomes. Cela signifie qu'un nombre non négligeable d'électrons d'une couche incomplète ont leur spin qui s'aligne dans une même direction. On constate, expérimentalement, que si l'on chauffe un matériau ferromagnétique au dessus d'une certaine température, appelée température de Curie1, le ferromagnétisme disparaît pour faire place au paramagnétisme. Ceci provient de ce que l'interaction qui tend à aligner les spins ne peut plus lutter contre l'agitation thermique qui tend au contraire à leur donner une orientation aléatoire [3].



La figure (II.3) : Diagramme (champ magnétique, température) pour un corps qui présente une transition ferromagnétique.

Ce diagramme présente une frontière sur l'axe H = 0 avec un point d'arrêt, qu'on appelle aussi point critique. On observe à haute température une phase désordonnée, dite paramagnétique sans aimantation [4].

Lorsque T = Tc, au point critique, une transition se produit, et pour T < Tc, 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 si on traverse la frontière (H = 0, 0 < T < Tc), 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.



La figure (II.4) : courbe d'aimantation M(H) pour un ferromagnétique à différentes températures pour T < Tc.

Autre cas, on a une transitions antiferromagnétique leur diagramme est un diagramme (champ magnétique, température) mais pour un corps qui présente une transition antiferromagnétique (avec une aimantation alternée dans la phase ordonnée).



La figure (II.5) : diagramme de phase montre un point tri critique pour un matériau antiferromagnétique.

On observe sur ce diagramme deux domaines séparés par une ligne (une partie en trait gras, l'autre en trait fin) : quand on franchit la partie grasse, on observe un saut de l'aimantation alternée ; quand on franchit la ligne fine, il n'y a pas de saut. Cette dernière ligne est une ligne de points critiques (puisqu'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 tri critique **[4].**

2. La classification de la transition de phase :

On peut dire qu'il existe deux types de transitions de phases : les transitions avec chaleur latente d'une part, les transitions sans chaleur latente d'autre part. C'est une classification de nature thermodynamique **[5]**.

P. Ehrenfest en 1933 a proposé de distinguer :

 Les transitions du premier ordre qui s'accompagnent de discontinuités de grandeurs thermodynamiques, comme l'entropie et la densité, elles-mêmes associées à des dérivées premières de potentielles thermodynamiques. On a ainsi, par exemple,

$$S = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P \tag{II.1}$$

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T \tag{II.2}$$

À la transition de phase, ces grandeurs correspondant à des dérivées du premier ordre du potentiel G sont discontinues (la chaleur latente est associée à la discontinuité de l'entropie) [6].

 Les transitions du second ordre pour lesquelles les potentielles thermodynamiques et leurs dérivées du premier ordre sont continus alors que certaines dérivées secondes par rapport à des variables d'état s'annulent ou tendent vers l'infini de façon asymptotique au point de transition. Ainsi peuton écrire :

$$\frac{C_P}{T} = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_P = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P \tag{II.3}$$

$$K_P V = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right)_P = -\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \qquad (II.4)$$

 C_P Et K_P sont respectivement la chaleur spécifique et la compressibilité à pression constante. On constate effectivement que ces grandeurs thermodynamiques tendent vers l'infini au point critique liquide/gaz ou au point de transition superfluide dans l'hélium liquide. [5]

Pour ces transitions on passe continûment d'une phase à une autre sans que l'on puisse parler réellement de coexistence des deux phases : au point critique liquide/gaz, on ne peut plus distinguer la phase liquide de la phase gazeuse (leurs densités sont strictement égales) [5].

Ces comportements thermodynamiques très différents peuvent être mis en évidence expérimentalement en étudiant directement ou indirectement le comportement thermodynamique de grandeurs physiques caractéristiques au voisinage de la transition (densité, chaleur latente, etc.). L'absence d'une chaleur latente à la transition est un bon critère discriminant qui permet de la classer comme une transition du second ordre (ou encore d'ordre supérieur) **[5].**

On peut étendre cette classification à l'aide des définitions proposées initialement par Ehrenfest aux transitions de phases d'ordre supérieur au second que l'on appelle, en général, transitions multicritiques. Celles-ci seront caractérisées de la façon suivante :

- les potentiels thermodynamiques sont continus au point de transition ;

- certaines dérivées secondes et d'ordre supérieur des potentielles thermodynamiques par rapport aux variables d'état s'annulent au point de transition **[5]**.

Plus généralement, on appellera point critique d'ordre p, un point où p phases deviennent identiques. Nous avons montré en utilisant la règle des phases que le système devait posséder au minimum 2p-3 composants pour que l'on puisse observer un point multicritique d'ordre p [5].

Si la classification d'Ehrenfest des transitions de phases a le grand mérite de mettre en évidence les similitudes entre des phénomènes aussi différents que le magnétisme, la ferroélectricité, la supraconductivité et la transition liquide/gaz au point critique, elle se limite cependant à une vision thermodynamique des phénomènes. Si celle-ci est incontestablement importante, elle n'est toutefois pas suffisante **[5]**.



La figure (II.6) : Transitions du premier ordre. Les potentiels comme G sont continus à la transition, mais les dérivées premières et les grandeurs associées (V et S) sont discontinues.



La figure (II.7) : Transitions du deuxième ordre, les dérivées premières de G sont continues, mais certaines dérivées seconde divergent : Cp, par exemple, tend vers l'infini.

En 1937, L. Landau a proposé une autre classification des transitions de phase particulièrement adaptée pour celles que nous avons qualifié de continues. Elle est basée sur le fait que ce type de transition s'accompagne d'un changement du système [6].

C'est le cas, par exemple, de la transition ferromagnétique-paramagnétique puisqu'un système ferromagnétique (un des type de magnétisme qui présente en chapitre I) a une direction privilégiée dans l'espace (celle de l'aimantation du système) alors que la phase paramagnétique est isotrope. Ceci a conduit Landau à introduire la notion de paramètre d'ordre. C'est une grandeur qui est nulle dans la phase la plus symétrique et différente de zéro dans l'autre .En général, la phase la plus symétrique se trouve à haute température [6].

Certaines transitions se font sans changement de symétrie et, en principe, il n'est pas possible de définir un paramètre d'ordre au sens de Landau. C'est par exemple le cas de la transition liquide-gaz puisque le liquide et le gaz ont le même type de symétrie : ils sont isotropes. Néanmoins, même pour ces systèmes, il est d'usage de définir un paramètre d'ordre qui s'annule à haute température **[6]**.

Dans la classification proposée par Landau, une transition de phase du premier ordre se traduit par un saut du paramètre d'ordre (discontinuité) alors que les transitions d'ordre supérieur (dites aussi continues) correspondent à des discontinuités des dérivées des fonctions thermodynamiques. Dans ce dernier cas elles peuvent être du deuxième ordre si la dérivée seconde est discontinue, du troisième ordre si c'est la dérivée du troisième ordre, etc. On qualifie ces transitions de phase de transitions continues ou de phénomènes critiques **[6]**.

Dans un système pour lequel il existe une transition de phase, il y a compétition, dans la fonction thermodynamique qui le caractérise, entre l'énergie interne qui a tendance à favoriser l'ordre et l'entropie qui favorise au contraire le désordre. S'il n'existe pas de couplage exotique entre les degrés de liberté du système, la phase désordonnée est généralement observée à haute température **[6]**.



La figure (II.8) : transition de phase du 1^{er} et 2^{em} ordre selon landau [7].

On dit que la symétrie a été brisée à la transition : en dessous de la température de Curie, le matériau n'est invariant que par rotation autour d'un axe orienté dans la direction de l'aimantation.

3. Paramètre d'ordre :

Le paramètre d'ordre est, de façon générale, une grandeur physique de caractère extensif qui est nulle dans la phase la plus symétrique (ou la plus désordonnée), et non nulle dans la phase la moins symétrique (ou ordonnée). Cette notion de paramètre d'ordre a une signification qualitative évidente : lors d'un abaissement de la température, on accroît l'ordre d'un système. Lorsque l'on refroidit un liquide, on le solidifie en traversant le point de solidification (le solide cristallin est plus ordonné que le liquide). De même, si on refroidit un matériau ferromagnétique en dessous de son point de Curie on augmente l'ordre magnétique dans le système (une aimantation macroscopique apparaît ce qui traduit l'existence d'un ordre magnétique) **[8].**

Ainsi dans le cas du magnétisme, le paramètre d'ordre est l'aimantation, dans le cas de la ferroélectricité c'est la polarisation électrique. Le choix du paramètre d'ordre, comme nous le verrons ultérieurement, n'est pas toujours évident. Par exemple, dans le cas de la superfluidité et de la supraconductivité, le paramètre d'ordre est la fonction d'onde de la phase superfluide et des électrons associés à la supraconductivité. À l'aide de cette notion de paramètre d'ordre, on peut ainsi distinguer deux types de transitions **[8]**:

- les transitions sans paramètre d'ordre pour lesquelles les groupes de symétrie des deux phases sont tels qu'aucun n'est strictement inclus dans l'autre : elles sont toujours du premier ordre (avec chaleur latente) au sens d'Ehrenfest ;

- les transitions pour lesquelles on peut définir un paramètre d'ordre, et qui sont telles que le groupe de symétrie de la phase la moins symétrique est un sous-groupe du groupe de symétrie de la phase la plus symétrique. Si le paramètre d'ordre est discontinu à la transition, celle-ci est du premier ordre au sens d'Ehrenfest ; si celui-ci est continu à la transition, celle-ci est du second ordre (sans chaleur latente).

De façon plus générale, on définit d'une part des transitions du premier ordre associées à l'existence d'une chaleur latente et d'autre part, toutes les autres transitions que l'on considère comme continues. Cette dernière catégorie inclut en particulier les phénomènes multicritiques (transitions d'ordre supérieur à deux au sens d'Ehrenfest) **[8].**

On représente quelque paramètre d'ordre *P* pour déférent transition de phase [9] :

Nature de la transition	Paramètre d'ordre P	Variable
		Thermodynamique
		conjuguée
Liquide-Gaz	$ ho_L - ho_g $	μ
Ferromagnétique-		
Paramagnétique	Aimantation <i>M</i>	Champ magnétique H
Antiferromagnétique-	Aimantation de sous	
Paramagnétique	Réseau M_1 et M_2	N'a pas de sens physique
Ferroélectrique-Para		Champ électrique E
électrique	Polarisation électrique P	
Ordres - Désordres dans	Différence de probabilités	Différence de potentiel
les alliages	d'occupations de deux	chimique
	sites	
Supraconductivité	Gap supraconducteur Δ	N'a pas de sens physique
Superfluidité	Fonction d'onde de la phase superfluide	N'a pas de sens physique

Tableau (II.1) : paramètre d'ordre pour chaque transition de phase

4. Le modèle d'Ising :

La description théorique des transitions de phase est très compliquée. On ne peut traiter que quelque modèle dans le cadre de la mécanique statistique. Un de ces modèles est du à Lenz(1920) et fut traiter en détails plus tard par son élève Ising (1925).

Au départ, il fut inventée pour les transitions de phase dans les substances ferromagnétique à la température de Curie ; cependant avec le temps on s'aperçu qu'avec seulement quelque légers changement le modèle pouvait être appliquée à d'autre transition de phase, comme les transitions ordre-désordre dans les alliages binaire.

De plus, le modèle pouvait s'appliquée à de nombreux problèmes modernes en physique des particules, par exemple pour décrire ce que l'on nomme les verres de spins. Il existe des métaux qui ont des structures amorphes et non cristallines, possédant la propriété intéressante d'avoir une entropie non nulle à T=0.

Récemment, on s'est aperçu que les idées d'Ising pouvait expliquée la reconnaissance des formes dans les réseaux de neurones schématique, ce modèle prend donc de plus d'importance pour le développement des modèles du cerveau humain [11].

Nous n'avons considéré que des systèmes thermodynamiques dont la dynamique microscopiques est continuent. Il y a tout un ensemble de systèmes dans lesquels la dynamique microscopique est ou peut être traitée comme discrète. Le modèle d'Ising est un exemple de systèmes dans lesquels la dynamique microscopique est intrinsèquement discrète. C'est un modèle de ferromagnétisme, dans lequel les variables discrètes représentent les dipôles magnétiques des spins atomiques disposés sur un treillis [**12**].

Chaque spin est autorisé à interagir seulement avec ses voisins, mais là encore il ya des variations de modèle, dans lequel les interactions se décomposent plus lentement. Le modèle Ising bidimensionnel est l'un des modèles les plus simples de la mécanique statistique dans lequel une transition de phase est présente. Les statistiques du modèle d'Ising sont décrites par l'Hamiltonien : **[12]**

$$\mathcal{H}[\sigma] = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu H \sum_i \sigma_i \qquad (II.5)$$

Où $\sigma_i = \pm 1$, est la variable de spin dans le site *i*, la notation $\langle i, j \rangle$ indique que la somme est effectuée uniquement sur les voisins les plus proches, et nous avons admis la possibilité d'interaction avec un champ magnétique externe uniforme *H*, μ indiquant le moment magnétique électronique. Nous remarquons que $\mathcal{H}[\sigma]$ est un

hamiltonien purement statique, sans variables pouvant être interprétées comme une vitesse.

Connaissant le Hamiltonian $\mathcal{H}[\sigma]$, le formalisme canonique peut être appliqué pour obtenir la distribution des états du système dans un bain thermique à température T:

$$\rho[\sigma] = \frac{1}{z} exp\left(-\frac{\mathcal{H}[\sigma]}{\sigma}\right) \tag{II.6}$$

$$Z = \sum_{\sigma} \rho[\sigma] \tag{II.7}$$

Où $\sum_{\sigma} \equiv \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots$ Indique la somme de toutes les configurations de spin sur le réseau. Nous pouvons obtenir la distribution des énergies $\mathcal{H}[\sigma] = E$.

$$\rho(E) = \frac{1}{Z\Delta E} exp\left(\frac{TS(E) - E}{T}\right)$$
(II.8)

L'équilibre thermique correspond au minimum par rapport à E de l'énergie libre.

Nous considérons un réseau cubique, de sorte que $i = (i_x, i_y, i_z)$ détermine la coordonnée du site $x_i = (i_x \Delta, i_y \Delta, i_z \Delta)$ avec Δ La constante du réseau. Pour un réseau cubique, Les voisins les plus proches du site *i* seront :

$$j = (i_x \pm 1, i_y, i_z), (i_x, i_y \pm 1, i_z), (i_x, i_y, i_z \pm 1)$$
(II.9)

En l'absence de champ magnétique externe, on voit que, pour J > 0, une configuration avec tous les spins ayant le signe identique est favorisé énergétiquement, tandis que, pour J <0, Le contraire se produit. La première condition décrit le comportement d'un matériau ferromagnétique. La seconde, celle d'un matériau antiferromagnétique: l'état d'énergie la plus basse est celle dans laquelle les spins adjacents ont un signe opposé [12].

On sait que les matériaux ferromagnétiques subissent une transition de phase du second ordre à une température critique T_c , appelée température de Curie, au-dessus de laquelle le matériau devient paramagnétique.

Apres que le modèle d'Ising fut mieux confirmé, des chercheures essayèrent plus intensivement de résoudre ce modèle pour des réseaux avec des nombres de coordination plus élevée.

En 1936, Peierle put montrer que le modèle d'Ising révélait des propriétés ferromagnétiques à basse température pour des dimensions plus élevée, alors que ces propriétés disparaissent dans le cas unidimensionnel même pour des températures arbitrairement basses.

Par la suite Kramers et Wannier développèrent une méthode élégante pour résoudre le modèle d'Ising (1941), qui leur permit également d'obtenir quelque résultat initiaux dans le cas bidimensionnel, Onsager de calculer la fonction de partition exacte du modèle d'Ising à deux dimension en l'absence de champ magnétique extérieure [13].

• Le cas de 1D :

Dans ce cas, nous envisageons une ligne de spins soit vers le haut ou vers le bas. Il présente un problème très simple et peut être résolu exactement. Mais, bien que sa solution soit d'une importance pédagogique considérable, le modèle n'exhibe pas un changement de phase [14].



La figure (II.9) : model d'Ising à une dimension

• Le cas de 2D :

En deux dimensions, le modèle d'Ising peut être considéré comme un réseau de spins sur un réseau carré, chaque site de réseau ayant un vecteur de spin associé vers le haut ou vers le bas à angle droit par rapport au plan du réseau. Ce modèle est plus réaliste dans la mesure où une transition de phase apparaît dans la limite thermodynamique. Il a été résolu exactement par Onsager (1944) et ce travail est encore considéré comme un tour de force théorique [14].



La figure (II.10) : model d'Ising en deux dimensions

• Le cas de dimension supérieur ou égale au 3 :

Ces cas sont plus difficiles à dessiner mais au moins le problème en trois dimensions est facilement visualisé. On imagine simplement un réseau cubique avec les trois directions de coordonnées principales correspondant aux axes de coordonnées cartésiennes x, y et z. Nous supposons alors que les vecteurs de spin unité à chaque site de réseau peuvent pointer dans la direction de $(\pm z)$. Le modèle d'Ising pour $d \ge$ 3 ne peut pas être résolu exactement, mais ils peuvent être traités numériquement, et la simulation numérique des modèles d'Ising est un domaine très actif de la physique statistique. Il s'avère que la théorie du champ moyen donne une approximation raisonnable de la fonction de partition pour d = 3 et une très bonne approximation pour $d \ge 4$ [14].

5. La théorie de Landau :

La théorie proposée par Landau permet d'appréhender l'essentiel des idées physiques relatives aux transitions de phase continues. L'idée est de supposer que l'énergie libre du système peut être développée comme une série convergente du paramètre d'ordre *m*. Dans ce développement, seuls les termes ayant une symétrie compatible avec celle du système sont retenus **[3]**.

Système homogène :

Nous allons illustrer le principe de cette méthode, ainsi que certaines de ses conséquences, sur la transition ferromagnétique-paramagnétique à champ nul (B = 0). Nous supposerons que le système est homogène. Dans ce cas, l'énergie libre (je l'ai mentionné en chapitre I) du système peut s'écrire sous la forme :

$$F(m,T) = F_0(T) + a_2m^2 + a_4m^4 + \mathcal{O}(m^4)$$
 (II.10)

Ce système fait de changement de *m* en -m, donc on a des termes paires et la magnétisation est une quantité bornée ceci implique que $a_4 > 0$. Alors F_0 dépend de *T*.

Dans l'expression (II.10), on suppose que la magnétisation est un scalaire alors que, pour un système réel, c'est un vecteur. Le passage d'un scalaire à un vecteur ne pose pas de problème de principe mais alourdirait la discussion. Ce que nous allons décrire s'applique tout à fait au modèle d'Ising bidimensionnel dans lequel m est un scalaire qui peut être positif ou négatif **[3]**.

On trace la quantité $F - F_0$ en fonction de *m*. on obtient, selon la valeur de a_2 , des courbes qui appartiennent à des familles différentes la figure suivant :



La figure (II.11) : différent courbe représente la variation de l'énergie $(F - F_0)$ en fonction du paramètre d'ordre m

La courbe (a): lorsque $a_2 > 0$, la quantité $F - F_0$ a un minimum pour m = 0. Le système est donc paramagnétique. Ce comportement est observé lorsque T > Tc.

La courbe (b) : $poura_2 < 0$, on observe deux minimum $enm = \pm m_0 \neq 0$. Une telle situation décrit une phase ferromagnétique. L'existence de deux états stables ($m = \pm m_0$) pour l'énergie libre résulte de la symétrie du problème. Physiquement, cela signifie que deux phases de magnétisation opposée coexistent. Une telle situation est observée lorsque T < Tc.

La courbe (c) : le cas $a_2 = 0$ correspond au point critique (T = Tc). On observe une courbe très plate au voisinage du minimum. C'est au point critique qu'une magnétisation spontanée du système apparaît.

La courbe (d) : représente $F - F_0$ en un point légèrement au dessous de la température critique ($a_2 \approx 0$ mais négatif) [3].

La théorie de Landau permet d'étudier le système au voisinage de point critique telle que a_2 dépend de la quantité $T - T_C$, et a_2 change de signe aux niveaux de la température critique $T = T_C$; ce qui va induire deux types de comportement.

On pose :

$$a_2 = \widetilde{a}_2 t \quad ou \quad \widetilde{a}_2 > 0 \quad et \qquad t = \frac{T - T_c}{T_c}$$
 (II.11)

À l'équilibre, en déduire la valeur du paramètre m tant que l'énergie libre est minimum :

$$\frac{dF(m,T)}{dM} = 2\tilde{a}_2 tm + 4a_4 m^3 = 0$$
 (II.12)

$$\implies \qquad m^2 = -\left(\frac{\tilde{a}_2 t}{2a_4}\right) \qquad (II.13)$$

Pourt < 0, l'équation (2.12) n'a de racine réelles que : $m \sim (-t)^{1/2} \implies \beta^* = \frac{1}{2}$

Au voisinage du point critique, on peut écrire (II.10) comme :

$$F(m,T) = F_0 T - \frac{\tilde{a}_2^2 t^2}{4a_4} + \mathcal{O}(t^3) \qquad t < 0 \qquad (II.14)$$

Pour t > 0, le paramètre d'ordre m et nul et $F(m, T) = F(0, T) = F_0(T)$

On peut déterminer l'entropie du système :

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V} = S_{0}T + \frac{\tilde{a}_{2}t}{2a_{4}}$$
(II.15)

Si l'entropie est continue au passage du point critique, c'est implique qu'il n'ya pas de chaleur latente et que la transition de phase est continue.

Et la chaleur spécifique est donnée par :

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = C_0(T) + \frac{\tilde{a}_2}{2a_4}T \qquad (II.16)$$

La théorie de Landau conduit à une discontinuité de la chaleur spécifique au point critique, comme les transitions de phase continue, liquide-gaz, superfluide, supraconductrice et ferromagnétique.

La théorie de Ginsburg et Landau :

Pour un système hétérogène, le paramètre d'ordre dépend généralement de la position (m = m(r)). Il faut alors introduire la densité locale d'énergie libre f(m, T) qui est reliée à l'énergie libre du système total par :

$$F(m,T) = \int f(m,T)dr \qquad (II.17)$$

On applique le théorie de Landau, on obtient la fonction :

$$f(m,T) = f_0(T) + \tilde{a}_2^2 t^2 m^2 + a_4 m^4 + \gamma |\nabla m|^2 \qquad (II.18)$$

Le dernier terme du développement est introduit à cause de la dépendance en r de m. Le raisonnement est par la suite analogue à celui que nous avons tenu plus haut et conduit au même type de résultat [3].

Les références bibliographiques

[1] PEREZ, Jo. *Matériaux non cristallins et science du désordre*. PPUR presses polytechniques, 2001.

[2] HÉRITIER, Michel. Mécanique statistique et transitions de phase. 2006.

[3] NGÔ, Christian et NGÔ, Hélène. Physique statistique-3ème édition. Dunod, 2008.

[4] HÉRITIER, Michel. Mécanique statistique et transitions de phase. 2006.

[5] PAPON, Pierre, LEBLOND, Jacques, et MEIJER, Paul HE. *Physique des transitions de phases: Concepts et applications*. Paris : Dunod, 1999.

[6] NGÔ, Christian et NGÔ, Hélène. Physique statistique-3ème édition. Dunod, 2008.

[7] HÉRITIER, Michel. Mécanique statistique et transitions de phase. 2006.

[8] PAPON, Pierre, LEBLOND, Jacques, et MEIJER, Paul HE. Physique des transitions de phases: Concepts et applications. Paris : Dunod, 1999.

[9] Boudefla Rania, *Etude numérique du modèle Ashkin Teller*, thèse doctorat, université Abou Bakr Balkaid, Tlemcen (2015).

[11] GREINER, Walter, NEISE, Ludwig, ET STÖCKER, Horst.

Thermodynamique et mécanique statistique. Springer Science & Business Media, 1999.

[12] OLLA, Piero. *An Introduction to Thermodynamics and Statistical Physics.* Springer International Publishing, 2015.

[13] GREINER, Walter, NEISE, Ludwig, ET STÖCKER, Horst.

Thermodynamique et mécanique statistique. Springer Science & Business Media, 1999.

[14] Mc.COMB, W. David. *Study notes for Statistical Physics*: A concise, unified overview of the subject-eBooks and textbooks from bookboon. com. 2015.

Etude de modèle Ashkin-Teller à spins mélangés (1,3/2)

Parmi les modèles de physique statistique, dans ce chapitre on constate le modèle très connue c'est le modèle d'Ashkin-Teller qui est la superposition de deux modèles d'Ising, ce modèles est introduit en 1943 sur réseau considérée comme carre dont les sites sont occupés par l'un des quatre types d'atome. Donc ce travaille de mémoire est basée sue ce modèle sur un réseau carré de spin mélangée.

1. Introduction au modèle Ashkin-Teller :

Le modèle Ashkin-Teller est une généralisation du modèle d'Ising (on a décrit ce modèle en chapitre II) à quatre composantes, ce modèle possède une relation de dualité qui malheureusement ne détermine pas son point critique sauf dans un cas dégénéré **[1]**.

On peut considérer ces deux modèles d'Ising , qui sont respectivement décrit par les variables τ_i et σ_i associer sur chacun des sites d'un réseau, dans chaque modèle d'Ising, il y a une interaction J_2 de voisinage plus proche et de deux spins, et les déférents modèles d'Ising sont complets par une interaction à quatre spins J_4 , l'hamiltonien peut alors écrit comme suit [2]:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_2 (\sigma_i \sigma_j + \tau_i \tau_j) - \sum_{\langle ij \rangle} J_4 \sigma_i \sigma_j \tau_i \tau_j$$
(III.1)

Ou < ij > désignent une paire de spins de voisin le plus proche [3].

Ce modèle présente une variété avec des lignes de transitions de second ordre dans ces réseaux hexagonales et carrée, et des lignes de transitions de premiers et seconde ordre dans le réseau cubique.

Pour étudier les lignes de transition, il faut utiliser les fonctions de corrélation de spin et après nous obtenus les équations pour les identités de ces fonctions et afin d'appliquée les inégalités rigoureuse sur les fonctions de corrélations d'ordre supérieure pour obtenir le diagramme de phase pour le modèle Ashkin-Teller **[4]**.

Ce modèle a été étudié sur un réseau carré et la structure de son diagramme de phase est bien comprise sur la base des résultats exacts. Récemment, une analyse des aspects dynamiques de ce modèle sur un réseau carré a été rapportée. La chaîne quantique Ashkin-Teller a également été étudiée principalement en ce qui concerne ses aspects d'invariance conformes. Il y a eu aussi quelques tentatives pour relier la chaîne quantique Ashkin Teller à la conjecture de Haldane par une équivalence avec une chaîne Heisenberg alternant. En trois dimensions, cependant, notre connaissance des diagrammes de phase repose sur des techniques approchées, incluant des calculs moyens, des traitements de groupe de renormalisation, une analyse en série et une méthode de Monte Carlo. Le diagramme de phase ainsi obtenu présente une variété de points multicritriques. Cependant, ces résultats approximatifs concernent principalement le réseau cubique simple. Pour d'autres réseaux, cependant, la concurrence entre J_2 et J_4 peut donner naissance à des diagrammes de phase distincts en fonction de la topologie du réseau. Nous avons donc décidé d'étudier ce point en utilisant une approche qui, en dépit de sa simplicité, est capable de rendre compte de la structure du réseau [5].

2. Transitions de phase dans le modèle Ashkin-Teller :

Il y a environ 30 ans, Ashkin et Teller (1943) ont introduit un modèle statistique en treillis, maintenant connu sous le nom de modèle Ashkin-Teller (AT), comme une généralisation du modèle d'Ising à un système à quatre composantes. En utilisant l'argument de Kramers-Wannier (1941) et l'hypothèse d'une transition unique, ils conjecturent l'emplacement du point critique pour un cas particulier de ce modèle dans lequel trois des quatre composantes sont dégénérées. Leur conjecture a récemment été étendue au modèle AT général (Fan 1972), mais Wegner (1972) a montré que l'argument ne situe pas en général le point critique. Il est donc intéressant d'examiner de plus près le problème de l'existence de transitions de phase dans le modèle AT. Ici, sur la base des résultats établis et une hypothèse de continuité plausible sur la criticité, nous conjecturer que le modèle AT a en général deux transitions de phase. Ce n'est que dans un cas particulier que les deux transitions se fusionnent en une seule [6].

Le modèle AT est définie sur un réseau carré dont les sites sont occupés par l'un quelconque des quatre types d'atomes A, B, C et D. Deux atomes voisins interagissent avec une énergie ϵ_0 pour AA, BB, CC, DD; ϵ_1 pour AB, CD; ϵ_2 pour AC, BD; ϵ_3 pour AD, BC. En réétiquetant les atomes, sur une base de sous-réseau si nécessaire, on voit que les quatre énergies peuvent être librement permutées. Il s'agit d'une symétrie de base du modèle AT [6]. Une représentation de spin utile (Fan 1972) du modèle AT est la suivante. À chaque site du réseau carré on introduit deux spins d'Ising de façon à former un réseau à deux couches. Les quatre spins voisins les plus proches interagissent avec une interaction à quatre corps telle que :

$$-J_3 = \frac{1}{4}(\epsilon_0 + \epsilon_3 - \epsilon_1 - \epsilon_2) \tag{III.2}$$

Pour les interactions en deux corps on a :

$$-J_1 = \frac{1}{4}(\epsilon_0 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3) \tag{III.3}$$

Et l'équation représente les interactions dans chaque couche :

$$-J_2 = \frac{1}{4}(\epsilon_0 + \epsilon_2 - \epsilon_1 - \epsilon_3)$$
 (III.4)

La symétrie de base des énergies implique que J_1 , J_2 et J_3 peuvent également être permutés.

En effectuant une double transformation pour les spins d'Ising dans une couche et en interprétant le résultat en tant que modèle de sommet (Wu 1971, Kadanoff et Wegner 1971), Wegner (1972) a montré que le modèle AT est équivalent à un modèle à huit sommets décalé. Plus précisément, le modèle de sommet équivalent a des poids de sommets a, b, c_+ , d_+ sur le sous-réseau A et a, b, d_+ , c_+ sur le sous-réseau B, avec [6]:

$$a = 2^{-\frac{1}{2}}(w_0 + w_1), \qquad b = 2^{-\frac{1}{2}}(w_2 - w_3)$$

$$c_+ = 2^{-\frac{1}{2}}(w_2 + w_3), \qquad d_+ = 2^{-\frac{1}{2}}(w_0 - w_1)$$
(III.5)

Ici
$$w_i = exp(-\frac{\epsilon_i}{KT})$$
 (III.6)

Et nous avons adopté les notations de Baxter (Baxter 1971) a, b, c, d pour les poids des sommets.

A partir de la symétrie de base, on peut prendre, sans perte de généralité, $w_0 = 1$ et $w_1, w_2, w_3 \leq 1$. Comme la température varie de 0 à ∞ , le point (w_1, w_2, w_3) , Le chemin thermodynamique Γ , de (0, 0, 0) à (1, 1, 1). En supposant une dépendance continue de la criticité sur les paramètres $w_1, w_2 et w_3$ (hypothèse de continuité), le point critique du modèle AT tracera une surface σ dans l'espace w. Une transition de phase se produit lorsque Γ intersecté la surface σ . Cette hypothèse de continuité semble avoir été d'abord clairement énoncée par Thibaudier et Villain (1972) en ce qui concerne la localisation du point critique pour le modèle tridimensionnel à huit sommets **[6].**

Une information exacte est disponible pour la surface critique σ . Lorsque l'une des interactions d'Ising $J_{1'}J_2$ et J_3 disparaît, la représentation d'Ising du modèle AT découple en deux modèles indépendants les plus proches. Du résultat exact sur le modèle d'Ising (Onsager 1944) nous ne concluons que les points :

$$j_i = 0$$
, $exp\left(-\frac{2|J_j|}{KT}\right) = r \equiv \sqrt{2} - 1$, $i \neq j$ (III.7)

Une petite algèbre montre que dans l'espace w, ce sont les droites L, représentées sur la figure 1, reliant les points (r, 0, 0), (r, 1, r), (0, 0, r), (1, r, r), (0, r, 0), (r, r, l), (r, 0, 0) successivement.

A partir de la représentation de huit sommets du modèle AT, on sait d'après Baxter (Baxter 1971) que lorsque $c_+ = d_+$ l'état critique est $a = |b|+c_+ + d_+$.



La figure (III.1) : Diagramme schématique de la surface critique σ dans l'espace w. Les lignes lumineuses L reposent sur σ et les lourdes lignes brisées Li sont les intersections de σ avec le planw₁ + w₂ + w₃ = **1**. Le cube **0** \leq w \leq **1** indique la région physique.

Couplé à la symétrie de base du modèle AT, nous concluons qu'à coupe le plan

$$w_1 + w_2 + w_3 = 1 \tag{III.8}$$

Au niveau des segments de ligne L_1 :

$$w_i = w_i \ge w_k \tag{III.9}$$

Ces segments sont également représentés sur la figure(III.1). Notons que L_1 et deux des lignes L se rencontrent aux points communs (r^2 , r, r), (r, r^2 , r) et (r, r, r^2).

Lorsque $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \infty$, le modèle AT se réduit à un modèle Ising le plus proche et est exactement soluble. (Γ traçait maintenant dans l'axe de (0, 0, 0) à (0, 0, 1)). Donc σ coupe les axes de l'espace w seulement à (0, 0, r) 0) et (r, 0, 0). Une considération similaire pour $\epsilon_1 = 0$; $\epsilon_2 = \epsilon_3$ montre que a coupe la ligne $w_1 = 1$; $w_2 = w_3$ à (1, r, r), etc. [6].

Enfin, la symétrie $c_+ \leftrightarrow d_+$ du modèle à huit sommets décalés implique l'invariance d'un sous la transformation :

$$w'_{1} = (1 + w_{1} - w_{2} - w_{3})/(1 + w_{1} + w_{2} + w_{3})$$

$$w'_{2} = (1 - w_{1} + w_{2} - w_{3})/(1 + w_{1} + w_{2} + w_{3})$$

$$w'_{3} = (1 - w_{1} - w_{2} + w_{3})/(1 + w_{1} + w_{2} + w_{3})$$

(III.10)

Il s'agit d'une symétrie «réflexion» autour du plan. Notons que les points (w_1, w_2, w_3) et (w'_1, w'_2, w'_3) sont colinéaires avec (-1, -1, -1) [6].

Avec cette information, la géométrie de la surface critique o peut être représentée sous la forme de trois pièces en forme de bol cousues ensemble au niveau des segments de ligne L_1 comme représenté schématiquement sur la figure (III.1). On conjecture que tel est le cas. Notons que σ est connu pour traverser les lignes lumineuses L et les lignes brisées lourdes L_1 sur la figure (III.1). Maintenant, w_1, w_2 et w_3 sont monotones le long de la trajectoire thermodynamique Γ ; Aussi Γ se trouve dans l'une des régions $w_i \ge w_j \ge w_k$. En supposant une surface en forme de σ régulière comme montré sur la figure(*III.1*), alors Γ sera en général intersecté σ à deux points, un de chaque côté du plan. Par conséquent, le modèle AT général a deux transitions de phase; Les deux températures de transition sont liées par l'équation (III.10). Une situation particulière se présente lorsque les deux énergies moyennes du modèle AT sont égales, soit $\epsilon_i = \epsilon_j \le \epsilon_k$ avec *i*, *j*, *k* distinct. Dans ce cas Γ Se trouve dans le plan $w_i = w_j$ et coupe une à l'une des lignes L_1 . Ainsi Γ et une intersection qu'une seule fois et le modèle AT n'a qu'une seule transition. Le point critique dans ce cas dégénéré est donné par l'équation (III.8). Cela inclut le cas $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 > 0$ considéré par Kramers et Wannier (1941). Les conclusions sont inchangées lorsque l'un des w_s disparaît, disons $\epsilon_1 = \infty$. Γ se trouve maintenant dans le plan $w_1 = 0$ et traces de (0, 0, 0) à (0, 1, 1) [6].

Notre conjecture implique que le modèle de huit sommets décalés et l'équivalent d'Ising du modèle AT ont deux transitions de phase. Cette situation peut aussi être vue d'après la trajectoire des trajectoires thermodynamiques Γ de ces deux modèles. Dans le modèle d'Ising, Γ trace de nouveau de (0, 0, 0) à (1, 1, 1), tandis que dans le modèle à huit sommets décalés une petite réflexion montre que Γ peut être pris pour tracer de (1, 0, 0) à (0, 1, 0) de la figure (*III.1*). Dans chaque cas, Γ coupe deux fois σ . Une transition unique se produit seulement lorsque Γ intersecté σ à L_1 . La condition pour que cela se produise est $|J_i| = |J_j| \ge |J_k|$ pour le modèle d'Ising et $c_+ = d_+$ pour le modèle huit-sommets décalés. La première condition a été précédemment donnée par Wegner (1 972) par des considérations de symétrie [6].

Nous soulignons en conclusion que l'hypothèse de continuité doit toujours être prise avec prudence. Bien qu'il existe d'autres modèles de sommets dont on sait qu'ils sont invalides (Wu 1972, 1974), l'hypothèse semble plausible dans le présent modèle et est certainement cohérente avec tous les résultats connus. En effet, d'après notre analyse, il serait étonnant que le modèle AT général ne présente pas deux transitions de phase [6].

3. Les propriétés critiques du modèle Ashkin-Teller :

Les propriétés critiques du modèle Ashkin-Teller dans le cas où les deux énergies sont égaux, sont les même que celles du modèles de huit sommet dans la limite de couplage faible.

D'après Baxter pour le modèle à huit sommets, ce modèle statistique bidimensionnelle peut être reformulé en termes de deux modèles d'Ising voisins sur des sous-réseaux interagissant avec l'autre par un couplage à quatre spins de la forme [7]:

$$\lambda \sum_{r} u_{r}; \qquad u_{r} = e_{r}^{(1)} e_{r}^{(2)} \qquad (III.11)$$

Où $e_r^{(1)}$ et $e_r^{(2)}$ sont les densités d'énergie sur les deux sous-réseaux, λ est le paramètre de couplage. Kadanoff et Wegner ont rapporté que le comportement critique tel que donné dans la solution de Baxter est en accord avec l'hypothèse de mise à l'échelle dans la limite $\lambda \to 0$.

Nous illustrons ici que le modèle statistique considéré par Ashkin et Teller peut aussi être écrit sous la forme. Dans leur modèle, on a quatre états, A, B, C et D sur chaque site de réseau et les coefficients de pondération w_0 , w_1 , w_2 et w_3 sont donnés à la paire la plus proche du type (AA, BB, CC, DD), (AB, CD), (AC, BD) et (AD, BC) respectivement. Nous allons associer chaque site de réseau à deux spins S et σ et représenter les quatre états A, B, C et D par les configurations de spin (S, σ): ++, +-, -+ et -- de manière correspondante. En termes de spins, l'hamiltonien pour le système est simplement [7] :

$$H = \frac{\sum_{ij} \left[(\epsilon_0 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3) S_i S_j + (\epsilon_0 + \epsilon_2 - \epsilon_1 - \epsilon_3) \sigma_i \sigma_j + (\epsilon_0 + \epsilon_3 - \epsilon_1 - \epsilon_2) S_i S_j \sigma_i \sigma_j + (\epsilon_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3) \right]}{4}$$
(III. 12)

Avec ij etant les paires les plus proches ;

Et $\epsilon_i = -KT \ln w_i$; et $\lambda = (\epsilon_0 + \epsilon_3 - \epsilon_1 - \epsilon_2)/4$

Lorsque $\lambda = 0$, le modèle AT dégénère en deux modèles d'Ising indépendants. Cela a été trouvé par Botts et Suzuki, bien que dans différents contextes. Lorsque $\epsilon_1 = \epsilon_2$, l'interaction est alors de la forme (III.11), les conclusions tirées par Kadanoff et Wegner sur le modèle 8-v peuvent donc être appliquées naturellement à ce modèle, c'est-à-dire [7]:

$$\frac{\gamma}{\gamma_0} = \frac{\beta}{\beta_0} = \frac{\nu}{\nu_0} = 1 - \left(\frac{4}{\pi}\right) K_c \lambda(\epsilon_0 - \epsilon_3) \tag{III.13}$$

Pour les petits λ , où $exp(-2K_c) = \sqrt{2} - 1$ Noter que lorsque ($\epsilon_0 = \epsilon_3$), le rapport $\frac{\lambda}{\epsilon_0 - \epsilon_3} = 1$, et le calcul des perturbations de Kadanoff et Wegner ne s'applique pas.

Si c'est vraiment une prédiction correcte ne peut être répondue que lorsque la solution exacte devient disponible. On sait déjà que non seulement il existe de nombreuses propriétés de symétrie telles que permutations et transformations duales dans le modèle AT général qui sont les mêmes que dans le modèle 8-v, mais que ces deux modèles intéressants possèdent les conditions communes pour la criticité, c'est-à-dire **[7]**:

$$2Max\{w_0, w_1, w_2, w_3\} = w_0 + w_1 + w_2 + w_3 \qquad (III.14)$$

Ainsi, il reste difficile de voir si une caractéristique critique aussi frappante existe dans ce modèle encore non résolu d'Ashkin et Teller **[7]**.

4. Le modèle Ashkin-Teller à spin mélangés (1,3/2) :

4.1. Diagramme de phase à l'état fondamental :

Pour déterminer le diagramme de phase à l'état fondamentale de ce modèle, on distingue sur tous les états fondamentaux correspond aux des phases stables d'après l'Hamiltonien qui donne par l'équation suivant :

$$H = -K_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i \sigma_j + S_i S_j) - K_4 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j S_i S_j - D \sum_i (S_i^2 + \sigma_i^2)$$
(III.15)

Ou les σ_i et S_i représente les spins sont localisés sur les sites d'un réseau cubique, Dans ce contexte, nous nous appuyons sur des valeurs $\sigma_i = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ et $S_i = \pm 1, 0$; le premier terme de cette équation signifie les interactions bilinéaires entre les spins qui tourne sur les sites *i* et *j*, avec le paramètre d'interaction K_2 . En plus du deuxième terme décrit les quatre interactions de spin avec le paramètre d'interaction K_4 ; toutes ces interactions sont limitées aux paires de tours de voisins les plus proches. Il existe un potentiel ionique unique *D* dans le troisième terme qui représente le champ cristallin.

A partir de la contribution d'une paire de S_1 , S_2 et σ_1 , σ_2 ; donc l'hamiltonien s'exprime comme une somme des contributions des plus proche voisins. Et alors on peut calculer l'énergie à l'état fondamental comme :

$$E_P = -K_2(\sigma_1\sigma_2 + S_1S_2) - K_4\sigma_1\sigma_2S_1S_2 - \frac{D}{2}(S_1^2 + S_2^2 + \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$$
(III.16)

D'après l'équation (III.16), et on sait que $\sigma_i = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ et $S_i = \pm 1, 0$ donc analytiquement on a (3² * 4²) ou contient 144 équations qui présente les états fondamentaux à T=0, et il y a des dégénérescence qui apparaisse permet ces 144 on tirer seulement 24 équations, et on traite numériquement ces derniers et choisit celle qui minimise l'énergie E_P après, on Compare les valeurs que nous avons acquises les de E_P , et en variant les paramètre K4 et D Par conséquence nous obtenons le digramme de phase à l'état fondamental telle que :



Figure (III.2) : diagramme de phase à l'état fondamentale (à T=0)

Ce diagramme est de la transition de premier ordre ; et elle riche par des phases (contient 4 phase représente l'état fondamentale); donc on remarque que :

- pour $\frac{K_4}{K_2} > -\frac{12}{9} \frac{D}{K_2} \frac{12}{9}$ et $\frac{K_4}{K_2} > -0.4$; nous avons $\langle \sigma \rangle = 3/2$, $\langle S \rangle = 1$ et $\langle \sigma S \rangle = 3/2$ donc $\langle \sigma \rangle = \langle \sigma S \rangle$ telle que les spins σ_i et S_i sont les deux parallèle, alors on a la phase de Baxter 3/2 appelée la phase de Baxter ferromagnétique.
- Pour $\frac{K_4}{K_2} < \frac{4}{9} \frac{D}{K_2} \frac{4}{9}$ et $\frac{K_4}{K_2} < -0.4$; dans cette partie de diagramme on constate que les spins σ_i sont parallèles de sorte que les spins S_i sont antiparallèles, cela signifie qu'on a une phase de Baxter antiferromagnétique toujours la phase Baxter (3/2).
- Pour $\frac{K_4}{K_2} < -\frac{12}{9} \frac{D}{K_2} \frac{12}{9}$ et $\frac{K_4}{K_2} > \frac{12}{9} \frac{D}{K_2} + \frac{4}{9}$, dans cette région on a $<\sigma>=1/2$ et $<S>=0 = <\sigma S>=0$, donc la phase ici est la phase sigma symbolisé par $<\sigma>$, en raison des spins S_i sont égaux au zéro et les spins σ_i tandis que parallèles désigne la phase 1/2.
- Pour la zone qui remarqué dans le diagramme de phase qui spécifique par les équations: ^K₄/_{K2} > ⁴/₉ ^D/_{K2} - ⁴/₉ et ^K₄/_{K2} < -⁴/₉ ^D/_{K2} - ⁴/₉ et si D = -1, on a les spins

 (S>=0 et <σ>=3/2, telle que S_i sont égaux au zéro et σ_i sont parallèles, en fin on obtient la phase <σ> est la phase 3/2.

4.2. L'approximation par la méthode de champ moyen :

La méthode de champ moyen à été mentionnée d'après Weiss en 1907; est une approximation qui applique sur déférents modèles en mécanique statistique pour avoir des résultats qualitativement correct, d'ailleurs la méthode de champ moyen est une théorie des transition de phase (le concept de mécanique statistique qui traite en chapitre II) telle que se base sur des valeurs de dimension d'espace suffisamment grandes. Dans la théorie du champ moyen, chaque site du réseau est soumis à un champ moléculaire effectif créé par ses proches

voisins. Tandis, le travail par l'approximation de champ moyen peut être en ligne de température non nulle, Ceci a pour effet de surestimer les valeurs des températures critiques. [8]

Par conséquence, La théorie du champ moyen représente la limite dimensionnelle des systèmes statistiques, car elle néglige les corrélations entre les différents tours. Cependant, il est intéressant d'étudier le comportement moyen de l'anisotropique A.T.M. Afin que nous puissions maintenir le système tridimensionnel entre le comportement moyen et le comportement d = 2. [9]

Dépendance des champs moléculaires associés aux paramètres d'ordre $\langle \sigma \rangle_{,} \langle S \rangle$ et $\langle \sigma s \rangle_{,}$; on peut écrire les équations de champ moyen telle que :

$$h_{\sigma} = \sum_{j(i)} < \sigma_{j(i)} > K_{2}$$

$$h_{S} = \sum_{j(i)} < S_{j(i)} > K_{2}$$

$$h_{\sigma S} = \sum_{j(i)} < \sigma_{j(i)}, S_{j(i)} > K_{4}$$
(III.17)

Avec j(i) designe l'ensemble de tous les voisin les plus proche de site i.

L'Hamiltonienne de système s'écrit par :

$$H_0 = -(h_{\sigma} \sum_i \sigma_i + h_S \sum_i S_i + h_{\sigma S} \sum_i \sigma_i S_i) - D(\sum_i (S_i^2 + \sigma_i^2))$$
(III.18)

Générée par la fonction de partition (elle est définie en chapitre I) qui définie par :

$$Z_0 = Tr \, e^{-\beta H_0} \tag{III.19}$$
Ou β représente la température qui donné par la relation :

$$\beta = \frac{1}{K_B T}$$
 Avec K_B est la constante de Boltzmann qui est indiquée au chapitre I

De sorte que la fonction de partition devient :

$$Z_{0} = 2 \cosh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_{S} + \frac{5}{4}D\right)\right)$$

$$+ 2 \cosh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_{S} + \frac{13}{4}D\right)\right)$$

$$+ 2 \cosh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_{S} + \frac{5}{4}D\right)\right)$$

$$+ 2 \cosh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_{S} + \frac{13}{4}D\right)\right)$$

$$+ 2 \cosh\left(\frac{1}{2}\beta h_{\sigma}\right) exp\left(\frac{1}{4}\beta D\right) + 2 \cosh\left(\frac{3}{2}\beta h_{\sigma}\right) exp\left(\frac{9}{4}\beta D\right)$$
(III.20)

L'énergie libre par site est décrit par:

$$F \le \Phi = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_0) + \langle H - H_0 \rangle$$
 (III.21)

Et les paramètres d'ordre sont calcule comme des valeurs moyenne des spins et sont donné par :

$$\begin{cases}
< \sigma > = \frac{Tr \sigma_i e^{-\beta H_0}}{Z_0} \\
< S > = \frac{Tr S_i e^{-\beta H_0}}{Z_0} \\
< \sigma S > = \frac{Tr \sigma_i S_i e^{-\beta H_0}}{Z_0}
\end{cases}$$
(III.22)

On peu dire que ces moyenne des spins distingue des aimentation, donc on trouve que :

$$m_{\sigma} = \langle \sigma \rangle$$

$$= \frac{1}{Z_{0}} \left(\sinh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_{S} + \frac{5}{4}D\right)\right) + \sinh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_{S} + \frac{5}{4}D\right)\right) + \sinh\left(\frac{1}{2}\beta h_{\sigma}\right) exp\left(\beta\frac{1}{4}D\right) + 3\left(\sinh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_{S} + \frac{13}{4}D\right)\right)\right) + 3\left(\sinh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_{S} + \frac{13}{4}D\right)\right)\right) + 3\left(\sinh\left(\frac{3}{2}\beta h_{\sigma}\right) exp\left(\beta\frac{9}{4}D\right)\right) \right)$$

(III.23)

$$m_{S} = \langle S \rangle = \frac{1}{Z_{0}} \left(2 \left(\cosh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_{S} + \frac{5}{4}D\right)\right)\right) + 2 \left(\cosh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_{S} + \frac{13}{4}D\right)\right)\right) - 2 \left(\cosh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_{S} + \frac{5}{4}D\right)\right)\right) - 2 \left(\cosh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_{S} + \frac{13}{4}D\right)\right)\right) \right)$$



$$m_{\sigma S} = \langle \sigma S \rangle$$

$$= \frac{1}{Z_0} \left(\sinh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_S + \frac{5}{4}D\right)\right) \right)$$

$$- \sinh\left(\frac{1}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_S + \frac{5}{4}D\right)\right)$$

$$+ 3\left(\sinh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} + h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(h_S + \frac{13}{4}D\right)\right)$$

$$- 3\left(\sinh\left(\frac{3}{2}\beta(h_{\sigma} - h_{\sigma S})\right) exp\left(\beta\left(-h_S + \frac{13}{4}D\right)\right)\right)\right)$$

(III.25)

Enfin, l'énergie libre peut écrite comme suit:

$$\Phi = -\sum_{i} \ln Z_0 + K_2 \left(\sum_{\langle i,j \rangle} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right)$$
$$+ K_4 \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \sigma_i S_i \rangle \langle \sigma_j S_j \rangle$$

(III.26)

Généralement, on peut déterminer les solutions de système des équations qui sont ((III.23), (III.24), (III.25)), réunies à les équations sui montre les champs moléculaires telle que le système (III.17), tan que ces solutions ne sont pas unique, par conséquence, on minimise l'énergie libre qui défini par l'équation (III.26) et on obtient les phases pures, Si les paramètres d'ordre sont continus, la transition est du second ordre, alors que si elles sont discontinues, la transition est d'une première ordre.

Donc, nous avons obtenus les valeurs des aimentations qui représente $\langle \sigma \rangle$, $\langle \sigma S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$ numériquement pour différent température, mais nous avons pris la zone qui représente la phase de Baxter ferromagnétique ou K4 est positive d'après le diagramme de phase à l'état fondamentale. Pour ces diagrammes suivant on fait deux cas K4=2 et D=1 et le deuxième cas prend K4=5 et D=2 telle que :



La figure (III.3) : Trace les paramètres $\langle \sigma \rangle$, $\langle S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$ en fonction de la température en utilisant l'approximation de champ moyen pour K4=2 et D=1.



La figure (III.4) : Trace les paramètres $\langle \sigma \rangle$, $\langle S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$ en fonction de la température en utilisant l'approximation de champ moyen pour K4=5 et D=2.

Nous avons vu dans le diagramme de phase quand la température est nul et plus précisément la région de la phase de Baxter ferromagnétique lorsque $\langle \sigma \rangle = \frac{3}{2}, \langle S \rangle = 1$ et $\langle \sigma S \rangle = \frac{3}{2}$, alors ces résultat et ces deux figure (*III.3, III.4*) montre que $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$ converge vers la même valeur mais à une température basse ainsi que $\langle S \rangle$, contrairement à haut température on remarque que les trois aimentations tend vers zéro ce qui conduit à un paramagnétisme et les lignes de transition sont de second ordre.

Finalement, la méthode de champ moyen appliquée au modèle d'Ashkin-Teller a été confirmer le diagramme de phase à l'état fondamentale particulièrement la partie de phase de Baxter ferromagnétique.

Les références bibliographiques

[1] Wu, F. Y. (2009). *Exactly solved models: a journey in statistical mechanics: selected papers with commentaries (1963-2008)*. World Scientific.

[2] DE ARAUJO, J. M. et DA COSTA, F. A. Phase diagrams of the Ashkin-Teller Model on the Cayley Tree. *Brazilian Journal of Physics*, 1997, vol. 27, p. 89-95.

[3] SANTOS, Jander P. et BARRETO, FC Sá. Upper Bounds on the Critical Temperature of the Ashkin-Teller Model. *Brazilian Journal of Physics*, 2016, vol. 46, no 1, p. 70-77.

[4] SANTOS, Jander P. et BARRETO, FC Sá. Upper Bounds on the Critical Temperature of the Ashkin-Teller Model. *Brazilian Journal of Physics*, 2016, vol. 46, no 1, p. 70-77.

[5] DE ARAUJO, J. M. et DA COSTA, F. A. Phase diagrams of the Ashkin-Teller Model on the Cayley Tree. *Brazilian Journal of Physics*, 1997, vol. 27, p. 89-95.

[6] WU, F. Y. et LIN, K. Y. Two phase transitions in the Ashkin-Teller model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1974, vol. 7, no 9, p. L181.

[7] FAN, C. On critical properties of the Ashkin-Teller model. Physics Letters A, 1972, vol. 39, no 2, p. 136.

[8] Ibtissam DANI, Contribution à l'étude théorique des propriétés magnétiques des matériaux cuprates multiferoiques en multicouches et nano-films, THÈSE DE DOCTORAT, UNIVERSITE MOHAMMED V- Rabat, 2015.

[9] BEKHECHI, S., BENYOUSSEF, A., ETTAKI, B., *et al.* Phase transitions in the mixed Ashkin-Teller model. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 2000, vol. 18, no 2, p. 275-282.



Conclusion générale

Tout comme nous savons que la physique statistique est riche par les modèles, nous avons touchée dans cette thèse un de ces modèles pour étudier, c'est le modèle d'Ashkin-Teller, il joue un rôle très important en mécanique statistique. Lorsqu'il est une relation avec le modèle d'Ising. Par suite l'objectif de cette travaille est l'étude de ce modèle à spin mélangée (3/2,1),

Tous d'abord, nous avons fait une apparition sur quelque notion fondamentale qui décrit la mécanique statistique, ou elle basée sur des idées principales comme la température et l'entropie et des relations thermodynamique, et à la fin de ce chapitre nous avons parlée sur les types de magnétisme.

Si en parle sur le mot magnétisme nous allons à les matériaux magnétique, alors ces matériaux change l'état en fonction des paramètres extérieure comme la température cela conduit à le terme de transitions de phase, habituellement nous avons vu les classifications de ce dernier selon d'Ehrenfest et Landau pour avoir l'ordre de transitons.

Enfin, l'étude de modèle Ashkin_Teller permet de préciser le diagramme de phase à l'état fondamentale c'est-à-dire à température être nulle et à l'aide de l'hmiltonienne de ce modèle on calcule tous les états fondamentaux d'après le nombre de paire de spin voisin puis nous pouvons obtenir ce diagramme riche par les phases stable.

Ainsi que nous avons confirmer une partie de ce travaille qui représente la zone de Baxter ferromagnétique par l'approximation de champ moyen mais à une température élevée, cette méthode elle est basée sur les calcules des aimentations en utilisant la fonction de partitions et vérifier ce calcul numériquement, donc on obtient les diagramme qui montrent ces aimentations en fonction de la température, ces diagrammes représentent une transition de seconde ordre lorsque à haut température les aimentations tend vers zéro et on basse de température en revient au diagramme de l'état fondamentale.

Finalement, nous avons vu l'importance de ce modèle en mécanique statistique et pour l'utilisation dans l'étude des matériaux magnétique d'après ce qu'il est riche par le comportement critique et les caractéristiques physiques.

Perspective :

Maintenant, nous avons vu sauf la phase de Baxter ferromagnétique telle que l'interaction K4 est positive, alors que le cas de K4 est négative ou trouve les autres phases en utilise les sous réseaux pour l'approximation de champ moyen, sinon en fait la simulation de Monte Carlo.

Abstract :

Regularly, we have done theoretical study of statistical physics, taking into account the different concepts related to magnetism and their type in materials. Then we went to describe some generalities about the term of the phase transition with their classification to have the state change of these magnetic materials as a function of the external parameters. However the objective of this thesis is the Ashkin-Teller model with mixed spins (3 / 2.1), at first we learned the phase diagram in the ground state by the exact method where we found The four most stable phases, then we pray the ferromagnetic Baxter phase and study using the mean field method and we saw that the results obtained are qualitatively in good agreement.

Keywords: Fundamental phase diagram, Baxter, Ashkin-Teller model, mean field, Ising model

Résumé:

Régulièrement, on fait l'étude théorique de la physique statistique, en tenant compte des différents concepts liés au Magnétisme et leur type dans les matériaux. Puis nous sommes allés à décrire quelques généralités sur le terme de la transition de phase avec leur classification pour avoir le changement d'état de ces matériaux magnétique en fonction des paramètres extérieure. Cependant l'objectif de cette thèse est l'étude de modèle Ashkin-Teller à spins mélangés (3/2,1), en premier temps nous avons apprendre le diagramme de phase à l'état fondamentale par la méthode exacte où nous avons trouvé les quatre phases les plus stable, ensuite nous avons prie la phase de Baxter ferromagnétique et on étudier à l'aide de la méthode de champ moyen et nous avons vu que les résultats obtenu sont qualitativement en bon accord.

Mot clé : diagramme de phase fondamental, MAT, champ moyen, Baxter, modèle d'Ising

الملخص

لقد قمنا بالدراسة النظرية للفيزياء الإحصائية مع الأخذ بعين الاعتبار مختلف المفاهيم المتعلقة بالمغناطيس بأنواعه ثم ذهبنا إلى وصف عموميات حول المرحلة الانتقالية مع مصنفاتها لننظر إلى تغير حالة هذه المواد المغناطيسية وفقا لمعايير خارجية و مع ذلك فان الهدف من هذا البحث هو دراسة نموذج اشكين تيلر ذو السبين المختلط في الأول تحصلنا على المنحنى البياني للحالة الأساسية بالطريقة المباشرة حيث وجدنا 4 مراحل الأكثر استقرارا ثم أخذنا المرحلة المغناطيسية لباكستر و درسناها باستخدام الحقل المتوسط و قد رأينا آن النتائج المتحصل عليها نوعيا في اتفاق جيد.

الكلمات المفتاحية مخطط المرحلة الأساسية، باكستر، نموذج أشكين-تيلر، الحقل المتوسط، نموذج إيسينغ