



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

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

THÈSE LMD

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT

Spécialité: Physique Computationnelle

Par :

M^{elle} Benmansour Amel

Sur le thème

Etude des films minces par la méthode de Monte Carlo dans le cadre du modèle de spin d'Ising

Soutenue publiquement le 22 Mai 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

M ^r CHIKHAOUI Abdelhak	Professeur	Université de Tlemcen	Président
M ^r BEKHECHI Smaine	Professeur	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
M ^r BRAHMI Badr-Eddine Nabil	M-C-A	Université de Tlemcen	Co-Directeur de thèse
M ^r MERAD Abdelkrim Elhasnaïne	Professeur	Université de Tlemcen	Examineur
M ^r BOUMEDIENE Lasri	Professeur	Université de Saida	Examineur

*Laboratoire Automatique Tlemcen (LAT)
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

*A la mémoire de mon professeur Tayeb BENOUAZ qui
nous a quitté, que dieu garde son âme dans son vaste
paradis...*

Dédicace

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.

Je souhaite prouver mon grand remerciement qui ne sera jamais suffisant que j'espère le rendre aussi fière par ce travail

A mon très cher père Tahar

Je dédie ce modeste travail en signe de respect, reconnaissance et de remerciement aux personnes les plus chers à mon cœur :

A la meilleure de toutes les mères Zahra

Qui m'a soutenu durant toute ma vie, qui m'a aidé durant mes années, qui m'a appris à aimer le travail et le bon comportement, pour son amour infini et sa bienveillance jour et nuit,

Pour être le bon exemple de père par son soutien, ses encouragements et aides de mes premiers pas d'études jusqu'à ce jour.

A ma chère sœur Souad

A mes chères frères Mohamed, Lakhdar et Samir

A mon grand père

A ma cousine Ghania

A toute la famille Benmansour et Benslimane

A mes grande sœurs Fouzia Belaribi et Boudefla Rania

A mes chères collègues : Kotbi Amina, Brahimi Asme, Bouheddadj Amina, Zair Asma

A tous ceux que j'aime et ceux qui m'aiment.

Merci !

Amel Benmansour

Remerciements

En préambule à cette thèse, je remercie ALLAH qui m'a donné la force et la patience d'accomplir ce modeste travail.

Cette thèse a été réalisée au sein de l'équipe Approximation et Stabilité des Systèmes Non Linéaire du laboratoire d'Automatique, de la Faculté des Sciences de l'Université Abou-Bekr Belkaid, Tlemcen.

*Je tiens tout d'abord à adresser un remerciement tout particulier à Monsieur **Smaine Bekhechi**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences Tlemcen, mon directeur de thèse, pour sa disponibilité et le temps qu'il a su me consacrer, pour tous ses conseils et toutes ses idées sans lesquels ce travail de thèse n'aurait pu aboutir. Je le remercie aussi pour sa bonne humeur au quotidien et ses encouragements.*

*Je tiens à remercier Monsieur **Badr-Eddine Nabil Brahmi**, le maître conférence classe A d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences Tlemcen, mon Co-directeur de thèse, à qui j'ai l'honneur de dédier ce modeste travail pour exprimer mon profond respect et ma grande estimation.*

*Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à Monsieur **Abdelhak CHIKAOUI**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences Tlemcen, pour avoir accepté de participer à ce jury en tant que rapporteur et président de Jury.*

*Je tiens également à exprimer ma gratitude à Monsieur le Professeur **Abdelkrim Elhasnaïne Merad**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences Tlemcen, pour avoir accepté de participer à ce jury en tant qu'examineur et membre de Jury.*

*Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à Monsieur **Lasri Boumediene**, Professeur de l'Université Taher Moulay de Saida pour avoir accepté de participer à ce jury en tant qu'examineur et membre de Jury.*

Je leurs exprime toute ma reconnaissance pour le regard attentif qu'ils ont donné à mon travail.

*Un grand merci à tous les personnels du Laboratoire de Physique Théoriques de l'Université Abou-Bekr Belkaid, Tlemcen sous la direction de monsieur **Smaine Bekhechi**.*

Amel Benmansour

Table des matières

Dédicace	Ii
Remerciments	Iii
Table des matières	Iv
Liste des figures	01
Liste des tableaux	05
Introduction générale	06
Bibliographies	11
Chapitre I : Généralités sur le magnétisme et les transitions de phases	
I-1 Origine de magnétisme	14
I-2 Différents comportement magnétique d'un matériau	15
I-2-1 Magnétisme désordonné : magnétisme ordinaire	15
a. Diamagnétisme	15
b. Paramagnétisme	16
I-2-2 Magnétisme ordonné : magnétisme extraordinaire	18
a. Origine de magnétisme ordonné	18
b. Ferromagnétisme	19
c. Antiferromagnétisme	20
d. Ferrimagnétisme	21
I-3 Anisotropie magnétique	22
a. Anisotropie magnétocristalline	23
b. Anisotropie de surface	24
c. Anisotropie d'échange	25
I-4 Différent types de température de transition	25
a. Température de Curie	25
b. Température de Néel	26
c. Température de Compensation	26
I-5 Transition de phase	26
I-6 Brisure de symétrie et paramètre d'ordre	29
I-7 Classification des transitions de phases	30

a. Classification d'Ehrenfest (1880-1933)	30
b. Classification de Landau (1908-1968)	32
I-8 Conclusion	32
Bibliographies	34
Chapitre II : Magnétisme des films minces	
II-1 Généralités sur les films minces magnétique	37
II-2 Propriétés magnétiques des films minces	38
II-3 Effet de surface	39
II-4 Effet de taille	39
II-5 Intéraction d'échange	40
II-5-1 Couplage d'échange intra couche	41
II-6 Dimensionnalité et comportement critique	41
II-7 Applications des films minces magnétiques	43
II-7-1 Mémoires d'ordinateur	43
II-7-2 Domaine -Dispositifs de mobilité	43
II-7-3 Support d'enregistrement magnétique	43
II-7-4 Têtes magnétiques à film mince	44
II-8 Conclusion	44
Bibliographies	45
Chapitre III : Modèles de spin et la méthode de Monte Carlo	
III-1 Modèles de spin	49
III-1-1 Modèle d'Ising	49
III-1-2 Modèle de Potts	51
III-1-3 Modèle de Heisenberg	52
III-1-4 Modèle de Blume Capel (BC)	53
III-1-5 Modèle de Blume Emery Griffiths (BEG)	54
III-1-6 Modèle de Ashkin Teller (AT)	54
III-2 Méthode de Monte Carlo	56
III-2-1 Principe de la méthode de Monte Carlo	57
a. Échantillonnage d'importance	57
b. Chaîne de Markov	58
c. Ergodicité	59
d. Balance détaillée	59

e. Probabilité d'acceptation	60
III-2-2 Algorithme de Métropolis	62
III-3 Analyse d'erreurs	65
III-3-1 Erreur statistique	65
III-3-2 Erreur systématique	65
III-4 Conditions aux limites.	66
III-4-1 Conditions aux limites périodiques	66
III-4-2 Conditions aux limites du bord libre	67
III-5 Conclusion	67
Bibliographies	69
Chapitre IV: Étude de Monte Carlo des films minces magnétiques par le modèle Ashkin Teller à spin -1/2 et à spin -1 au point spécial	
IV-A) Etude l'effet de J_4 sur les comportements critiques et les propriétés thermodynamiques de surface des films minces de modèle Ashkin Teller à spin-1/2	73
IV-A-1 Modèle et formalisme	73
IV-A-2 Résultats et discussions	75
a) Diagrammes de phases	76
b) Propriétés thermodynamiques	79
c) Exposants effectifs et critiques	88
IV-A-3 Conclusion	95
IV-B) Propriétés magnétiques et diagrammes de phases des films minces ferromagnétiques de modèle spin-1 Ashkin Teller en présence d'un champ cristallin	96
IV-B-1 Modèle et méthode	96
IV-B-2 Résultats et interprétation	97
IV-B-3 Conclusion	111
Bibliographies	112
Conclusion générale et perspectives	114

Liste des figures

Figure I-1 : Trajectoire d'un électron autour du noyau.	14
Figure I-2 : (a) variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué et (b) la dépendance thermique de la susceptibilité pour les corps diamagnétiques.	16
Figure I-3 : Schéma descriptif du diamagnétisme.	16
Figure I-4 : (a) L'aimantation en fonction du champ magnétique extérieur, (b) la susceptibilité en fonction de la température est à droite.	17
Figure I-5 : Illustration explicative du paramagnétisme.	17
Figure I-6 : Les diverses catégories de magnétisme ordonné.	19
Figure I-7 : Répartition des moments magnétiques dans un matériau ferromagnétique en présence et en l'absence d'un champ magnétique appliqué.	20
Figure I-8 : Alignement antiparallèle des moments atomiques dans les matériaux antiferromagnétiques.	21
Figure I-9 : Structure de spin d'un ferrimagnétique.	22
Figure I-10 : Schéma descriptive des courbes d'aimantation du Fer (Fe) dans différentes directions cristallographiques.	24
Figure I-11 : Diagramme de phase d'un fluide (l'eau) de la pression en fonction de la température, avec trois phases stables : solide, liquide et gaz. La ligne de transition liquide-gaz comporte un point d'arrêt.	27
Figure I-12 : Diagramme de phase de champ magnétique en fonction de la température d'un ferromagnétique. Sur l'axe $H = 0$ et pour une température au-dessous de la température critique, il y a une ligne de discontinuité.	28
Figure I-13 : Illustration de diagramme de phase présentant un point tricritique. Pour un matériau antiferromagnétique, l'ordre de transition varie selon l'effet d'un champ magnétique.	29
Figure III-1 : Schéma illustré réseau cristallin et moments magnétiques atomiques associés.	50
Figure III-2 : Description du modèle Potts pour différents États q.	52
Figure III-3 : Schéma présente l'organigramme d'une simulation de Monte-Carlo avec l'algorithme de Métropolis.	64
Figure III-4 : Conditions de limite périodiques pour le modèle bidimensionnel d'Ising.	66
Figure III-5 : Exemple d'application des conditions aux limites pour le modèle 2D d'Ising : condition limite de bord libre.	67
Figure IV-1 : Diagrammes de phases de la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ en fonction de rapport de l'interaction de couplage bilinéaire $R_s = (J_{2s} / J_{2b})$ pour différentes d'épaisseur du film et pour (a) $(J_{4s} / J_{2b} = 1.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 0.0)$, (b) $(J_{4s} / J_{2b} = 1.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 1.0)$, (c) $(J_{4s} / J_{2b} = 2.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 2.0)$ et (d) $(J_{4s} / J_{2b} = 1.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 2.0)$. Déterminer par la simulation de Monte Carlo pour un système de taille $L = 50$.	77

Figure IV-2 : La dépendance thermique des aimantations et des susceptibilités par site avec des barres d'erreur pour (a) ($N = 5$, $J_{2s}/J_{2b} = 1.0$) dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) et (b) ($N = 6$, $J_{2s}/J_{2b} = 0.75$) dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), avec la taille du système $L=50$. 78

Figure IV-3 : La dépendance des aimantations par couche (m_1) et par site m en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 0.0$) pour les spins (S), (σ) et (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.0$), pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 80

Figure IV-4 : Dépendance thermique de la susceptibilité de surface (χ_1) associée à l'aimantation de surface et de la susceptibilité par site (χ) associée à l'aimantation par site du système, dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 0.0$) pour les spins (S), (σ) et (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.0$) pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 81

Figure IV-5 : La dépendance des aimantations par couche et par site avec des barres d'erreur en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 1.0$) pour les spins (S), (σ) et (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{1sp} = 1.5$), pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 82

Figure IV-6 : Dépendance thermique des susceptibilités de surface et par site avec des barres d'erreur dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 1.0$) pour les trois états de spins (S), (σ) et (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{1sp} = 1.5$) pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 83

Figure IV-7 : La variation thermique des aimantations par couche et par site avec des barres d'erreur dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) pour le spin (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{2sp} = 2.25$), pour N de 4 à 10, avec la taille du système $L=50$. 84

Figure IV-8 : La variation thermique des susceptibilités de surface et par site avec des barres d'erreur dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) pour le spin (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{2sp} = 2.25$), pour $N = 4, 5$ et 10 , avec la taille du système $L=50$. 85

Figure IV-9 : La dépendance des aimantations de surface et par site avec des barres d'erreur en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) pour les spins ($(S), (\sigma)$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{3sp} = 2.5$), pour N de 4 à 10, avec la taille du système $L=50$. 86

- Figure IV-10** : La dépendance des susceptibilités de surface et par site avec des barres d'erreur en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$ pour les spins $((S), (\sigma))$, avec le rapport au point spécial $(R_s = R_{3sp} = 2.5)$, pour N de 4 à 10, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 87
- Figure IV-11** : L'exposant effectif de surface β_{eff1} en fonction de la température réduite t pour plusieurs épaisseurs de film pour les spins $((S), (\sigma))$ dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 0.0)$, avec $R_s = R_{sp} = 1.0$ et $T_c = 4.5$. La taille du système est $L \times L = 200 \times 200$. 89
- Figure IV-12** : L'exposant critique de l'aimantation de surface $\beta_{1m}(N)$ en fonction de $1/N$, dans le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 0.0)$, la ligne pointillée correspond à l'ajustement linéaire associé aux valeurs maximales des simulations numériques de β_{eff1} . 90
- Figure IV-13** : L'exposant effectif de surface β_{eff1} en fonction de la température réduite t pour plusieurs d'épaisseur du film N pour le spin (σS) dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, avec $R_s = R_{2sp} = 2.25$ et $T_c = 9.4$. La taille du système est $L \times L = 200 \times 200$. 91
- Figure IV-14** : L'exposant critique de l'aimantation de surface $\beta_{1m}(N)$ en fonction de $1/N$, dans le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, la ligne pointillée correspond à l'ajustement linéaire associé aux valeurs maximales des simulations numériques de β_{eff1} . 92
- Figure IV-15** : L'exposant effectif de surface β_{eff1} en fonction de la température réduite t pour plusieurs épaisseurs de film N , pour les spins $((S), (\sigma))$ dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, avec $R_s = R_{3sp} = 2.5$ et $T_c = 8.89999$. La taille du système est $L \times L = 200 \times 200$. 93
- Figure IV-16** : L'exposant critique de l'aimantation de surface $\beta_{1m}(N)$ en fonction de $1/N$, dans le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, la ligne pointillée correspond à l'ajustement linéaire associé aux valeurs maximales des simulations numériques de β_{eff1} . 94
- Figure IV-17** : Interactions Ashkin Teller sur une plaquette. Deux modèles d'Ising avec des interactions J_1 et J_2 liés par une interaction à quatre spins J_4 . 97
- Figure IV-18** : Diagrammes de phases de la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ en fonction du rapport de l'interaction de couplage bilinéaire $(R_s = J_{2s} / J_{2b})$, pour différentes épaisseurs du film ($N = 3, 4$ et 6), pour (a) $D/J_{2b} = 2.0$, (b) $D/J_{2b} = -2.0$, (c) $D/J_{2b} = 3.0$ et $D/J_{2b} = -3.0$, dans le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0)$. Déterminer par la simulation de Monte Carlo pour un système de taille $L = 50$. 99
- Figure IV-19** : Diagrammes de phases de la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ en fonction du rapport de l'interaction de couplage bilinéaire $(R_s = J_{2s} / J_{2b})$ pour différentes épaisseurs du film ($N = 3, 4$ et 6), pour (a) $D/J_{2b} = 2.0$, (b) $D/J_{2b} = -2.0$, (c) $D/J_{2b} = 3.0$ et (d) $D/J_{2b} = -3.0$, dans le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$. La taille du système $L = 50$. 101

- Figure IV-20 :** La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche avec des barres d'erreur dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0$), pour diverses valeurs du champ cristallin telles que: ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$) pour $D/J_{2b} = 2.0$), et pour ($D/J_{2b} = -2.0$) ((d) $N = 3$, (e) $N = 4$ et (f) $N = 6$), pour les spins ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et avec le taille du système $L = 50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 102
- Figure IV-21:** La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche avec des barres d'erreur dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0$), pour diverses valeurs du champ cristallin telles que: ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$) pour $D/J_{2b} = 3.0$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et ((d) $N = 3$, (e) $N = 4$ et (f) $N = 6$) pour ($D/J_{2b} = -3.0$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp1} = 1.37411$), pour les spins ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$), avec le taille du système $L = 50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 103
- Figure IV-22 :** La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche, dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour diverses épaisseurs du film ($N = 3, 4$ et 6) et pour différentes valeurs du champ cristallin telles que : (a) pour ($D/J_{2b} = 2.0$) et (b) pour $D/J_{2b} = 3.0$), pour la phase $\langle \sigma S \rangle$, avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 105
- Figure IV-23:** La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche, dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour différentes valeurs du champ cristallin telles que : ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$) pour ($D/J_{2b} = 3.0$) et ((d) $N = 3$, (e) $N = 4$ et (f) $N = 6$) pour $D/J_{2b} = -3.0$), pour les trois spins ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. 106
- Figure IV-24 :** La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D/J_{2b} pour $J_{2s}/J_{2b} = 0.5 < R_{sp}$ et pour différentes valeurs de l'épaisseur du film N , dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0$) et pour les spins (S), (σ) et (σS). 107
- Figure IV-25:** La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D/J_{2b} pour $J_{2s}/J_{2b} = 2.5 > R_{sp}$ et pour différentes valeurs de l'épaisseur du film N , dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0$) et pour les spins (S), (σ) et (σS). 108
- Figure IV-26 :** La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D/J_{2b} , pour $J_{2s}/J_{2b} = 0.5 < R_{sp}$, pour ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$), dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$). 109
- Figure IV-27 :** La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D/J_{2b} pour $J_{2s}/J_{2b} = 2.5 > R_{sp}$ et pour différentes valeurs de l'épaisseur du film N , dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$). 110

Liste des tableaux

Tableau I-1 : Certains exemples de paramètres d'ordre utilisés en fonction de la nature de la transition.	30
Tableau IV-1 : Représente les valeurs des exposants critiques de surface aux points spéciaux et aux températures critiques, pour diverses valeurs de l'interaction d'échange à quatre composantes	94

Introduction générale

Introduction générale

Le magnétisme est un champ de la physique de matière condensée. Le magnétisme est né après la découverte de l'électron en 1897 [1]. Le magnétisme traverse notre chemin dans de nombreux aspects de la vie. Appliqué dans de nombreux appareils techniques (moteurs, transformateurs) et en particulier dans le stockage et la recherche d'informations (ordinateurs, systèmes audio et vidéo, etc...), le magnétisme joue un rôle clé dans la société actuelle [2]. La source du magnétisme dans les atomes libres est l'interaction d'échange, qui est également responsable du magnétisme collectif dans la matière condensée [2].

Le magnétisme est un phénomène qui résulte du déplacement de charges. Dans un atome magnétique, la contribution dominante à son moment total est due au spin et au moment orbital des électrons. Il apparaît que certains atomes ont un moment magnétique total non nul comme *Fe*, *Ni* ou *Co*. L'aimantation est la quantité macroscopique qui permet de décrire le caractère magnétique d'un matériau. Elle se définit comme le moment magnétique total par unité de volume. Une caractéristique fondamentale des matériaux magnétiques est leur réponse à un champ magnétique qui leur est appliqué. La susceptibilité magnétique χ est la quantité qui décrit cette réponse [3].

Toute substance de composition chimique fixe, par exemple l'eau H_2O , peut exister sous des formes homogènes dont les propriétés peuvent être distinguées, appelées états. L'eau existe sous forme de gaz, liquide ou solide. Ces trois états de la matière sont différents par leur densité, leur capacité thermique. Les expériences démontrent des transitions de phases ou des changements d'état comme l'exemple de la substance qui passe de l'état liquide à l'état solide (solidification). Les transitions de phases sont des événements physiques connus depuis très

longtemps. On les rencontre dans la nature (par exemple, condensation de gouttes d'eau dans les nuages) [4].

Le passage d'une phase à l'autre (transition de phase) est l'un des domaines les plus étudiés par les physiciens théoriques et expérimentaux. Les expériences montrent que lorsqu'un corps ferromagnétique est chauffé, il se transforme progressivement en un corps faiblement magnétique [5]. Landau présente la notion de brisure de symétrie dans le paramètre d'ordre qui est non nul à basse température et nul à haute température. Il a également lié la nature d'une transition à la continuité du paramètre d'ordre (second ordre) ou à sa discontinuité (premier ordre) [5].

Dans le domaine du magnétisme, les films minces à base de matériaux ferromagnétiques (*Fe*, *Co*, *Ni*, ...) représentent une classe importante, ils ont fait l'objet de nombreux travaux de recherche pour la réalisation d'appareils d'enregistrement à haute densité et de capteurs magnétiques à haute sensibilité [6].

Les films magnétiques minces présentent un grand intérêt en raison de leurs applications actuelles et potentielles dans diverses technologies magnétiques. En général, les films minces sont magnétiquement doux à une épaisseur de quelques dizaines de nanomètres [7]. Les films minces magnétiques sont présents dans les dispositifs électroniques modernes de stockage de données et les capteurs, et ces domaines constituent un axe essentiel du développement de la science et de la technologie des films minces magnétiques [8].

La technologie des couches minces est à la fois l'un des arts les plus anciens et l'une des sciences les plus récentes. L'épaisseur d'un film est l'un des premiers attributs cités de sa nature. La raison en est que les propriétés des couches minces dépendent généralement de l'épaisseur [9].

L'étude des phénomènes critiques dans les systèmes à couches minces ferromagnétiques a une longue histoire [10] et ces systèmes magnétiques sont d'une grande importance technologique [11], tout en présentant des problèmes d'intérêt fondamental [12]. Dans les systèmes magnétiques à géométrie de film mince, en raison de leur nombre de coordination réduit, les atomes de surface peuvent avoir une symétrie inférieure à celle des atomes internes. Les interactions d'échange entre les atomes de surface peuvent être différentes de celles entre les atomes de volume correspondants. Conduisant à un phénomène connu sous le nom d'amélioration de surface dans lequel la surface peut présenter une phase ordonnée même si le volume elle-même est désordonnée [13]. En raison de la présence de couplages d'échange modifiés à la surface, les systèmes à couches minces magnétiques peuvent présenter différents types de transition de phase. Afin d'étudier les propriétés thermiques et magnétiques des

couches minces, les modèles basés sur un Hamiltonien de spin de type Ising sont bien adaptés. De nombreux travaux théoriques ont montré qu'il existe une valeur critique du rapport entre la surface et le volume des interactions d'échange R_c , au-dessus de laquelle les effets de surface sont dominants et la température de transition du film entier est déterminée par l'aimantation de surface, tandis qu'en dessous de R_c , les caractéristiques de transition du film sont régies par l'aimantation de volume [13]. La valeur critique R_c est connue comme le point spécial auquel la température de transition du film devient indépendante de l'épaisseur, et la valeur numérique de ce point a été examinée dans diverses techniques théoriques pour différents cas du spin.

Il existe de nombreux modèles de physique statistique qui cherchent à faire apparaître des propriétés remarquables sur les systèmes les plus simples possibles. Nous sommes alors souvent amenés à considérer des problèmes sur un réseau où les variables ont un nombre fini d'états possibles. Le plus célèbre modèle a été proposé par *Ising* dans les années 1925, qui a présenté un modèle, appelé le modèle d'Ising, sur un réseau carré pour expliquer le ferromagnétisme [5]. Ce modèle a été introduit pour étudier les transitions de phases des ferromagnétiques à la température de Curie [14]. En 1944, ce modèle a été défini par *Onsager* [15] puis en 1973, *Baxter* a généralisé ce modèle pour en faire le modèle bidimensionnel de Potts [16]. Par la suite, le modèle Blume-Capel a été développé pour étudier les transitions de phases magnétiques de premier ordre [17]. Ensuite, il a été généralisé par *M. Blume, V. J. Emery et R. B. Griffiths* au modèle Blume-Emery-Griffiths [18] pour décrire la séparation des phases et l'ordre des superfluides dans les mélanges $H_e^3 - H_e^4$. *Ashkin et Teller* ont introduit un modèle de réseau pour la définition d'un système à quatre composants. Ils ont suggéré le modèle Ashkin-Teller [19] qui possède de bonnes réalisations physiques pour un certain nombre de composés magnétiques tels que le sélénium adsorbé sur la surface du Nickel *Ni* [20].

La méthode de Monte Carlo en physique computationnelle est probablement l'une des approches numériques les plus importantes pour étudier des problèmes couvrant toutes les disciplines scientifiques imaginables [21]. Il s'agit en particulier des méthodes de Monte Carlo, qui constituent la classe la plus grande et la plus importante de méthodes numériques utilisées pour résoudre des problèmes de physique statistique [22]. Cette méthode de simulation utilise un algorithme statistique qui se base sur la génération de nombres aléatoires. Cela rappelle les jeux de hasard pratiqués dans les casinos de Monte Carlo. L'algorithme le plus célèbre et le plus largement utilisé de tous, l'algorithme de Métropolis, qui a été introduit par *Nicolas Métropolis* et ses collègues dans un article de 1953 [23]. Nous

utiliserons cet algorithme pour illustrer plusieurs concepts généraux impliqués dans un calcul Monte Carlo réel, y compris l'équilibration, la mesure des valeurs moyenne et le calcul des erreurs.

Le premier objectif de ce travail de thèse est d'étudier l'effet de l'interaction d'échange à quatre composants J_4 de surface et de volume sur les comportements critiques et les propriétés thermodynamiques d'un film mince magnétique du modèle non universel, qui se décrit comme une superposition de deux modèle Ising appeler (modèle Ashkin Teller (AT)), à spin-1/2 dans un réseau cubique simple. Nous étudierons également l'effet de l'épaisseur du film N , sur les comportements critiques du système.

Comme recherche complémentaire, le deuxième objectif de ce travail de thèse sera d'étudier principalement l'effet du champ cristallin D/J_{2b} et aussi l'effet du couplage à quatre spins (J_{4s}/J_{2b} , J_{4b}/J_{2b}) sur les diagrammes de phases et les propriétés magnétiques du modèle Ashkin Teller à spin-1, appliqué aux films minces ferromagnétiques, pour des différentes épaisseurs du film N , dans un simple réseau cubique.

Ce mémoire s'articule de la façon suivante: quatre chapitres, commençant par une introduction générale et se terminant par conclusion générale et les perspectives.

- ❖ **Le chapitre 1** : est consacré à faire des rappels sur le magnétisme, nous introduisons quelques concepts de base reliés aux différents comportements magnétiques d'un matériau, l'anisotropie magnétique, les différents types de température de transition, les transitions de phases, brisure de symétrie et paramètre d'ordre et classification de transition de phase.
- ❖ **Le chapitre 2** : décrit les notions de base sur les propriétés magnétiques des systèmes de dimension finie tel que les films minces magnétiques.
- ❖ **Le chapitre 3** : nous introduisons les différents modèles de spins, ainsi que les notions de base de la simulation Monte Carlo et nous finalisons par les analyses d'erreur et les conditions aux bords.
- ❖ **Le chapitre 4** : Nous étudions l'un des domaines les plus actifs de la physique moderne, c'est la recherche sur les films minces. Nous avons traité les comportements critiques et les propriétés magnétiques de ce système par un modèle magnétique avec le couplage d'échange à quatre composant, nommé le modèle Ashkin Teller, ce modèle est l'un des modèles les plus importants de la physique statistique, en raison de la richesse des phénomènes critiques révélés par ses diagrammes de phases bidimensionnelle et tridimensionnelle [24], en utilisant la simulation Monte Carlo.

Dans la partie A, nous nous intéressons à l'effet de couplage d'échange à quatre spin sur les comportements critiques et les propriétés magnétiques au point spécial du modèle Ashkin Teller appliqué aux films minces (article 1). Par la suite, dans la partie B, nous avons abordé le même système, mais nous avons traité ce système par le modèle Ashkin Teller à spin-1. D'ailleurs, on traite les effets du champ cristallin, le couplage à quatre composants et également l'effet de l'épaisseur du film N , sur les propriétés magnétiques et les diagrammes de phases des films minces par le modèle Ashkin Teller à spin-1

Bibliographique

- [1] S. ZRIOUEL, Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone. Thèse de doctorat. Université Mohammed V-Rabat. (2016).
- [2] A. Dallmeyer, Magnetism in thin films and quantum wires. (2001).
- [3] G. O. HERNANDEZ, Elaboration et étude des propriétés physiques de couches minces monocristallines d'alliage de Heusler à faible amortissement magnétique pour composants hyperfréquence. Thèse de doctorat. Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier. (2013).
- [4] P. Papon J. Leblond P.H.E. Meijer, The physics of phase transitions. Concepts and applications. 2nd rev.ed. Springer. (2010).
- [5] I. Dani, Contribution à l'étude théorique des propriétés magnétiques des matériaux cuprates multiferroïques en multicouches et nano-films. Thèse de doctorat. Université mohammed v- rabat. (2015).
- [6] I. BENSEHIL, Structure et magnétisme de couches minces. Thèse de doctorat. Université Ferhat Abbas Sétif 1. (2017).
- [7] A. V. Svalov, I. R. Aseguinolaza, A. Garcia-Arribas, I. Orue, J. M. Barandiaran, J. Alonso, M. L. Fernández-Gubieda, and G. V. Kurlyandskaya, Structure and Magnetic Properties of Thin Permalloy Films Near the "Transcritical" State.46 (2010) 33-336.
- [8] T. Thomson, Magnetic properties of metallic thin films. metallic films for electronic, optical and magnetic applications. Woodhead Publishing. (2014) 454-546.
- [9] M. Ohring, The materials science of thin films. 2nd edition. (2001) 794-817.
- [10] L. M. Falicov, D.T. Pierce, S.D. Bader, R. Gronsky, K. B. Hathaway, H. J. Hopster, D. N. Lambeth, S. S. P. Parkin, G. Prinz, M. Salamon, I. K. Schuller, R. H. Victora, Surface, Interface, and Thin-Film Magnetism. J. Mater. Res. 5 (1990) 1299.
- [11] A. Lyberatos, Monte Carlo models of the magnetization reversal in thin films with strong perpendicular anisotropy. J. Phys. D: Appl. Phys. 33 (2000) R117, and the references therein.
- [12] T. Kaneyoshi, Surface magnetism; magnetization and anisotropy at a surface . J. Phys.: Condens. Matter 3 (1991) 4497.
- [13] Y. YÜKSEL, An effective field theory study of layering transitions in Blume–Capel thin films in the presence of quenched random crystal fields. Physica A. 396 (2014) 9-18.
- [14] I. ZERGOUG, Modèle d'Ising dilué. Thèse de doctorat. Université d'Oran des Sciences et de la Technologie. (2015).

- [15] L. Onsager, Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.* 65 (1944) 117.
- [16] P. J. Baxter, Potts model at the critical temperature. *J. Phys.* 6 (1973) L445
- [18] M. Blume, Theory of the first-order magnetic phase change in UO₂. *Phys. Rev.* 141 (1966) 517.
- [19] M. Blume, V. J. Emery, R.B. Griffith's, Ising Model for the λ transition and phase separation in He₃-He₄ mixtures. *Phys. Rev. A* 4 (1971) 1071.
- [20] J. Ashkin and E. Teller, Statistics of two-dimensional lattices with four components. *Phys. Rev.* 64 (1943) 178.
- [21] H. G. Katzgraber, Introduction to Monte Carlo methods. arXiv preprint arXiv:0905.1629 (2009).
- [22] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, Monte Carlo methods in statistical physics chapter 1-4. Oxford University Press, Oxford. (1999).
- [23] N. Métropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21 (1953) 1087.
- [24] I. Dani, N. Tahiri, H. EZ-Zahraouy, A. Benyoussef, Effect of anisotropic Dzyaloshinskii–Moriya interactions on phase diagrams of the Ashkin–Teller model. *Physica A.* 455 (2016) 92-97.

Chapitre I

Généralités sur le magnétisme et les transitions de phase

Chapitre I

Généralités sur le magnétisme et les transitions de phases

Le magnétisme est un ensemble de phénomènes physiques dans lesquels les objets appliquent des forces d'attraction ou de répulsion à d'autres matériaux. Les moments magnétiques et les courants électriques des particules élémentaires fondamentales se trouvent à l'origine du champ magnétique qui génère ces forces. Les matériaux des deux premiers groupes du tableau périodique sont ceux qui ne présentent pas d'interactions magnétiques collectives et ne sont pas ordonnés magnétiquement. Les trois derniers groupes de matériaux ont un ordre magnétique à longue portée en dessous d'une certaine température critique. D'une manière générale, les matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques sont ceux que nous considérons comme magnétiques (comme le fer) [1]. Pour expliquer les différents types de magnétisme, la meilleure façon est de montrer comment les matériaux réagissent aux champs magnétiques [1]. Les interactions entre les champs et les particules rompent spontanément la symétrie du système lors d'une transition de phase. Le concept de symétrie et sa rupture, nous donnent la possibilité de classer les différentes phases, tout en définissant les transitions de phases qui les séparent.

Ce chapitre a pour but de rappeler quelques concepts de base reliés aux systèmes magnétiques. Nous commençons par introduire l'origine de magnétisme et aussi nous définissons les différents comportements magnétiques d'un matériau. Ensuite, nous décrivons l'anisotropie magnétique et les différents types de température de transition. Enfin, nous établissons les notions de base sur les transitions de phases, brisure de symétrie et paramètre d'ordre et classification des transitions de phases.

I-1 Origine de magnétisme

La détermination et l'explication de l'évolution de la structure magnétique d'un matériau exige de remonter à l'échelle atomique puis au cristal. L'origine du magnétisme se trouve dans les mouvements orbitaux des spins (moment magnétique), des électrons et dans la manière dont les électrons interagissent entre eux. Pour connaître l'origine du magnétisme atomique, il faut examiner le moment magnétique atomique provenant d'électrons non appariés occupant les orbitales localisées dans les couches incomplètes. Ce moment magnétique est défini par le moment orbital L lié à son mouvement orbital et un moment intrinsèque ou de spin S . Il existe deux sources de moment magnétique atomique ; la première est le mouvement des électrons dans une orbite autour du noyau et l'autre est le mouvement du spin des électrons autour de son axe (voir Figure I-1).

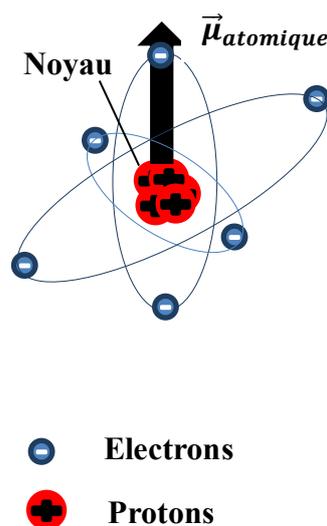


Figure I-1 : Trajectoire d'un électron autour du noyau.

Le magnétisme macroscopique de la matière est étroitement associé aux moments magnétiques des atomes constitutifs. Ensuite, le magnétisme atomique est de la même manière, lié à celui de ses constituants (électrons, neutrons, protons). En réalité, les moments magnétiques électroniques sont les principaux responsables du magnétisme atomique [4, 5].

Le moment magnétique électronique comprend deux moments d'origines diverses : le moment magnétique orbital, résultant du mouvement de la charge électrique portée par l'électron lors

de sa révolution autour du noyau et le moment magnétique de spin qui est d'origine quantique[5].

Pour un atome de plusieurs électrons, c'est la somme des moments magnétiques électroniques qui définit le moment magnétique atomique (qui peut être nul si les moments électroniques s'annulent). C'est l'interaction entre ces moments magnétiques atomiques qui détermine le magnétisme de la matière [7].

I-2 Différents comportement magnétique d'un matériau

Il y a plusieurs catégories de magnétisme, déterminées en fonction des caractéristiques de la réponse magnétique du matériau à l'application d'un champ magnétique externe [8, 9]. En effet, la nature magnétique du matériau est exprimée par sa susceptibilité χ . En général, une distinction est faite entre le magnétisme ordinaire, qui correspond à une faible sensibilité à l'application d'un champ magnétique externe, et le magnétisme extraordinaire [10].

Les matériaux magnétiques sont répartis dans les catégories suivantes en fonction du moment magnétique individuel de l'atome constituant le corps, de l'orientation et du comportement de tous ces moments dans la matière.

I-2-1- Magnétisme désordonné : magnétisme ordinaire

Le magnétisme est inextricablement lié à la mécanique quantique, parce qu'un système purement classique en équilibre thermique ne peut pas avoir de moment magnétique, y compris dans un champ magnétique. Il existe trois origines principales au moment magnétique d'un atome libre : le spin dont sont affectés les électrons ; leur moment cinétique orbital par rapport au noyau ; et la variation du moment orbital créée par l'application du champ magnétique. En effet, les deux premiers effets apportent une contribution paramagnétique, le troisième une contribution diamagnétique [11].

Il y a deux formes distinctes de magnétisme désordonné : le diamagnétisme et le paramagnétisme

a. Diamagnétisme

Le diamagnétisme signifie un faible magnétisme, qui se produit dans un matériau ne contenant pas de moments magnétiques atomiques [12]. Dans un matériau diamagnétique, le moment magnétique atomique est égal à zéro. L'application d'un champ magnétique externe à un matériau diamagnétique change le mouvement des électrons de ce dernier sur les orbites des électrons [13]. En plus, ces matériaux diamagnétiques se distinguent par des valeurs de susceptibilité faibles et négatives qui varient très peu avec la température. Leur aimantation

provoquée par un champ extérieur a une direction opposée à celle du champ inducteur [10]. Ensuite, l'aimantation et la susceptibilité sont illustrées à la Figure I-2 :

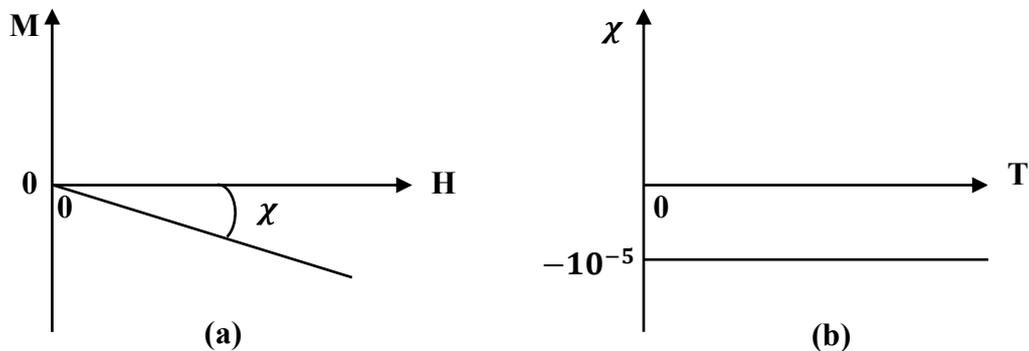


Figure I-2 : (a) Variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué et (b) La dépendance thermique de la susceptibilité pour les corps diamagnétiques.

Le diamagnétisme est un phénomène de très basse intensité qui est présent dans tous les matériaux, et qui cesse dès que le champ extérieur n'est plus appliqué (voir Figure I-3) [13].

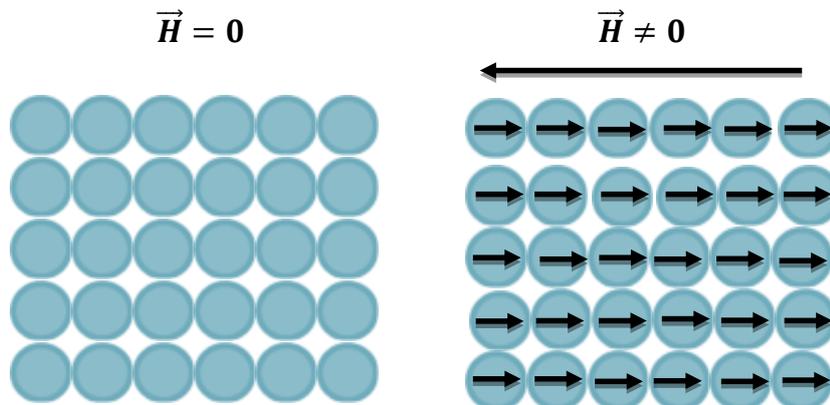


Figure I-3 : Schéma descriptif du diamagnétisme.

b. Paramagnétisme

Dans cette catégorie de matériaux, certains atomes ont un moment magnétique net en raison d'orbitales électroniques incomplètes. Mais, il n'y a pas d'interaction entre ces aimants atomiques. Un comportement paramagnétique peut se produire lorsque des atomes, des ions ou des molécules individuels possèdent un moment dipolaire magnétique élémentaire permanent. Ces moments sont orientés de manière aléatoire, de sorte que l'aimantation M est

égale à zéro. Les matériaux paramagnétiques ont une susceptibilité positive ($10^{-2}, 10^{-4}$) [14,15] (voir Figure I-4).

Lorsqu'un champ est appliqué à une substance paramagnétique, les moments magnétiques du spin ont tendance à s'ordonner et à s'orienter parallèlement à la direction du champ appliqué [16] (voir Figure I-5). En plus, Les moments magnétiques élémentaires des matériaux paramagnétiques s'orientent indépendamment les uns des autres. Le paramagnétisme, comme le diamagnétisme, est un phénomène qui dépend de l'action d'un champ extérieur, qui s'arrête avec son annulation [17].

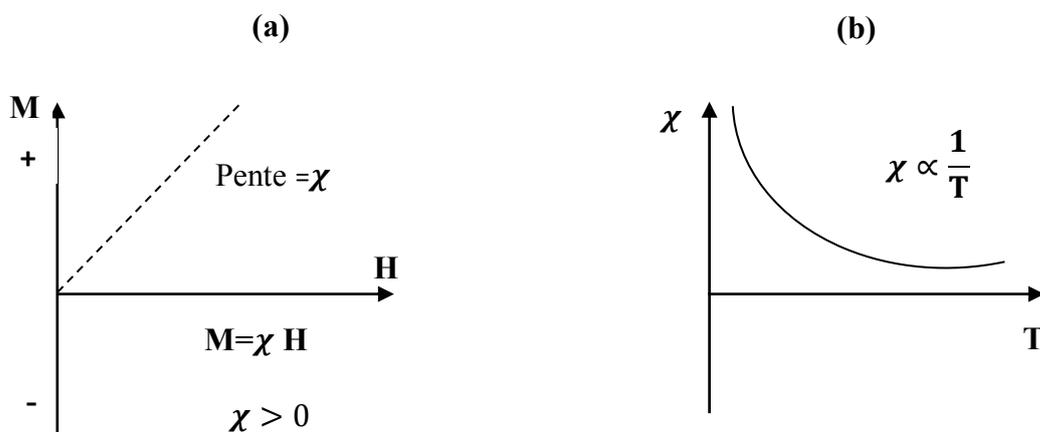


Figure I-4 : (a) L'aimantation en fonction du champ magnétique extérieur, (b) la susceptibilité en fonction de la température.

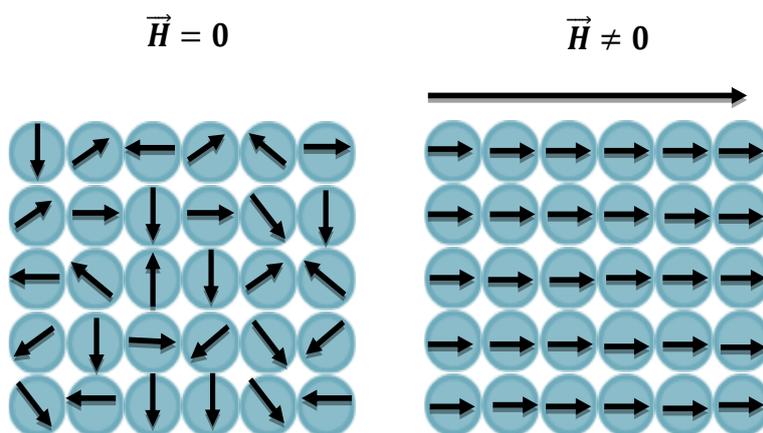


Figure I-5: Illustration explicative du paramagnétisme

I-2-2- Magnétisme ordonné : magnétisme extraordinaire

Les trois classes de magnétisme extraordinaire sont: le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme. En contraste avec le magnétisme désordonné, il se distingue par un réseau ordonné de moments magnétiques atomiques élémentaires. Cet ordre étant plus ou moins respecté en fonction de l'agitation thermique, tous les éléments qui présentent un magnétisme ordonné verront leurs propriétés magnétiques varier en fonction de la température. Il a un domaine de température valable pour chacune des trois catégories de magnétisme extraordinaire, en dehors de laquelle tous ces matériaux présentent un comportement paramagnétique, c'est-à-dire désordonné [10].

a. Origine de magnétisme ordonné

Quelques matériaux sont le siège d'un magnétisme ordonné, parce que ce type de magnétisme ne peut être établi que dans certaines conditions spécifiques, notamment au niveau du remplissage des couches électroniques. En effet, dans ce type de matériel, c'est l'orientation des spins électroniques qui est à l'origine de l'ordre. En outre, Ce phénomène est le résultat de l'interaction entre des moments magnétiques élémentaires [10].

Un terme énergétique supplémentaire nommé "énergie d'échange" est introduit.

Cette énergie peut être écrit comme suit :

$$E = -2JS_iS_j \quad (\text{I-1})$$

Où :

- E : Energie d'échange
- J : L'intégrale d'échange.
- S_iS_j : sont les spins de deux atomes voisins sur les sites i et j .

Deux cas peuvent se produire, en fonction de la distance entre les atomes et du degré de recouvrement des orbites des deux atomes (voir la Figure I-6) :

- ❖ Lorsque les moments atomiques élémentaires sont dans le même sens, l'énergie d'échange est minimale : c'est ferromagnétisme.
- ❖ Lorsque les moments atomiques élémentaires sont en sens inverse, l'énergie d'échange est minimale : c'est l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme.

Le magnétisme ordonné correspond à la minimisation de l'énergie magnétique avec un alignement électronique du spin [10].

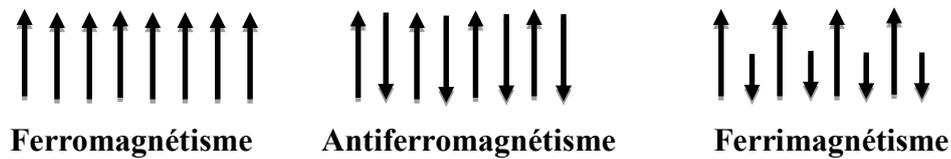


Figure I-6 : Les diverses catégories de magnétisme ordonné.

b. Ferromagnétisme

Certains matériaux à forte susceptibilité positive peuvent également présenter une forte aimantation de rémanence (aimantation qui reste après la suppression du champ appliqué). Cette classe de matériaux est connue sous le nom d'ordre ferromagnétique [18]. En effet, les matériaux ferromagnétiques se caractérisent par une aimantation et un ordre magnétique spontané, même en l'absence de champ magnétique appliqué (Figure I-7) [17]. Ce type de magnétisme résulte de l'alignement de moments magnétiques permanents, ces moments sont dirigés parallèlement les uns aux autres par une interaction réciproque appelée couplage ferromagnétique. Par conséquent, les matériaux ferromagnétiques montrent une polarisation spontanée. Ils ont également une température de Curie T_c , au-dessus de laquelle ils deviennent paramagnétiques. Pour une utilisation industrielle, le fer, le cobalt et le nickel sont les matériaux ferromagnétiques les plus courants pour la fabrication d'isolateurs optiques [1].

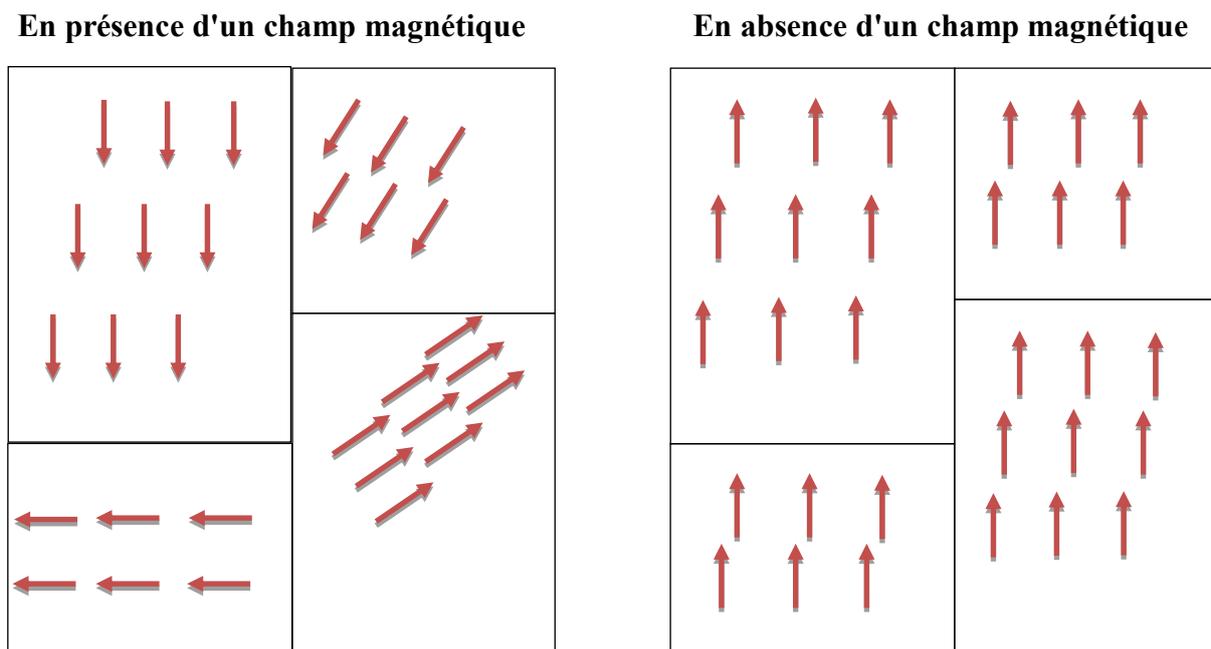


Figure I-7 : Répartition des moments magnétiques dans un matériau ferromagnétique en présence et en l'absence d'un champ magnétique appliqué.

c. Antiferromagnétisme

Cette famille de matériaux est très similaire à celle des matériaux ferromagnétiques mais se caractérise par une subdivision dans leurs réseaux appelés sous-réseaux A et B [19]. Dans l'antiferromagnétisme, les spins voisins sont alignés de manière antiparallèle les uns aux autres (Figure I-8), de sorte que leurs moments magnétiques s'annulent. Ensuite, l'interaction entre ces moments nommée "interaction d'échange négative". Par conséquent, un antiferromagnétique ne produit aucune aimantation spontanée et ne montre qu'un faible magnétisme. En outre, la susceptibilité magnétique relative des matériaux antiferromagnétiques (χ), varie de 10^{-5} à 10^{-2} , la même que pour les paramagnétiques [12]. De nombreux oxydes et halogénures de métaux de transition, le chrome et le manganèse sont des exemples d'éléments pouvant montrer un comportement antiferromagnétique [10].

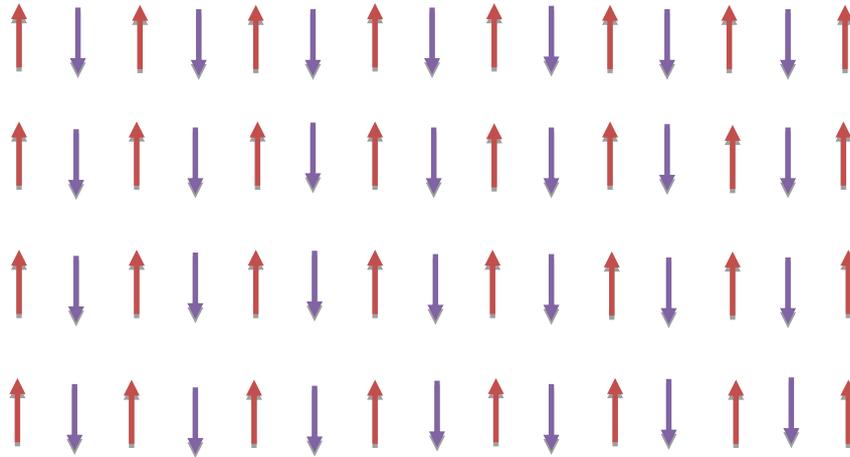


Figure I-8 : Alignement antiparallèle des moments atomiques dans les matériaux antiferromagnétiques.

d. Ferrimagnétisme

La compensation des moments magnétiques dans les matériaux ferrimagnétiques n'est pas complète, contrairement aux matériaux antiferromagnétiques. Il existe donc une aimantation spontanée. Elle est cependant plus basse que celle constatée dans le cas des matériaux ferromagnétiques [13]. Il est possible de distinguer deux familles de sites (sous-réseaux A et B) dans la structure cristalline de ces matériaux, occupés par des ions ayant des moments magnétiques m_A et m_B , respectivement [1]. Les interactions les plus fortes se traduisent par un alignement antiparallèle des spins entre les sous-réseaux A et B qui n'ont pas la même aimantation (Figure I-9) [15, 18]. Les matériaux ferrimagnétiques les plus courants sont généralement des oxydes ou des céramiques isolantes, le plus connu étant l'hexa ferrite de baryum ($BaFe_{12}O_{19}$) [10].

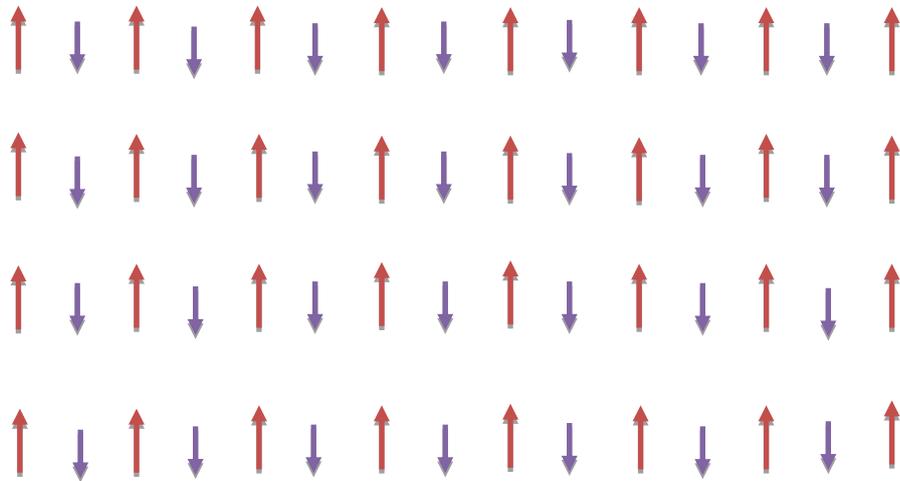


Figure I-9 : Structure de spin d'un ferrimagnétique.

I-3 Anisotropie magnétique

Les matériaux ferromagnétiques cristallins présentent les directions de l'aimantation, qu'elles soient faciles ou difficiles. C'est ce qu'on appelle l'anisotropie magnétique [20,21]. L'ordre ferromagnétique est également stabilisé par différents types d'anisotropies magnétiques, ce qui fait que certaines directions de l'aimantation sont énergétiquement plus préférables que d'autres. En principe, *l'interaction dipolaire magnétique* et *l'interaction spin-orbite* sont les deux sources principales qui provoquent l'anisotropie magnétique. Par conséquent, les deux sources seront discutées comme suit :

- ❖ *L'interaction dipolaire*: est une interaction d'ordre à longue portée et dépend de la forme de l'échantillon. Cette interaction est très faible entre les atomes, mais pour les structures plus grandes, elle peut dominer le comportement magnétique dans les matériaux magnétiques [20]. Pour un film mince, on peut montrer que la contribution énergétique de l'anisotropie de l'interaction dipolaire se réduit à [19]:

$$E_d = \frac{1}{2} \mu_0 M_S^2 \cos^2(\theta) \quad (\text{I-2})$$

D'où :

- M_s : est l'aimantation de saturation.
 - θ : l'angle entre l'aimantation et le film normal.
- ❖ L'interaction de l'orbite de spin : elle décrit l'échange de couplage entre le spin des électrons et leur mouvement orbital.

L'anisotropie magnétique peut être divisée en catégories, l'anisotropie magnétocristalline, l'anisotropie de surface et l'anisotropie d'échange :

a. Anisotropie magnétocristalline

L'anisotropie magnétocristalline est le rapport entre le réseau cristallin et l'aimantation dans un solide ferromagnétique. Elle provient du couplage spin-orbite. Les moments magnétiques des atomes dans un monocristal sont orientés de préférence le long d'un axe dit *de facile aimantation* [4, 5]. Cette configuration réduit l'énergie d'interaction entre les moments magnétiques et le réseau cristallin des ions positifs. En effet, l'axe où cette énergie d'interaction est la plus élevée est l'axe de *l'aimantation difficile*.

La magnitude qui permet de quantifier cette anisotropie est le *champ d'anisotropie magnétocristalline* H_A . C'est le champ requis pour déplacer l'aimantation dans le cristal de la direction *d'aimantation facile* à la direction *d'aimantation difficile* [13]. Ce type d'anisotropie est important pour certains ferromagnétiques tels que le fer et le cobalt.

Il existe deux types différents d'anisotropie magnétocristalline : l'anisotropie magnétocristalline uniaxe et cubique.

➤ L'anisotropie uniaxe se trouve dans les structures hexagonales (exemple le Cobalt).

L'énergie d'anisotropie magnétocristalline uniaxe est décrit comme suite :

$$E = k_1 \sin^2(\theta) + k_2 \sin^4(\theta) \quad (\text{I-3})$$

La température ambiante pour le Cobalt est donnée par :

$$k_1 = 4.1 \times 10^5 \text{ Jm}^{-3} \text{ et } k_2 = 1.0 \times 10^5 \text{ Jm}^{-3}$$

D'où :

θ : est l'angle entre aimantation M et l'axe de facile aimantation. k_1, k_2 : sont les constantes d'anisotropie [22].

➤ Un autre type d'anisotropie magnétocristalline est anisotropie magnétocristalline cubique. Cependant, la courbe d'aimantation du Fer en fonction du champ magnétique

appliqué est bien claire dans la Figure I-10, on peut observer que la direction (111) est une direction l'aimantation difficile et la direction (100) est une direction de l'aimantation facile. Le fer est un cristal cubique, les directions de l'aimantation facile sont les bords du cube.

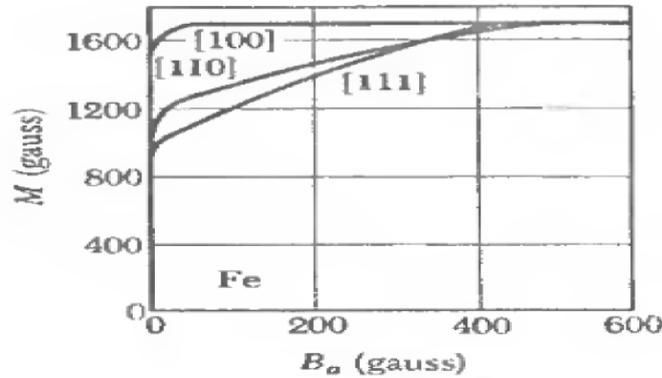


Figure I-10 : Schéma descriptive des courbes d'aimantation du Fer (Fe) dans différentes directions cristallographiques [17].

On peut exprimer l'énergie (par unité de volume) de l'anisotropie du fer dans une direction quelconque de direction des cosinus α_1, α_2 and α_3 par rapport aux bords du cube :

$$E_k = k_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + k_2(\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2) \quad (\text{I-4})$$

k_1, k_2 : sont définis par les constantes d'anisotropie cubique, ces constantes de Fe à $T = 293^\circ\text{K}$ sont données par :

$$k_1 = 4.8 \times 10^5 \text{ (erg/cm}^3\text{)} \text{ et } k_2 = 0.5 \times 10^5 \text{ (erg/cm}^3\text{)}.$$

b. Anisotropie de surface

La rupture de la symétrie et la réduction de la coordination du plus proche voisin entraînent l'apparition d'une anisotropie de surface, reconnue pour la première fois par Néel [23]. L'origine de l'anisotropie de surface est associée au comportement des atomes à la surface. Dans les petites nanoparticules magnétiques ou les films minces, les effets de surface peuvent être une source majeure d'anisotropie, car la contribution magnétique de la surface devient plus importante à mesure que la taille des particules ou l'épaisseur du film diminue [24, 25].

La contribution de la surface à l'énergie d'anisotropie magnétique est donnée par :

$$E_{\text{surface}} = \frac{2K_s}{t} \sin^2(\theta) \quad (\text{I-5})$$

Avec :

- K_s : la constante d'anisotropie de surface.
- t : l'épaisseur de la couche mince.
- θ : l'angle entre l'aimantation M et la normale à la surface.

c. *Anisotropie d'échange*

Si une couche antiferromagnétique est déposée sur une couche ferromagnétique (AF/F), une anisotropie d'échange se produit à l'interface. *Meiklejohn* et *Bean* ont constaté pour la première fois cette anisotropie sur des particules de cobalt (couplage ferromagnétique) oxydées en surface en C_oO (couplage antiferromagnétique) [26]. Les systèmes (F/AF) sont caractérisés par une courbe d'hystérésis décalée en fonction du champ appliqué. Le déplacement du cycle d'hystérésis de chaque côté de l'axe l'aimantation (à l'interface d'une couche ferromagnétique et une couche antiferromagnétique) a été analysé comme un effet de surface [27].

I-4 Différent types de température de transition

Le changement de température influence fortement l'ordre magnétique des matériaux. Par conséquent, un matériau a des comportements magnétiques différents selon sa température. Les différents ordres de température sont : la température de Curie, la température de Néel ainsi que la température de compensation.

a. *Température de Curie*

L'ordre d'un matériau ferromagnétique ou ferrimagnétique, disparaît brusquement au-dessus d'une température critique T_c appelée température de Curie. La température de Curie est une température essentielle pour un matériau ferromagnétique [28]. Si un matériau ferromagnétique a une température supérieure à sa température de Curie, alors le matériau devient paramagnétique. En d'autres termes, c'est la température qui sépare la phase ferromagnétique de la phase paramagnétique. Par conséquent, si un matériau ferromagnétique a une température inférieure à sa température de Curie, alors le matériau a une aimantation spontanée nette, et cela signifie que le matériau devient ferromagnétique, ou magnétique. Les interactions ferromagnétiques en dessous de la température de Curie ont tendance à aligner en parallèle les moments magnétiques voisins dans le matériau [28]. Selon le matériau, la valeur de la température de Curie varie. Par exemple, les températures de Curie pour le fer, le cobalt, le nickel et la magnétite sont respectivement de 1044K, 1388K, 628K et 856K [29].

b. Température de Néel

Dans un matériau antiferromagnétique, la température de Néel T_N , est la température à laquelle le matériau présente une transition de phase vers un comportement paramagnétique. Elle est similaire à la température de Curie en ce qui concerne les matériaux ferromagnétiques. Le matériau retrouve ses propriétés antiferromagnétiques lorsque la température est inférieure à la température de Néel; c'est-à-dire que c'est la température qui distingue l'état antiferromagnétique de l'état paramagnétique. La transition de phase se traduit par l'apparition de pics dans le graphique de susceptibilité car les matériaux antiferromagnétiques ne possèdent pas une aimantation spontanée [29, 30].

c. Température de Compensation

Certains matériaux ferrimagnétiques peuvent avoir, dans certaines conditions, une température de compensation, T_{comp} . C'est la température à laquelle l'aimantation totale du système disparaît en dessous de la température critique. Elle semble due à la nature de l'interaction d'échange entre les deux moments inégaux des sous-réseaux A et B qui constituent le matériau ferrimagnétique. Les moments magnétiques des deux sous-réseaux sont antiparallèles et ont la même valeur absolue du moment magnétique, à la température de compensation [31, 32]. Par conséquent, la température de compensation peut être obtenue par le point d'intersection des valeurs absolues de l'aimantation des deux sous-réseaux A et B.

Au point de compensation, nous devons avoir :

$$|m_A(T_{comp})| = |m_B(T_{comp})| \quad (\text{I-6})$$

Et

$$\text{sign}|m_A(T_{comp})| = -\text{sign}|m_B(T_{comp})| \quad (\text{I-7})$$

I-5 Transition de Phase

Le phénomène physique qui provoque le transfert d'un système d'une phase (de configuration donnée) à une autre phase (de configuration différente de la phase initiale) est la transition de phase qui est une modification qualitative et quantitative des propriétés du système étudié, causée par la variation d'un paramètre externe particulier (température, pression, champ magnétique) [1]. Cette transition se produit quand le paramètre arrive à une valeur seuil (température critique, pression critique, champ critique, etc...). En physique de la matière condensée, le phénomène de transition de phase joue un rôle important, pour différentes raisons : sa fréquence et sa diversité, son aspect spectaculaire et l'intérêt des problèmes conceptuels qui lui sont liés [33].

Des transitions de phases se manifestant par l'apparition de nouvelles propriétés de la matière, par exemple le ferromagnétisme et la supraconductivité, ont également été observées ; de nouvelles phases ou de nouveaux états dont les propriétés ont des applications importantes, apparaissent en dessous d'une température critique. Ces transitions de phase ne sont pas toujours induites par une modification des arrangements atomiques ou moléculaires mais, dans le cas du ferromagnétisme et de la supraconductivité, par une modification des propriétés électroniques [34].

L'un des exemples fondamentaux les plus célèbres de transition de phase est celle de l'eau, qui permet de passer de l'état solide à l'état liquide et de l'état liquide à l'état gazeux (voir la figure I-11). Cette Figure montre le diagramme de phase de la pression en fonction de la température, présentant les domaines de présence des trois phases (*solide, gaz, liquide*). Il y a deux points particuliers : le point triple T_t , à l'intersection des trois domaines et le point critique (P_c, T_c) , point d'arrêt à la limite entre les domaines liquide et gazeux. En tournant autour du point critique, le passage de la phase liquide à la phase gazeuse peut se faire de manière continue sans transition discontinue [35].

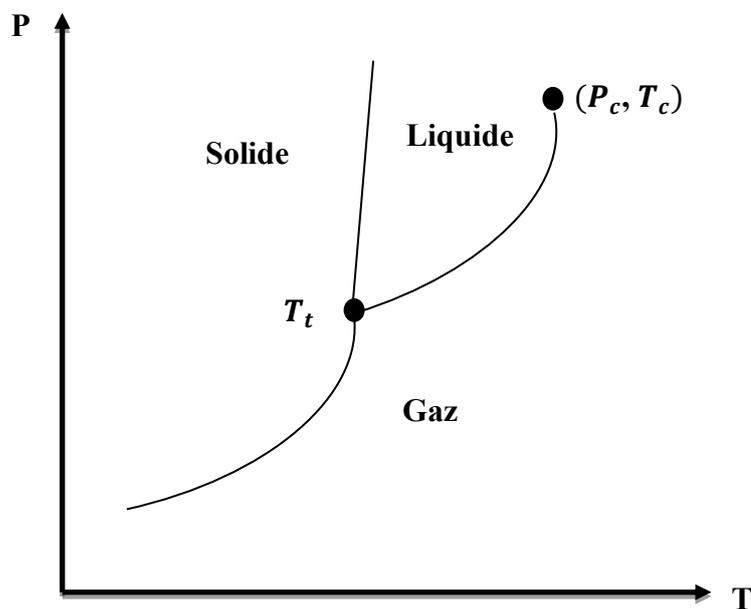


Figure I-11 : Diagramme de phase d'un fluide (l'eau) de la pression en fonction de la température, avec trois phases stables : solide, liquide et gaz. La ligne de transition liquide-gaz comporte un point d'arrêt.

Un autre exemple important de transition de phase un peu plus simple à étudier, se produit lorsqu'un *champ magnétique* est appliqué [36]. La Figure I-12, montre un diagramme de

phase (champ magnétique, température) d'un corps qui possède une transition ferromagnétique. Ce diagramme montre une limite sur l'axe $H = 0$ avec un point d'arrêt, également appelé *point critique*. A haute température, dans un champ nul, on constate une phase désordonnée, nommée *paramagnétique* sans aimantation. Une transition se produit au point critique $T = T_c$ et pour $T < T_c$, il y a une phase ordonnée, appelée *ferromagnétique*, avec une aimantation spontanée [35]. Il y a une ressemblance avec la transition liquide-gaz, H et P jouant des rôles similaires.

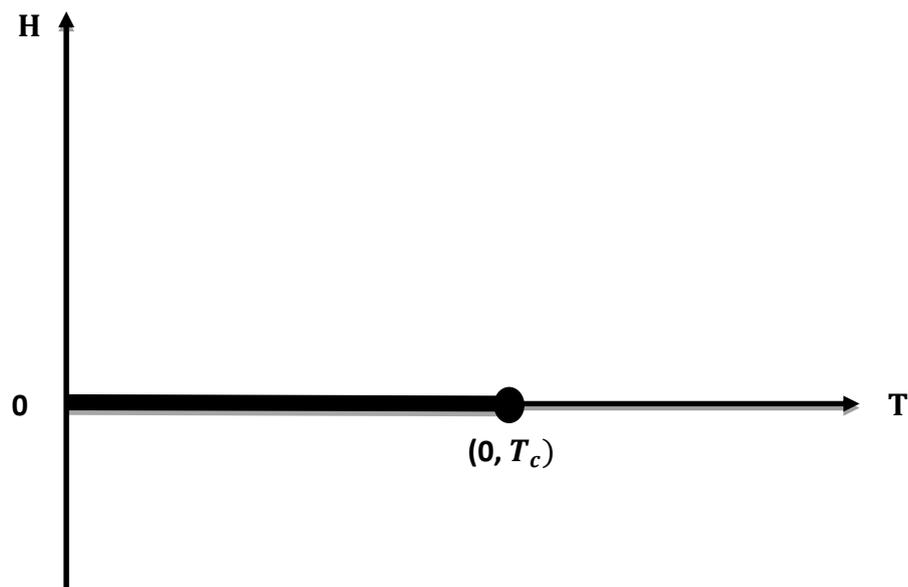


Figure I-12 : Diagramme de phase de champ magnétique en fonction de la température d'un ferromagnétique. Sur l'axe $H = 0$ et pour une température au-dessous de la température critique, il y a une ligne de discontinuité.

La Figure I-13, présente un diagramme de phase d'un corps qui montre une transition antiferromagnétique (avec une aimantation alternée dans la phase ordonnée) de la dépendance thermique de champ magnétique. Ce diagramme montre deux zones séparées par une ligne (une ligne épaisse et une ligne fine) : quand on traverse la zone épaisse, on note un saut de l'aimantation alternée ; quand on traverse la ligne fine, il ne se produit aucun saut. Cette dernière ligne est une ligne de point critique (puisque'il n'y a pas de saut) [35]. Ces deux lignes se rencontrent en un point appelé un point tricritique.

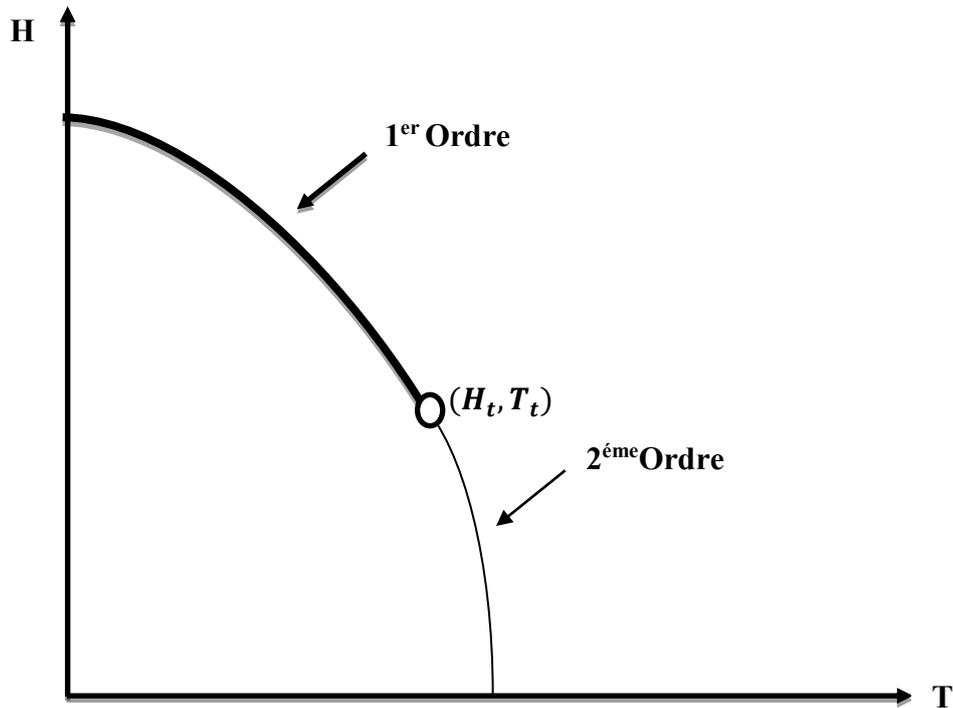


Figure I-13 : Illustration de diagramme de phase présentant un point tricritique. Pour un matériau antiferromagnétique, l'ordre de transition varie selon l'effet d'un champ magnétique.

I-6 Brisure de symétrie et paramètre d'ordre

Les transitions de phases comportent fréquemment un processus de rupture de symétrie [37]. Les phases à haute température sont généralement plus symétriques que les phases à basse température, en raison de la brisure spontanée de la symétrie. Il y a plusieurs types de rupture de symétrie en physique de la matière condensée [37], notamment la rupture du réseau qui se produit pendant la transition entre un fluide et un solide cristallin, la brisure d'inversion due à la transition ferromagnétique, et la brisure de symétrie de jauge qui se produit dans les supraconducteurs.

Afin de décrire les transitions de phase avec un changement de symétrie, Landau a présenté la notion de paramètre d'ordre qui est considéré comme une mesure du degré d'ordre de l'état d'un système physique pendant une transition de phase [38]. Par conséquent, dans la phase symétrique (désordonnée), le paramètre d'ordre est uniforme et égal à zéro au-dessus de la température critique, et dans la phase moins symétrique (ordonnée), le paramètre d'ordre est non uniforme et non nul au-dessous de la température critique. Théoriquement, les paramètres

d'ordre viennent de la brisure de symétrie. Ce paramètre d'ordre est défini de manière différente selon les divers types de systèmes physiques (voir le Tableau I-1) [38].

Nous présentons quelques exemples de paramètres d'ordre dans le Tableau I-1. La détermination de ce paramètre est une question phénoménologique qui n'est pas toujours évidente. Les paramètres d'ordre peuvent être établis pour les transitions qui ne trompent pas la symétrie. En effet, les transitions de phase, comme celles des supraconducteurs, permettent d'avoir des paramètres d'ordre avec plusieurs degrés de liberté, par exemple le paramètre d'ordre peut être un vecteur, un nombre complexe ou même un tenseur, dont la grandeur tend vers zéro à la transition de phase [39].

Tableau I-1 : Certains exemples de paramètres d'ordre utilisés en fonction de la nature de la transition.

Nature de la transition	Paramètre d'ordre
Gaz-liquide	Masse volumique
Para-ferromagnétique	Aimantation
Para-antiferromagnétique	Aimantation des sous réseaux
Para-ferroélectrique	Polarisation
Supraconductivité	Gap supraconducteur
Superfluidité	Fonction d'onde superfluide

I-7 Classification des transitions de phases

Deux classes de transitions de phase peuvent être différenciées : les transitions *Ehrenfest* et les transitions *Landau*.

a. Classification d'Ehrenfest (1880 – 1933)

Plus généralement, le physicien *P. Ehrenfest* a proposé une classification des transitions de phases basée sur les potentiels thermodynamiques en 1933 [34]. *Ehrenfest* a été le premier à classer les transitions de phases en fonction de la continuité des dérivés d'ordre d'énergie libre. *Ehrenfest* a proposé de distinguer deux types de transition de phase : transition du premier ordre et transition du second ordre [40].

❖ Transition du premier ordre

Les transitions de phases du premier ordre s'accompagnent de discontinuités des grandeurs thermodynamiques (ex. l'entropie S) liées aux premières dérivées des potentiels thermodynamiques [34] :

Considérant le potentiel thermodynamique :

$$G = U - TS + PV \quad (\text{I-8})$$

- G : Energie de Gibbs
- U : Energie interne
- T : La température thermodynamique
- S : L'entropie
- P : La pression
- V : Le volume

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p ; V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T ; H = \frac{\partial(G/T)}{\partial(1/T)} \quad (\text{I-9})$$

- H : Enthalpie

Dans 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) [34]. En effet, les transitions entre les trois états standard (solide, liquide, gaz) représentent des transitions de phases de premier ordre, parce que la première dérivée de l'énergie libre par rapport au potentiel chimique est discontinue [37].

❖ Transition du second ordre

La transition de phase du second ordre c'est la transition pour lesquels les potentiels thermodynamiques et leurs dérivés du premier ordre sont continus, par exemple : le premier dérivé de l'énergie libre est continu, mais le second dérivé est par contre discontinu. Pendant cette transition, le changement d'une phase à l'autre est continu. Par exemple, dans le cas de la transition de phase entre les états ferromagnétique et paramagnétique [37].

b. *Classification de Landau(1908 – 1968)*

L. D. Landau a noté en 1937 qu'une transition de phase sans chaleur latente s'accompagnait d'un changement de symétrie (sauf la transition liquide / gaz au point critique, qui est spéciale). Nous disons que la symétrie a été rompue dans la transition : en dessous du point de Curie, le matériau n'est invariant qu'en raison de la rotation autour d'un axe orienté dans la direction de l'aimantation [34]. Les notions de symétrie sont donc très utiles dans le cadre de l'étude des phénomènes de transition de phase. Landau a lié la notion de paramètre d'ordre à ces considérations sur les modifications ou ruptures de symétrie qui accompagnent un phénomène de transition de phase. En général, le paramètre d'ordre est une quantité physique de caractère étendu qui est nulle dans la phase la plus symétrique (ou la plus désordonnée) et non nulle dans la phase la moins symétrique (ou ordonnée) [37, 34].

Landau il a suggéré deux sortes de transitions de phase :

- ❖ Les transitions n'ayant aucun paramètre d'ordre dont les groupes de symétrie des deux phases ne sont pas intégrés l'un à l'autre, elles sont donc toujours du premier ordre (avec chaleur latente) au sens *d'Ehrenfest* [37].
- ❖ Les transitions pour lesquelles un paramètre d'ordre est défini et pour lesquelles le groupe de symétrie de la phase la moins symétrique est un sous-groupe du groupe de symétrie de la phase la plus symétrique (désordonnée). Lorsque le paramètre d'ordre est discontinu à la transition, il est de premier ordre au sens *d'Ehrenfest* ; lorsqu'il est continu à la transition, il est de second ordre (sans chaleur latente) [34].

I-8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé très sommairement quelques notions de bases de magnétisme, les différents comportements magnétiques d'un matériau, et en particulier les matériaux ferromagnétiques qui se caractérisent par une aimantation et un ordre magnétique spontané, même en absence du champ magnétique appliqué, ce type de corps ferromagnétiques, ses moments magnétiques sont orientés parallèlement.

Ensuite, nous avons présenté une description complète de l'anisotropie magnétique dans les matériaux magnétiques, et les différents types de température de transition dans lequel le changement de température influence fortement l'ordre magnétique des matériaux.

Les transitions de phases qui provoquent le transfert d'un système d'une phase à une autre phase sont aborder à la fin du chapitre. Ces transitions impliquent souvent un processus de

rupture de symétrie tandis que les phases à haute température sont généralement plus symétriques que les phases à basse température.

Il nous a semblé intéressant de consacrer le prochain chapitre sur des rappels des notions de base des propriétés magnétiques des systèmes de taille finie tels que les films minces magnétiques.

Bibliographies

- [1] I. DANI, Contribution à l'étude théorique des propriétés magnétiques des matériaux cuprates multiférociques en multicouches et nano-films. Thèse de doctorat. Université Mohammed v- Rabat,2015.
- [2] W. Nolting et A. Ramakanth, Quantum Theory of Magnetism. Springer.(2009). P.752.
- [3] J. Crangle, Solid-State Magnetism. Springer.(2012).
- [4] M. L. Sands et R.P. Feynman, Cours de physique de Feynman. London : Addison-Wesley.(1970).
- [5] M. L. Sands et R.P. Feynman, Cours de physique de Feynman2. London: Addison-Wesley.(1975).
- [6] S. Blundell, Magnetism in condensed matter. 1^{ère} édition. Oxford University Press. (2001). P. 251.
- [7] S. Chikazumi, Physics of ferromagnetism. Oxford: Clarendon Press. (1997).
- [8] D. Jilles. Introduction to magnetism and magnetic materials. LONDON: Chapman & Hall, (1991). p.440.
- [9] D. Jilles. Introduction to magnetism and magnetic materials. Chapman and Hall, (1989).
- [10] A. GUENDOZ, Etude des propriétés structurales et magnétiques des couches ferromagnétiques par microscopie à champ proche et effet Kerr magnéto-optique. Thèse de doctorat. Université d'Oran1-Ahmed Ben Bella.(2011).
- [11] C. Kittel, Physique de l'état solide. Dunod Université, 5^{ème}édition, BORDAS, Paris, (1983).
- [12] S. Chikazumi, and C. D. Graham. Physics of Ferromagnetism 2e. No. 94. Oxford University Press on Demand. (2009).
- [13] R. Nouar, Etude et réalisation de couches minces à caractère magnétique par pulvérisation cathodique magnétron. Application pour des capteurs de type GMI. Thèse de doctorat. Université de Technologie de Belfort-Montbéliard,(2009).
- [14] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University Press, (2010). P. 633.
- [15] R. Thompson, Environmental magnetism, Springer, (2012).
- [16] R. Thompson, F. Oldfield, Environmental magnetism, 1st edition, London, (1986).P. 228-237
- [17] I. BENSEHIL, Structure et magnétisme de couches minces. Thèse de doctorat. Université de Setif. (2017).
- [18] K. H. J. Buschow et F. R. de Boer, Physics of Magnetism and Magnetic Materials. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers. (2003).
- [19] M. Arejda, Theoretical study of the magnetic properties and the magnetocaloric effect of materials: Spintronics materials (Dendrimer models) and magnetic refrigeration materials (MnAs/MnBi). Thésés de Doctorat. Université Mohammed V Rabat. (2017).
- [20] R. Knut, New Materials for spintronics. Thèse de doctorat. University of Uppsala.(2012).
- [21] F. Gustavsson, Properties of Fe/ZnSe Heterostructures. Thèse de doctorat. University of Uppsala.(2002).
- [22] A. H. Morrish, The Physical Principles of Magnetism, R. E. Krieger Publishing Company. Huntington. New York.(1980).
- [23] L. Néel. Anisotropie magnétique superficielle et sur structures d'orientation.

Journal de Physique et Le Radium, 15 (1954) 225-239.

[24] C. P. S. da. Silva. Magnetic thin films for spintronic applications. Thèse de doctorat. Universidade de Lisboa (Portugal).(2017).

[25] U. Gradmann. Surface magnetism. J. Magn. Magn. Mater, 100(1991) 481-496.

[26] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, New Magnetic Anisotropy. Phys. Rev.105 (1957) 904.

[27] D. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Bagus, E. Kay. Simple model for thin ferromagnetic films exchange coupled to an antiferromagnetic substrate. J. Appl. Phys. 62 (1987) 3047-3049.

[28] K. E. Geckeler et H. Nishide (eds.) Advanced nanomaterials. John Wiley and Sons. (2009).

[29] D. Gubbins et E. H. Bervera (ed.). Encyclopedia of geomagnetism and paleomagnetism. Springer. (2007).

[30] C. Kittel, Introduction to solid state physics. 8th edition. Wiley.(2005). P.703.

[31] J. Bigot, W. Hubner, T. Rasing et R. Chantrell, Ultrafast Magnetism I. Springer.(2015).

[32] A. Goldman, Modern ferrite technology. 2nd edition. Springer.(2006).

[33] A. K. Hartmann and M. Weigt, Phase Transitions in Combinatorial Optimization Problems: Basics, Algorithms and Statistical Mechanics, Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaS. (2005). P. 360.

[34] P. Papon, J. Leblond, and P. H. E. Meijer. The Physics of phase transitions. Concepts and Applications. Second Revised Edition. Springer. (2010). P. 419.

[35] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions, Oxford University Press, New York (1992).P.161.

[36] V. Mastropietro. Non-perturbative renormalization. World Scientific. 2008. P.303.

[37] F. Jedrzejewski, Modèles Aléatoires et Physique Probabiliste. 1^{ère} édition. Springer. (2009). P. 568.

[38] S. Zriouel, Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone. Thèse de doctorat. Université Mohammed V-Rabat, (2016).

[39] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics. Cambridge University Press. (1996). P. 252.

[40] J. S. Blundell et K. M. Blundell, Concepts in thermal physics. 2^{ème} édition. Oxford University Press. (2009). P.516.

Chapitre II

Magnétisme des films minces

Chapitre II

Magnétisme des films minces

L'étude des films minces magnétiques constitués de diverses structures magnétiques en couches ou super-réseaux a fait l'objet d'une attention intense pour des raisons à la fois théoriques et expérimentales [1]. Ces matériaux sont constitués de plusieurs couches de différentes substances magnétiques, il existe donc un potentiel élevé d'avancées technologiques dans le stockage et la récupération d'informations et la synthèse de nouveaux aimants pour une variété d'applications. Outre, les matériaux ferromagnétiques et antiferromagnétiques jouent également un grand rôle dans ces phénomènes. Les substrats antiferromagnétiques ont une part importante dans les capteurs magnétiques (tête de lecture des disques durs, mémoires magnétiques permanentes) [2].

Les films magnétiques sont les systèmes les plus étudiés qui présentent des propriétés nano magnétiques. La principale application du nano magnétisme, à savoir l'enregistrement magnétique, consiste à lire et à écrire avec des têtes qui sont fabriquées avec des multicouches de dimensions nanométriques, des informations stockées dans des disques durs et des supports flexibles qui peuvent être recouverts de films minces magnétiques [3].

Dans ce chapitre, nous proposons de donner une description générale des films minces magnétique. Nous présenterons une généralités des films minces qui ont attiré beaucoup d'attention à la recherche au cours des dernières décennies. Ensuite, nous parlerons sur les propriétés magnétiques de base relatives à ces matériaux. En outre, nous discuterons également les effets de surface et de taille, les interactions d'échanges, la dimensionnalité et le comportement critique. Enfin, nous exposerons les différents d'applications des films minces magnétiques.

II-1 Généralités sur les films minces magnétique

Les propriétés magnétiques d'un système de taille finie, tels que les films minces (qui sont des couches de matériau minces allant de fractions de nanomètre "monocouche" à plusieurs micromètres d'épaisseur), ont récemment suscité beaucoup d'intérêt, que ce soit théorique où expérimentale [4-10]. La technologie suscite un regain d'intérêt pour le magnétisme en couches minces. Le magnétisme en couches minces est un sujet d'actualité de phénomènes critiques [11, 12]. Ces systèmes peuvent être utilisés comme modèles pour étudier les effets de la taille magnétique, lorsque leur épaisseur est faible [13] et peut être considéré comme un système quasi bidimensionnel lorsqu'il est très mince. Dans une géométrie de film mince, il a été découvert expérimentalement que la température de Curie et le moment magnétique moyen par atome augmentent avec l'épaisseur croissante du film [14,15]. La dépendance de l'épaisseur par rapport à la température de Curie a également été mesurée dans des films de *Co* [16], *Fe* [17] et *Ni* [18]. Les matériaux ferromagnétiques en volume où les films épais ont des valeurs de la température critique T_c bien définies qui dépendent exclusivement de leur composition [19].

Les films minces ont attiré beaucoup d'attention de la recherche au cours des dernières décennies et devraient jouer un rôle très important dans le développement de la nanoscience et de la nanotechnologie [20]. Ces films sont magnétiquement doux à une épaisseur de quelques dizaines de nanomètres [21]. Par conséquent, de nombreux produits de stockage d'information de haute technologie ont émergé, tels que le disque dur avec des têtes de lecture et les dispositifs de stockage à mémoire magnétique présentant les avantages d'une faible consommation d'énergie, d'un anti-rayonnement, d'une lecture et d'une écriture rapide [22-25]. Avec le mouvement vers des densités de stockage de données plus importantes dans les lecteurs de disques d'ordinateur, l'attention se porte sur les propriétés magnétiques de ces films [26].

Les couches minces magnétiques sont très importantes sur le plan technologique, car la plupart des appareils électroniques qui exploitent les comportements magnétiques utilisent des architectures en couches minces. En plus de leur importance technologique, ils sont intéressants car ils présentent une nouvelle physique en raison de leur taille et dimensionnalité réduites [27].

II-2 Propriétés magnétiques des films minces

L'étude des propriétés magnétiques des films minces de quelques couches atomiques a suscité beaucoup d'intérêt et a été stimulée par les récents progrès technologiques [28]. Les propriétés magnétiques des couches minces sont évidemment différentes de celles des matériaux en volume [29]. De plus, les propriétés magnétiques des films minces, il est important de se familiariser avec la terminologie de base du ferromagnétisme [30]. Les propriétés magnétiques des films ferromagnétiques minces sont étudiées pour le cas d'une structure idéale constituée de quelques couches atomiques parallèles de matériau magnétique. Leurs propriétés magnétiques sont déterminées par la taille finie dans une dimension, par l'influence dominante des phénomènes de surface magnétique [31].

Les propriétés fondamentales des matériaux magnétiques sont *l'aimantation de saturation* $M_s(T)$, *l'anisotropie* $K(T)$, *la constante d'échange* $J(T)$ et *la température de Curie* (T_c). Dans les films minces, l'aimantation de saturation est normalement exprimée sous forme de moment magnétique par unité de volume [30].

- ❖ *Aimantation de saturation* (M_s): L'aimantation de saturation (à une température particulière) décrit la force de la somme des moments magnétiques ordonnés de chaque site atomique lorsque tous les moments pointent dans la même direction, généralement obtenue en appliquant un champ magnétique suffisamment fort dans le sens de la mesure [30].
- ❖ *Constante d'anisotropie* (K): L'anisotropie (à une température particulière) est une mesure de la préférence de l'aimantation pour se situer dans une ou plusieurs directions particulières [30].
- ❖ *Température de Curie* (T_c): Est la température à laquelle l'ordre spontané des moments magnétiques atomiques est perdu en raison de l'excitation thermique. Les températures de Curie ont une grande étendue, allant de près de 0 K à 1400 K dans le cas de *Co*. Les matériaux à couche mince utilisés dans les applications doivent généralement avoir un T_c nettement supérieur à la température ambiante et des valeurs comprises entre 500 K et 700 K sont courantes [30]. L'aimantation spontanée due à l'alignement des moments magnétiques atomiques dépend de la température, et elle chute brusquement jusqu'à zéro à la température de Curie T_c . Les températures de Curie des trois métaux ferromagnétiques, *le fer*, *le cobalt* et *le nickel*, sont respectivement de 1044 K, 1388 K et 628 K. Aucun matériau n'est connu pour avoir une température de Curie plus élevée que *le cobalt* [32].

- ❖ Constante d'échange (J) : La constante d'échange quantifie la préférence des moments magnétiques atomiques à s'aligner parallèlement les uns aux autres (ou antiparallèlement dans le cas d'un matériau antiferromagnétique) dans une direction d'équilibre. Ensuite, lorsque les moments ne sont pas parfaitement alignés, l'énergie totale du système (matériau) est augmentée. De plus, cet alignement des moments magnétiques atomiques est souvent appelé *rigidité d'échange*. Bien qu'il s'agisse d'un paramètre fondamental d'un matériau magnétique, la mesure de la constante d'échange ou de la rigidité d'échange est loin d'être simple et sa valeur est généralement déduite de mesures M_S en vs T [33].

II-3 Effet de surface

Le magnétisme de surface, qui a été proposé il y a environ quatre décennies par Mills [34, 35], est toujours l'un des domaines de recherche les plus activement étudiés en mécanique statistique des transitions de phases et des phénomènes critiques [36, 37]. Ces dernières années, les effets de surface sur les propriétés magnétiques des systèmes finis tels que les films minces ferromagnétiques ont fait l'objet d'un intérêt considérable [36, 37]. De plus, on peut s'attendre à des caractéristiques plus importantes en considérant l'effet des surfaces, qui sont prédominantes dans les systèmes physiques réels, ces effets se traduisant par une réduction du nombre de coordination de surface du matériau [38, 39]. Par conséquent, les propriétés magnétiques des surfaces libres sont radicalement différentes de celles du matériau en volume, parce que la surface libre brise la symétrie de translation, c'est-à-dire que les atomes de surface sont intégrés dans un environnement dont la symétrie est inférieure à celle des atomes internes [40], tandis que les interactions d'échange entre les atomes de surface J_S peuvent être différentes de celles de volume correspondants J_V , ce qui conduit à un phénomène connu sous le nom *d'amélioration de la surface* dans lequel la surface peut présenter une phase ordonnée même si le volume lui-même est désordonné (paramagnétique) et il a une température de transition plus élevée que celui du volume. Ce phénomène a déjà été constaté expérimentalement [41, 42, 43].

II-4 Effet de taille

Le film mince peut être considéré comme un modèle à utiliser pour traiter les effets de taille magnétiques [44], qui sont dus à une perte pure et simple de symétrie de translation à la surface sans modifier les propriétés magnétiques de l'atome de surface par rapport à celles de volume, comme par exemple le moment magnétique d'un seul atome, les paramètres de couplage d'échange, etc. [45], contrairement à l'effet de surface. Ils sont plus prononcés à des

températures élevées, y compris, en particulier, les phénomènes critiques proches de la température de Curie [46]. Tous les modèles théoriques des effets de tailles magnétiques prévoient une magnétisation inhomogène à des températures finies, diminuant près de la surface du film en raison d'un couplage d'échange réduit dans la surface [31].

Les effets de taille sont universels, caractéristiques dans un certain sens du mécanisme de volume de l'ordre magnétique. Les effets de taille des propriétés magnétiques sont attendus simplement parce que le spin des électrons dans un atome à la surface d'un film ferromagnétique uniformément magnétisé est moins étroitement contraint que les spins des atomes intérieurs [47].

Pour simuler un réseau de couches minces, nous appliquons des conditions périodiques aux deux directions (x et y) et les conditions aux limites libres sont appliquées dans la direction (z). Les propriétés uniques des films minces magnétiques découlent en partie de leur forme globale, la coordonnée perpendiculaire (direction z) étant beaucoup plus petite que les coordonnées latérales (directions $x - y$). Généralement, les paramètres du réseau dans les dimensions latérales sont soit augmentés soit diminués de quelques pourcents avec une diminution / augmentation conséquente dans la direction z (épaisseur) [30].

II-5 Interaction d'échange

Les motifs magnétiques ordonnés mentionnés résultent, dans le premier ordre, de l'interaction coulombienne entre les électrons partagés, appelée "interaction d'échange". Ce type d'interaction est bien illustré par la formation de liaisons dans la molécule diatomique H_2 . Dans ce cas, l'interaction de Coulomb déplace l'énergie des états électroniques des électrons partagés [48].

$$\Delta E = Q \mp J \quad (\text{II-1})$$

Où

- Q : Mesure l'énergie associée à la répulsion coulombienne entre les électrons des deux états atomiques.
- J : Désigne un terme d'origine quantique, l'intégrale des orbitales mixtes (intégrale d'échange), qui sépare l'énergie de l'état avec $S = 0$ (état singulet) de l'énergie de l'état $S = 1$ (état triplet), respectivement associées au signe + et - [48].

La différence d'énergie entre les deux états, singlet et triplet, est alors simplement :

$$E_s - E_t = 2J \quad (\text{II-2})$$

L'intégrale d'échange J , peut être positive ou négative, ce qui détermine que l'alignement est parallèle ou antiparallèle.

La préférence dans un matériau magnétique pour les spins voisins pour s'aligner parallèlement ou antiparallèle les uns aux autres. Trois états magnétiques ordonnés sont connus : le ferromagnétisme, le ferrimagnétisme et l'antiferromagnétisme, ces trois états se retrouvent dans les films minces. Dans un ferromagnétique, une interaction d'échange entre atomes voisins assure l'alignement du moment magnétique (*le spin*) des électrons non appariés. La force de l'interaction d'échange est décrite par l'intégrale d'échange qui représente ce chevauchement des distributions de charge entre les atomes voisins [49].

II-5-1 Couplage d'échange intra couche

Les systèmes à film magnétique peuvent avoir différentes transitions de phases en raison de la présence d'un couplage d'échange intra couche (appelé aussi couplage d'échange de la surface) [6], qui est défini par le rapport entre l'interaction d'échange de surface et de volume ($R_s = J_s/J_v$), tel que si le rapport R_s est supérieur à une valeur critique ($R_c = J_s/J_v)_{crit}$, le système peut ordonner en surface avant de ordonner en volume [50] et la température de transition de surface est supérieure à celle de volume cela s'appelle "*une transition extraordinaire*", alors que pour $R_s < R_c$ (cas "*ordinaire*") la température de transition du film est principalement déterminée par la région en volume [51].

Un grand nombre d'efforts théoriques ont montré qu'il existe une valeur critique du rapport (surface / volume), des interactions d'échange R_c au-dessus de laquelle les effets de surface sont dominants et la température de transition du film est déterminée par l'aimantation de surface, tandis qu'en dessous de R_c , les caractéristiques de transition du film sont régies par l'aimantation de volume. Ensuite, la valeur critique R_c elle-même est appelée le "*point spécial*" auquel la température de transition du film devienne indépendante de l'épaisseur [52].

II-6 Dimensionnalité et comportement critique

La variation du comportement magnétique des systèmes physiques en fonction de la dimensionnalité se reflète également dans les exposants critiques qui apparaissent dans la description des divergences au voisinage de leurs températures critiques [53].

Les mesures de grandeurs physiques dans des échantillons ferromagnétiques à des températures proches de la température de transition T_c (température de Curie), montrent une dépendance à la loi de puissance [53]. De cette dépendance, il est possible de définir des exposants critiques (appelés aussi indices critiques).

- ❖ β : Définit le comportement critique de l'aimantation à proximité de T_c par cette loi :

$$M(T) \propto |T - T_c|^\beta \quad (\text{II-3})$$

- ❖ γ : Définit le comportement critique de susceptibilité à proximité de T_c par cette loi :

$$\chi(T) \propto |T - T_c|^{-\gamma} \quad (\text{II-4})$$

- ❖ α : Définit le comportement critique de la chaleur spécifique à proximité de T_c par cette loi :

$$C(T) \propto |T - T_c|^{-\alpha} \quad (\text{II-5})$$

Les mesures de l'aimantation en fonction de la température dans les systèmes mésoscopiques et nanoscopiques ont été utilisées pour déterminer les exposants critiques et, à partir de ceux-ci, vérifier le changement de la dimensionnalité en fonction de leur longueur, épaisseur.

La détermination des exposants critiques ne peut se faire qu'à condition que la température critique T_c soit déterminée avec précision. Cependant, il a été démontré [54] que de petites incertitudes dans T_c peuvent entraîner des conclusions erronées. Le meilleur moyen n'est pas d'ajuster la courbe $M(T)$ avec T_c et l'exposant β comme paramètres, mais de déterminer T_c dans une expérience distincte, puis d'évaluer β à partir de l'ajustement de $M(T)$.

Pour les échantillons les plus minces de films de Ni , l'exposant critique observé est proche de (0.325), la valeur prévue pour les systèmes bidimensionnels (dans le modèle d'Ising) ; à mesure que l'épaisseur augmente, l'exposant change, à environ 6 monocouches, à une valeur proche de celle prévue pour les systèmes physiques tridimensionnels (0.365), dans le même modèle [55]. Le même effet a été constaté pour le Ni sur $Cu(111)$ et le Ni sur $Cu(100)$ [18].

II-7 Applications des films minces magnétiques

Il existe trois grands domaines d'application des matériaux magnétiques : l'énergie, l'information et les télécommunications, et leurs applications en tant que supports d'information, c'est-à-dire de l'enregistrement audio, vidéo, et du stockage sur ordinateur (disques durs et disquettes) ; dans les disques durs actuels, l'information est encodée dans des films magnétiques minces [56]. Ces films ont des domaines magnétiques dont l'aimantation est alignée dans une direction du plan de la couche et est orientée soit dans un sens soit dans l'autre : c'est l'enregistrement magnétique longitudinal [56]. Les couches minces ont été explorées avec de nombreuses applications possibles dans tous les domaines de la physique comme l'optique, la mécanique, le magnétisme, etc... [20]. Les activités de recherche sur les couches minces magnétiques pour les capteurs, les actionneurs et autres dispositifs micro magnétiques tels que les transformateurs, les moteurs, etc... et, en particulier, les dispositifs magnétiques de stockage de données ont été fortement intensifiées ces dernières années [57]. Parmi les principales applications de ces matériaux nous considérons ici Mémoires d'ordinateur, Domaine Dispositifs de mobilité, Têtes magnétiques à film mince, Support d'enregistrement magnétiques.

II-7-1 Mémoires d'ordinateur

Les films magnétiques sont intéressants pour cette application car ils peuvent être produits avec des états bistables inhérents et peuvent passer d'un état à l'autre en quelques nanosecondes sous l'action de petits champs d'entraînement de l'ordre de quelques oersteds [58].

II-7-2 Domaine -Dispositifs de mobilité

Un grand nombre de dispositifs de stockage et de logique basés sur le mouvement des domaines dans les couches minces sous l'influence des champs appliqués constituent un sujet important des recherches actuelles dans le domaine du stockage numérique à haute capacité, car ils fournissent à la fois un stockage à haute densité et une logique à haute vitesse dans le même film [58].

II-7-3 Support d'enregistrement magnétique

La densité des informations de stockage sur les disques durs des ordinateurs a augmenté à un taux de 30% par an au cours des deux décennies qui ont précédé les années 90. Depuis 1991, ce taux de croissance a dépassé 60% par an. Les supports magnétiques sont des films minces d'un alliage magnétique de coercivité relativement élevée [59].

II-7-4 Têtes magnétiques à film mince

Les têtes magnétiques sont des transducteurs qui convertissent les signaux électriques en un modèle de magnétisation correspondant sur un support d'enregistrement et vice versa. Les têtes à film mince, étant bidimensionnelles, présentent l'avantage d'une installation et d'un alignement simples, d'une petite taille, d'un poids léger et d'un contact avec le support d'enregistrement [58].

II-8 Conclusion

Grace à leur développement récent, les films minces magnétiques sont attiré une attention considérable, tant sur le plan expérimental que théorique, elles devraient avoir des propriétés nouvelles et éventuellement utiles pour des applications technologiques. Du point de vue théorique, un grand intérêt a été accordé aux phénomènes critiques.

Les films minces permettent de modéliser les effets de la taille magnétique lorsque leur épaisseur est faible et sont considérés comme un système quasi bidimensionnel lorsqu'il est très mince. Ensuite, les propriétés magnétiques des films minces diffèrent évidemment de celles des matériaux en volume. De plus, on peut s'attendre à des caractéristiques plus importantes en considérant l'effet de surfaces, qui sont prédominantes dans les systèmes physiques réels, ces effets se traduisant par une réduction du nombre de coordination de surface du matériau. En outre, les systèmes à film magnétique peuvent avoir différentes transitions de phase en raison de la présence d'un couplage d'échange intra couche.

Le phénomène critique au magnétisme des films minces, à savoir l'existence d'une surface critique de couplage au point spécial à laquelle la température de transition du film devienne indépendante de l'épaisseur du film, a été examiné en détail par différents technique théoriques.

Dans le prochain chapitre, nous introduisons les concepts de base de la méthode de simulation de Monte Carlo. Nous commencerons par une introduction de différents modèles de spin. Ensuite, nous décrirons les principes de base de la simulation Monte Carlo.

Bibliographies

- [1] H. J. Elmers, Ferromagnetic monolayers. *Int. J. Mod. Phys. B* 9 (1995) 3115.
- [2] E. Albayrak , A. Yigit, and S. Akkaya. The antiferromagnetic Ising model for a bilayer bethe lattice. *J. Magn. Magn. Mater.* 320 (2008) 2241-2248.
- [3] P. G. ALBERTO, Principles of nanomagnetism. Springer International Publishing. (2017). P.335.
- [4] Ü Akıncı, Effects of the randomly distributed magnetic field on the phase diagrams of the transverse Ising thin film. *J. Magn. Magn. Mater.* 329 (2013) 178.
- [5] Y. Yüksel, Monte Carlo simulations of dynamic phase transitions in ultrathin Blume–Capel films. *Phys. Lett. A* 377 (2013) 2494- 2504.
- [6] Ü Akıncı, Random field distributed Heisenberg model on a thin film geometry. *J. Magn. Magn. Mater.* 368 (2014) 36.
- [7] Ü Akıncı, Anisotropic Heisenberg model in thin film geometry. *Thin Solid Films.* 550 (2014) 602.
- [8] Y. Yüksel, Ü Akıncı, Universality aspects of layering transitions in ferromagnetic Blume–Capel thin films. *Physica B* 433 (2014) 96.
- [9] Y. Yüksel, An effective field theory study of layering transitions in Blume–Capel thin films in the presence of quenched random crystal fields. *Physica A.* 396 (2014) 9.
- [10] R. Masrour, A. Jabar, Surface behavior of magnetic phase transitions: a Monte Carlo study. *Applied Surface Science.* 432 (2018) 78-84.
- [11] A. Berger, O. Idigoras, P. Vavassori, Transient behavior of the dynamically ordered phase in uniaxial cobalt films. *Phys. Rev. Lett.* 111 (2013) 190602.
- [12] B.-Y. Wang, J.-Y. Hong, K.-H.O. Yang, Y.-L. Chan, D.-H. Wei, H.-J. Lin, M.-T. Lin, How antiferromagnetism drives the magnetization of a ferromagnetic thin film to align out of plane. *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013) 117203.
- [13] T. Kaneyoshi, Phase diagram of Ising thin films with decorated surfaces; decoupling approximation. *Physica A.* 293 (2001) 200-214.
- [14] A. R. Ball, H. Fredrikze, D. M. Lind, R. M. Wolf, P. J. H. Bloemen, M.Th. Rekveldt, P. J. van der Zaag, Polarized neutron reflectometry studies of magnetic oxidic Fe₃O₄/NiO and Fe₃O₄/CoO multilayers. *Physica B.* 221 (1996) 388.
- [15] Y. Li, C. Polaczyk, F. Klose, J. Kapoor, H. Maletta, F. Mezei, D. Riegel, *Phys. Rev. B.* Magnetic and structural properties of thin Fe films grown on Ni/Si. 53 (1996) 5541.
- [16] C. M. Schneider, P. Bressler, P. Schuster, J. Kirschner, Curie temperature of ultrathin films of fcc-cobalt epitaxially grown on atomically flat Cu(100) surfaces. *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990) 1059.
- [17] Z.Q. Qiu, J. Pearson, S.D. Bader, Asymmetry of the spin reorientation transition in ultrathin Fe films and wedges grown on Ag(100). *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 1006.
- [18] F. Huang, M. T. Kief, G. J. Mankey, R. F. Willis, Magnetism in the few-monolayers limit: A surface magneto-optic Kerr-effect study of the magnetic behavior of ultrathin films of Co, Ni, and Co-Ni alloys on Cu (100) and Cu (111). *Phys. Rev. B* 49 (1994) 3962–3971.
- [19] P. Pouloupoulos and K. Baberschke. Magnetism in thin films. *J. Magn. Magn. Mater.* 11 (1999) 9495.

- [20] R. Yadav, J. R. Mohanty. Synthesis and characterization of structural and magnetic properties of electrodeposited cobalt iron thin film. Thèse de doctorat. Indian Institute of Technology Hyderabad. (2015).
- [21] A. V. Svalov, I. R. Aseguinolaza, Structure and magnetic properties of thin permalloy films near the “transcritical” state. *IEEE transactions on magnetics*. 46 (2010) 333-336.
- [22] S. S. P. Parkin, Z.G. Li, D. J. Smith, Giant magnetoresistance in antiferromagnetic Co/Cu multilayers. *Appl. Phys. Lett.* 58 (1991) 2710.
- [23] J. Q. Xiao, J.S. Jiang, C.L. Chien, Giant magnetoresistance in nonmultilayer magnetic systems. *Phys. Rev. Lett.* 68 (1992) 3749.
- [24] J.A. Christodoulides, A.S. Murthy, G.C. Hadjipanayis, Structural and magnetic properties of granular Cr_{100-x}Fe_x. *Mater. Sci. Eng. A*. 204 (1995) 30-33.
- [25] S. Honda, M. Nawate, M. Tanaka, T. Okada, Giant magnetoresistance and superparamagnetic grains in Co-Ag granular films. *J. Appl. Phys.* 82 (1997) 764.
- [26] D. Mac Mathúna, Magnetism of very thin films a brief introduction. physics department trinity college. Dublin Ireland. (2001).
- [27] N. A Spaldin, Magnetic materials: fundamentals and applications. Cambridge university press. (2010).
- [28] A. Oubelkacem, A. Ainane, M. Saber, P. Häussler. The spin-1/2 Ising film with a perfect surface. *Physica Scripta*. 73 (2006) 325.
- [29] T. Kaneyoshi, and S. Shin. Critical properties of a spin-1/2 Ising bilayer system in a transverse field. *physica status solidi (b)*. 218 (2000) 537-544.
- [30] T. Thomson, Magnetic properties of metallic thin films. metallic films for electronic, optical and magnetic applications. Woodhead Publishing. (2014) 454-546.
- [31] U. Gradmann, R. Bergholz, and E. Bergter. Magnetic properties of very thin films. *Thin Solid Films*. 126 (1985) 107-116.
- [32] J. M. D. COEY. Magnetism and magnetic materials. Cambridge university press. (2010). P. 633.
- [33] A. Hubert and R. Schafer, Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures. Berlin: Springer-Verlag. (2000).
- [34] D. L. Mills, Surface effects in magnetic crystals near the ordering temperature. *Phys. Rev. B*. 3 (1971) 3887-3895.
- [35] D. L. Mills, Possibility of surface magnetic order above the bulk ordering temperature: a response to a comment by Sukiennicki and Wojtczak. *Phys. Rev. B*. 8 (1973) 4424-4426
- [36] T. Kaneyoshi, Surface magnetism; magnetization and anisotropy at a surface. *J. Phys. Condens. Matter*. 3 (1991) 4497-4522
- [37] M. Pleimling, Critical phenomena at perfect and non-perfect surfaces. *J. Phys. A: Math. Gen.* 37 (2004) R79-R115.
- [38] A. Oubelkacem, A. Ainane, M. Saber, P. Häussler, Effective critical exponent of the magnetization in ferromagnetic Ising films with amorphous surfaces. *Chin. J. Phys.* 44 (2006) 387.
- [39] Y. Yüksel, Ü. Akinci, Thickness dependent Curie temperature and power-law behavior of layering transitions in ferromagnetic classical and quantum thin films described by Ising, XY and Heisenberg models. *Physica B*. 462 (2015) 54.

- [40] T. Kaneyoshi, Introduction to Surface Magnetism. CRC Press, Boston.(1991).
- [41] C. Ran, C. Jin, M. Roberts, Ferromagnetic order at Tb surfaces above the bulk Curie temperature. J. Appl. Phys. 63 (1988) 3667.
- [42] M. Polak, L. Rubinovich, J. Deng, observation of highly enhanced curie temperature at ni-al alloy surfaces. Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 4059.
- [43] H. Tang, D. Weller, T. G. Walker, J. C. Scott, C. Chappert, H. Hopster, A. W. Pang, D. S. Dessau, D. P. Pappas, Magnetic reconstruction of the Gd (0001) surface. Phys. Rev. Lett. 71 (1985) 444.
- [44] C. Jia, X-Z. Wang, Phase diagrams of a diluted Ising ferromagnetic film with spin 1 in a transverse field. J. Phys. Cond. Matt. 8 (1996) 5745.
- [45] U. Gradmann, Ferromagnetism near surfaces and in thin films. Applied physics. 3 (1974) 161-178.
- [46] U. Gradmann, Magnetism of surfaces and interfaces. J. Magn. Magn. Mater. 6 (1977) 173-182.
- [47] M. Ohring, The materials science of thin films. Applied Optics. 31 (1992) 7162.
- [48] C. P. S. da Silva, Magnetic thin films for spintronic applications. Thèse de doctorat. Universidade de Lisboa (Portugal). (2017).
- [49] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics. 8th edition. Hoboken, NJ: John Wiley. (2005)
- [50] A. Benyoussef, N. Boccara, M. Saber, Three-dimensional semi-infinite spin-1 Ising model interaction with crystal field. J. Phys. C: Solid State Physics. 19 (1986) 1983.
- [51] M. Saber, A. Ainane, F. Dujardin, B. Stébé, Magnetic properties of a transverse spin-1/2 Ising film. Phys. Rev. B. 59 (1999) 6908.
- [52] Y. Yüksel, Critical behavior and universality properties of uniaxial ferromagnetic thin films in the presence of random magnetic fields. J. Magn. Magn. Mater. 385 (2015) 47-54.
- [53] A. P. Guimarães, and P. G. Alberto, Principles of nanomagnetism. Vol. 7. Berlin: Springer. (2009).
- [54] M. Farle, W. A. Lewis, K. Baberschke, Detailed analysis of the in situ magneto-optic Kerr signal of gadolinium films near the Curie temperature. Appl. Phys. Lett. 62 (1993) 2728-2730.
- [55] Y. Li. K. Baberschke, Dimensional crossover in ultrathin Ni(111) films on W(110). Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 1208–1211.
- [56] O. Boudrifa, M. Boudissa, Etudes des propriétés structurales des couches minces Ni/Si (111) et Fe/Ni/Si (111) obtenues par PVD. In : 1^{ères} Journées Internationales de Physique de Constantine. (2013).
- [57] H. S. Nalwa, Handbook of thin film materials. 1st edition. Academic Press. (2001). P. 344.
- [58] K. Chopra, I. Kaur, Thin film device applications. 1st edition. Plenum Press, New York. (1983).
- [59] E. du Trémolet de Lacheisserie, D. Gignoux, M. Schlenker, Magnetism materials and applications. 1st edition. Springer. (2004).

Chapitre III

Modèles de spin et la méthode de Monte Carlo

Chapitre III

Modèles de spin et la méthode de Monte Carlo

Le terme "Monte Carlo" est apparu pour la première fois en 1949 par *Métropolis* et *Ulam* [1]. Ces auteurs proposaient une méthode pour résoudre une classe de problèmes en physique et en mathématiques en utilisant une approche statistique. En fait, des idées similaires, sous le nom d'échantillonnage statistique, ont été utilisées plus tôt, bien avant l'invention des ordinateurs. La méthode de Monte Carlo (MC) en physique computationnelle est probablement l'une des approches numériques les plus importantes pour étudier des problèmes couvrant toutes les disciplines scientifiques imaginables [2]. Depuis la fin de la seconde guerre mondiale, la méthode de Monte-Carlo a connu son essor, principalement dans le cadre du projet américain "*Manhattan*" pour le développement d'armes nucléaires. Cette période coïncide également avec la construction des premiers ordinateurs [3]. Les modèles de systèmes de spin sont un aspect essentiel du magnétisme à température finie. Ces modèles permettent une simple représentation du comportement d'un spin dans un milieu magnétique. Une description de ces modèles est présentée [4]. L'utilisation de méthodes d'approximation exige l'étude des modèles de spin.

Dans ce chapitre, nous présenterons les différents modèles de spin qui sont introduite, suivie d'une illustration des différentes géométries de réseau utilisées dans un système de spin. Ainsi, nous décrirons les principes de base de la simulation Monte Carlo à l'équilibre thermique afin d'étudier les phénomènes critiques. Cette méthode forme la classe la plus grande et la plus importante de méthodes numériques utilisées pour résoudre des problèmes de physique statistique, et à la fin du chapitre, nous allons exposer les analyses d'erreurs et les conditions aux limites.

III-1 Modèles de spin

Les modèles de spin ont été introduits à l'origine pour décrire le magnétisme dans les matériaux ferromagnétiques. Les modèles classiques, en particulier le modèle d'Ising, ont joué un rôle très important dès la naissance du magnétisme, mais aujourd'hui, l'intérêt se porte davantage sur les modèles quantiques et les phénomènes qui y sont associés. Les modèles de spin quantique ont d'abord été étudiés par Bethe à l'aide du modèle unidimensionnel d'Heisenberg [5].

III-1-1 Modèle d'Ising

Le modèle Ising est certainement le modèle le plus largement utilisé en physique statistique, et a fait l'objet de plusieurs d'articles de recherche depuis son introduction par *Wilhelm Lenz* en 1920 [6, 7]. Le nom "modèle Ising" (plus rarement, appelé plus précisément le modèle Lenz-Ising, comme le suggère Ising lui-même) a été créé par *Rudolph Peierls* en référence à la thèse d'Ernst Ising de 1925 [8], menée sous la direction de *Lenz*, et consacrée à la réalisation de la version unidimensionnelle du modèle. Le modèle Ising est l'un des modèles les plus simples présentant une transition de phase [7]. Ce modèle a été introduit pour étudier les propriétés et les comportements dynamiques des particules magnétiques dans un champ magnétique [9], et pour l'étude des transitions de phases des ferromagnétiques à la température de Curie. Ensuite, le modèle Ising, à cause de sa simplicité et de la richesse de son comportement, a suscité un vif intérêt depuis son introduction [10]. En outre, le modèle Ising est un modèle de réseau de moment magnétique de particules ayant la particularité d'être toujours orienté le long du même axe spatial [11]. L'aimantation macroscopique M d'un matériau représente la somme des moments magnétiques S_i dont le comportement obéit aux lois de la physique statistique. Le modèle d'Ising suggéré en 1927 est basé sur un réseau cristallin 2D régulier (Figure III-1) composé de N moments magnétiques identiques S_i qui ne peut prendre que deux orientations possibles ($S_i = \mp 1$).

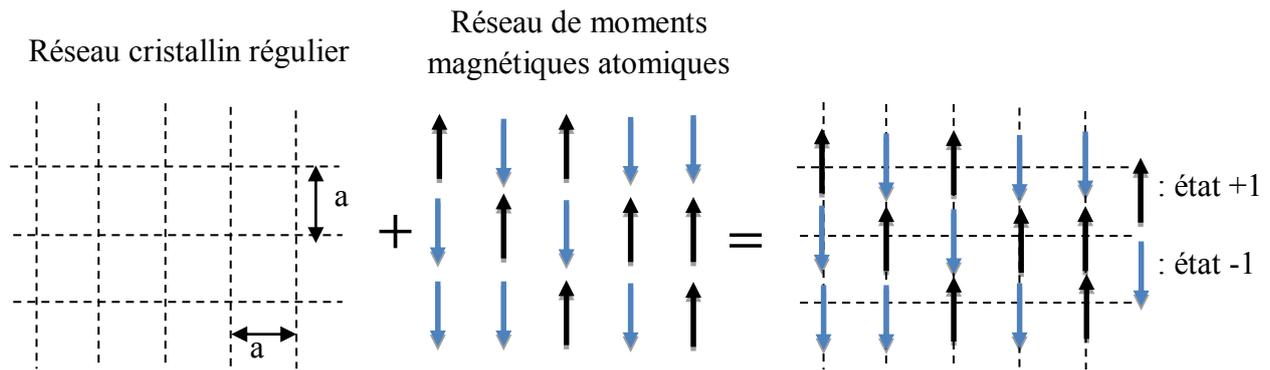


Figure (III-1) : Schéma illustré réseau cristallin et moments magnétiques atomiques associés.

a. Équation du modèle

Selon la formule de l'hamiltonien d'un système de moments magnétiques, le système ferromagnétique d'Ising est exposé à un champ externe H a pour hamiltonien [12] :

$$H_{Ising} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (\text{III-1})$$

Où :

- $\langle ij \rangle$: Indique la sommation sur les sites les plus proches voisins.
- S_i : Présente le spin au site i .
- J : est l'interaction d'échange, son signe a défini le type de magnétisme du réseau. Le modèle d'Ising peut être classé selon le signe des interactions de couplage d'échange :
 - ✓ $J > 0$: L'interaction entre spins $S_i S_j$ est de type ferromagnétique.
 - ✓ $J < 0$: L'interaction entre spins $S_i S_j$ est de type antiferromagnétique.
 - ✓ $J = 0$: L'interaction entre spins $S_i S_j$ est absente.
- h : Désigne le champ magnétique extérieur. Le signe du champ magnétique externe explique également comment un site de spin j interagit avec le champ externe, à savoir [13] :
 - ✓ $h > 0$: Tous les spins deviennent vers le haut (la direction positive du champ magnétique externe).
 - ✓ $h < 0$: Tous les spins deviennent vers le bas (la direction négative du champ magnétique externe).
 - ✓ $h = 0$: Sans champ magnétique externe.

Il est clair que lorsque le modèle d'un système physique est donné et choisi, l'étape suivante à franchir est la détermination des propriétés statistiques du modèle. Par conséquent, nous commençons par la probabilité de la configuration donnée par la distribution de Boltzmann [13] :

$$p(S_1, S_2, S_3 \dots \dots \dots S_N) = \frac{1}{Z} \exp^{-\beta H(S_1, S_2, S_3 \dots \dots \dots S_N)} \quad (\text{III-2})$$

- Z : La fonction de partition du système est donné par :

$$Z = \sum_i \exp(-\beta E_i) \quad (\text{III-3})$$

Avec :

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (\text{III-4})$$

Où :

- k : Constante de Boltzmann.
- T : La température.
- E_i : L'énergie de l'état indexé i

Deux premiers spin voisins subissent une interaction en J qui tend à les aligner. Les spins seront tous alignés pour minimiser l'énergie à température zéro : c'est le modèle le plus simple pour un corps ferromagnétique. L'état fondamental du système est doublement dégénéré en l'absence de champ magnétique car les spins sont alignés tout en haut ou tout en bas [3].

III-1-2 Modèle de Potts

Après le modèle d'Ising, le modèle de Potts (Potts, 1952) est peut-être le modèle le plus important de transition de phase en mécanique statistique. Ce modèle est défini comme une généralisation du modèle Ising. Le modèle de Potts a été proposé à l'origine par *Cyril Domb* comme sujet de thèse à son étudiant *Renfrey Potts*. Dans les premières années, le modèle était surtout une curiosité, mais sa popularité a rapidement augmenté dans les années 1970 après la découverte par *Rodney Baxter* (Baxter, 1973) de sa transition de premier ordre lorsque le nombre de composants est supérieur à quatre [14]. Dans le modèle standard de Potts, deux spins interagissent avec une énergie (réduite) " $-J\delta_{S_i S_j}$ ". Dans le modèle de l'état q , chaque spin peut prendre q valeurs, $S_i = 0, 1, 2, \dots, q-1$, L'Hamiltonien est donné par [15]:

$$E = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \delta(S_i, S_j) \quad (\text{III-5})$$

- $\delta(S_i, S_j)$: est le δ symbole de Kronecker avec :

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1 & S_i = S_j \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{III-6})$$



Figure III-2 : Description du modèle Potts pour différents États q .

III-1-3 Modèle de Heisenberg

En théorie, le modèle le plus simple pour définir un système de spin en interaction est le modèle de Heisenberg, dans lequel, sur chaque site du réseau, il y a un spin qui est en interaction avec ses voisins. Le modèle de Heisenberg est un modèle de spin permettant de traiter de manière directe la dépendance au spin d'un système multi-électron [16]. Le spin est également nommé le moment cinétique intrinsèque de l'électron. Ce dernier est un opérateur vectoriel à trois composantes $\vec{S}^x, \vec{S}^y, \vec{S}^z$ [16].

Très tôt après le développement de la mécanique quantique, *Heisenberg* et *Dirac* ont indépendamment suggéré que le phénomène magnétique dans les solides peut être considéré comme la base d'un modèle d'échanges couplés de moments quantiques angulaires (spin), avec un Hamiltonien qui est décrit comme suite [4] :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (\text{III-7})$$

Avec :

- $\langle i, j \rangle$: Signifier la somme sur les plus proches voisins.
- J : Désigne le paramètre d'échange entre les spins \vec{S}_1 et \vec{S}_2 . Si $J > 0$, les spins tendent à s'aligner (cas de matériau ferromagnétique), et si $J < 0$, le modèle décrit le matériau antiferromagnétique.
- Le produit scalaire est décrit comme suit :

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \quad (\text{III-8})$$

On remplace l'équation (III-8) dans l'équation (III-7), alors l'équation de modèle de Heisenberg devient sous la forme suivante :

$$H_{\text{Heisenberg}} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J S_i^x S_j^x + J S_i^y S_j^y + J S_i^z S_j^z \quad (\text{III-9})$$

III-1-4 Modèle de Blume Capel (BC)

Ces dernières années, une attention particulière a été accordée à l'étude théorique et expérimentale de l'ordre supérieur des couplages de spin dans les modèles Ising [17]. Parmi les modèles les plus étudiés en physique statistique en raison de son importance théorique et de son application à différents systèmes, on trouve le modèle Blume-Capel qui correspond au système d'Ising ferromagnétique de spin-1, avec un couplage d'échange entre proches voisins sous les effets du champ cristallin [18]. Ce modèle a été largement étudié non seulement en raison de l'intérêt théorique fondamental découlant de la richesse du diagramme de phase qu'il présente, mais aussi parce que des variantes et des extensions du modèle ont trouvé une application dans la description des fluides ternaires [19, 20] des mélanges de gaz solides-liquides et des fluides binaires [20, 21] et des modèles de conduction électronique [23]. Il est rappelé que le modèle Blume-Capel (BC) est un modèle de spin de réseau utile exploré en mécanique statistique, y compris les interactions bilinéaires [17].

Le modèle Ising spin-1 sous champ de cristal (modèle Blume-Capel (BC)) a fait l'objet de nombreuses recherches intéressantes. Ce modèle fait l'objet de nombreuses études en raison des deux termes importants de la physique : le champ cristallin et l'interaction d'échange [24]. Il a été introduit à l'origine pour étudier les transitions de phases magnétiques du premier et du second ordre [25, 26]. Le modèle de BC présente des phases ferromagnétiques ordonnées et paramagnétiques désordonnées séparées par une ligne de transition, qui passe d'une transition de phase continue (qui appartient à la classe d'universalité d'Ising) à une transition de premier ordre au point tricritique [27].

L'Hamiltonien de Blume-Capel (BC), qui considère un système de spin à trois états ($S_i = \mp 1, 0$) a un terme de type Ising proportionnel à la constante de couplage J qui prend en compte l'interaction entre les spins voisins les plus proches, ainsi qu'un terme proportionnel au champ cristallin D [27]. Alors l'Hamiltonien de ce modèle peut être écrit comme suite :

$$H_{BC} = -J \sum_{i \neq j} S_i S_j - D \sum_i S_i^2 \quad (\text{III-10})$$

Les trois cas spéciaux de cet Hamiltonien sont :

- ❖ $D = -\infty$, le système est réduit à un modèle Ising spin-1/2 qui a un ordre magnétique $\langle S_i \rangle$ à basse température.

- ❖ $D = 0$, il s'agit du modèle simple d'Ising avec $S = 1$ qui a également un ordre magnétique à basse température.
- ❖ $D = +\infty$, le système est réduit dans le cas $S=0$ en absence d'ordre magnétique $\langle S_i \rangle = 0$.

III-1-5 Modèle de Blume Emery Griffiths (BEG)

En mécanique statistique, le modèle Blume Emery Griffiths (BEG) joue un rôle important [18]. Ce modèle est un modèle de spin qui offre une grande variété de phénomènes critiques et multi-critiques. C'est l'un des rares modèles simples qui permet une transition de phase du premier et du second ordre [5]. Le modèle de spin-1 d'Ising avec interaction bilinéaire, biquadratique et champ cristallin a été introduit par Blume Emery Griffiths [28], pour décrire la séparation des phases et l'ordre des superfluides dans les mélanges $H_e^3 - H_e^4$. Avec la disparition des interactions biquadratiques, le modèle est connu sous le nom de mode Blume-Capel [25, 26].

Le modèle Blume-Emery-Griffiths est défini par :

$$H_{BEG} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + D \sum_i S_i \quad (\text{III-11})$$

Où :

- $\langle i, j \rangle$: Signifie que la somme est limitée aux sites des voisins les plus proches.
- J : Désigne l'interaction d'échange bilinéaire.
- K : Indique l'interaction biquadratique.
- D : Le champ cristallin.

III-2-6 Modèle de Ashkin Teller (AT)

Le modèle Ashkin Teller (AT) [29] est une généralisation du modèle Ising à un système à quatre composants. Ce modèle est l'un des plus importants [30], en raison de la richesse des phénomènes critiques révélés par ses diagrammes de phases en deux et trois dimensions [31]. Le modèle AT est une version échelonnée du modèle à huit sommets [32]. L'intérêt pour ce modèle s'est considérablement accru après l'apparition de l'article de Fan [33] dans lequel il a démontré que le modèle Ashkin Teller peut être construit comme une superposition de deux modèles d'Ising couplés par une interaction à quatre spin. À l'intérieur de chaque modèle d'Ising, il existe une interaction J_2 au voisin le plus proche à deux spins et les différents modèles d'Ising sont liés par un coefficient d'interaction à quatre spin J_4 . Par conséquent, ce

modèle comprend trois paramètres d'ordre $\langle \sigma \rangle$, $\langle S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$, où le dernier est l'effet de l'ordre des paires de spins σ et S . Il a été démontré que le modèle AT pourrait être décrit sous une forme Hamiltonienne appropriée aux systèmes de spin. Sous cette forme, le modèle peut être considéré comme deux modèles d'Ising couplés. Si deux de ces modèles d'Ising sont identiques, le modèle est alors appelé modèle d'Ashkin-Teller Isotrope, sinon le modèle est un modèle d'Ashkin-Teller anisotrope [34]. Il a notamment suscité un intérêt théorique important car il s'agit d'une généralisation simple et non triviale du modèle d'Ising, qui présente une grande variété de comportements critiques, en fonction du choix des paramètres (J_1 , J_2 , J_4) [18]. Il est intéressant de noter que le comportement critique non universel le long d'une ligne auto-double, où les exposants varient continuellement [35], est l'une des propriétés critiques importantes de la (ATM). D'autre part, ce modèle présente une ligne critique dans son diagramme de phase, comprenant des transitions de phases de premier et de second ordre et de nombreux points tricritiques [36]. Ce modèle est intéressant au moins de deux points de vue : premièrement, il possède un riche diagramme de phase incluant une ligne critique, et, deuxièmement, il a une réalisation physique intéressante comme le sélénium adsorbé sur la surface de $Ni(100)$ [37]. En outre, le modèle Ashkin Teller peut être utilisé pour décrire les propriétés thermodynamiques des cuprates supraconducteurs [38], la réponse élastique de la molécule d'ADN à la force et au couple externes [39] et les interactions chimiques dans les alliages métalliques [40]. Le modèle original Ashkin et Teller a permis différentes interactions dans chaque sous-système, où (Wu et Lin) [41] ont proposé qu'il devrait y avoir deux transitions de phase. L'Hamiltonien de ce modèle est considéré comme deux modèles d'Ising superposés couplés par un terme d'interaction à quatre spin [29].

Cependant l'Hamiltonien du modèle Ashkin Teller est décrit comme suite :

$$H_{AT} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_4 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \sigma_i \sigma_j \quad (\text{III-12})$$

Où :

- Les spins S et σ sont localisés sur les sites i et j dans un réseau.
- $\langle i, j \rangle$: S'exécute sur l'interaction des voisins les plus proches.
- J_1 et J_2 : Sont les interactions d'échanges bilinéaires entre les spins $S - S$ et $\sigma - \sigma$, respectivement.
- J_4 : Indique le coefficient de l'interaction à quatre spin.

Les trois cas particuliers de cette Hamiltonien sont :

- Si les deux sous systèmes J_1 et J_2 sont égaux ($J_1 = J_2$), alors nous avons le cas Isotrope et si les deux interactions d'échange bilinéaire J_1 et J_2 sont différentes ($J_1 \neq J_2$) donc, c'est le cas d'anisotropie
- Si le coefficient de l'interaction à quatre spin J_4 est nul, le modèle Ashkin Teller est réduit à deux modèles d'Ising indépendants.
- Si $J_1 = J_2 = J_4$, le modèle Ashkin Teller est réduit au modèle de Potts à 4 états.

III-2 Méthode de Monte Carlo

La naissance de la simulation numérique a commencé au début des années cinquante, lorsque les premiers ordinateurs ont été utilisés à des fins civiles [42]. La simulation fournit des informations complémentaires aux outils théoriques. Une fois que la modélisation pour un système physique donné a été définie, le travail consiste ensuite à déterminer les propriétés statistiques du modèle en réalisant une simulation [42]. Depuis 1944, la méthode de Monte Carlo sont connues et systématiquement développées. Il s'agit en particulier des méthodes de Monte Carlo, qui forment la classe la plus grande et la plus importante de méthodes numériques utilisées pour résoudre des problèmes de physique statistique. Les simulations informatiques de Monte Carlo sont désormais un outil standard dans des domaines scientifiques tels que la physique de la matière condensée, y compris les problèmes de physique des surfaces, la physique chimique, y compris l'étude des solutions, les réactions chimiques, les statistiques sur les polymères [43]. La notion de simulation de Monte Carlo est bien plus ancienne que l'ordinateur. Il concerne les expériences utilisant des nombres aléatoires comme approche statistique. Cet outil de recherche est largement utilisé et appliqué par de nombreux professionnels de différents domaines, que ce soit la médecine, la biologie, la finance, la recherche opérationnelle en physique [13]. Cette méthode, qui a été introduite en physique de la matière condensée par Métropolis en 1953, consiste en une méthode d'intégration numérique basée sur le hasard qui permet de résoudre de nombreux problèmes sans solution, tels que par exemple l'évaluation d'intégrales sur des domaines complexes et / ou de grande taille [18].

La méthode de Monte Carlo provient du fait que cette méthode utilise des nombres aléatoires similaires à ceux sortant des jeux de roulette [43]. La méthode de Monte Carlo en physique statistique étudie les modèles de systèmes thermodynamiques en équilibre et hors équilibre par simulation stochastique par ordinateur. A partir d'une description du système physique souhaité en termes de modèle hamiltonien, on utilise des nombres pseudo- aléatoires pour

construire la probabilité appropriée avec laquelle les différents états générés des systèmes doivent être pondérés. Par probabilité appropriée, on entend pour les systèmes d'équilibre la probabilité thermodynamique définie selon l'ensemble micro-canonique, canonique ou grand canonique [44].

Dans une simulation de Monte Carlo, nous essayons de suivre la “*dépendance temporelle*” d'un modèle pour lequel le changement, ou la croissance, ne se déroule pas d'une manière rigoureusement prédéfinie (par exemple selon les équations de mouvement de Newton) mais plutôt d'une manière stochastique qui dépend d'une séquence de nombres aléatoires qui est générée pendant la simulation [45]. Cette méthode de simulation utilise un algorithme statistique qui se base sur la génération de nombres aléatoires. Cela rappelle les jeux de hasard pratiqués dans les casinos de Monte Carlo.

III-2-1 Principe de la méthode de Monte Carlo

Les principes de base de la méthode de Monte Carlo sont :

a. Échantillonnage d'importance

Le principe de la méthode de Monte Carlo est de choisir un échantillon comprenant les états prédominants. Cette opération est appelée l'échantillon important. En effet, les états de l'échantillon ne sont pas équiprobables, mais sont répartis selon la distribution de probabilité de Boltzmann donnée dans l'équation (III-13) qui améliore l'estimation [5].

$$p_a = \frac{e^{\frac{-E_a}{kT}}}{Z} \quad (\text{III-13})$$

Avec :

- E_a : L'énergie de l'état a.
- K : La constante de Boltzmann.
- T : La température.

La recherche de valeurs moyennes représentent les principaux objectifs des simulations Monte Carlo. Pour accélérer le processus, les résultats doivent être orientés vers des valeurs plus probables [13].

La moyenne thermique de la quantité Q est exprimée par la somme de tous les états du système et par leurs probabilités respectives [13] :

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_a Q_a e^{-\beta E_a}}{\sum_a e^{-\beta E_a}} \quad (\text{III-14})$$

Cette moyenne ne peut être calculée que pour les très petits systèmes. Pour les grands systèmes, la somme sur un sous-ensemble d'états induit des imprécisions. La méthode de Monte Carlo sélectionne au hasard un sous-ensemble d'états à partir d'une distribution (p_a) à spécifier [13].

Pour un nombre à l'état fini, $M = \{a_1, \dots, a_M\}$ avec une distribution de probabilité $P(m)$ est nécessaire alors :

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{Q_{a_i} e^{-\beta E_{a_i}}}{P_{a_i}}}{\sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{P_{a_j}}\right) e^{-\beta E_{a_j}}} \quad (\text{III-15})$$

Donc, quand $M \rightarrow \infty$, $\langle Q_M \rangle = Q$, M reste à déterminer pour l'amélioration de l'expression de Q .

Pour cela, on considère une probabilité égale entre les états des systèmes ; c'est-à-dire, $P_{a_i} = P_{a_j}$.

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^N Q_{a_i} e^{-\beta E_{a_i}}}{\sum_{j=1}^N e^{-\beta E_{a_j}}} \quad (\text{III-16})$$

b. Chaîne de Markov

La partie délicate de la réalisation d'une simulation de Monte Carlo est la production d'un ensemble aléatoire approprié d'états en fonction de la distribution de probabilité de Boltzmann [46]. Pour commencer, on ne peut pas simplement choisir des états au hasard et les accepter ou les rejeter avec une probabilité proportionnelle à $e^{-\beta E_a}$. Ce ne serait pas mieux que notre schéma initial d'échantillonnage aléatoire des états ; nous finirions par rejeter pratiquement tous les états, puisque les probabilités de leur acceptation seraient exponentiellement faibles. Au lieu de cela, presque tous les algorithmes de Monte Carlo s'appuient sur les processus de Markov pour choisir les états utilisés [47]. La chaîne de Markov est le mécanisme qui génère un état b à partir d'un autre état a connu.

Les méthodes de Monte Carlo utilisent ce processus de Markov pour choisir les états considérés.

La chaîne de Markov évolue selon l'équation suivante [46]:

$$\frac{dp_a}{dt} = -\sum_a W(a \rightarrow b)p_a(t-1) + \sum_b W(b \rightarrow a)p_b(t-1) \quad (\text{III-17})$$

Où :

- $W(a \rightarrow b)$ et $W(b \rightarrow a)$: Représentent les probabilités de transition de l'état a à l'état b et vice-versa.
- t : Désigne le temps du processus de Markov.

Le premier terme représente toutes les transitions possibles vers l'état a , alors que le second correspond à toutes les transitions possibles vers l'état b .

Cet état généré n'est pas toujours identique; il scanne le système en recherchant de nouveaux états avec la probabilité de transition $W(a \rightarrow b)$ auxquels il impose deux conditions [46]:

- ❖ La probabilité de transition est constante avec le temps;
- ❖ La probabilité de transition dépend des propriétés du système sur les états a et b .

Cela signifie que la probabilité de transition $W(a \rightarrow b)$ d'un état a à un autre b du processus de Markov reste toujours constante et doit satisfaire la relation [13] :

$$\sum_a W(a \rightarrow b) = 1 \quad (\text{III-18})$$

Dans une simulation de Monte Carlo, nous appliquons un processus de Markov à plusieurs reprises pour générer une chaîne d'état de Markov [48].

c. Ergodicité

L'ergodicité est une condition qui permet le passage d'un état du système à un autre pendant une durée suffisamment longue au cours du processus de Markov. Si toutes les probabilités de transition d'un état donné sont nulles, l'ergodicité n'est pas satisfaite [13].

d. Balance détaillée

L'autre condition que nous imposons à notre processus de Markov est la condition d'équilibre détaillé. Cette condition est celle qui garantit que c'est la distribution de probabilité de Boltzmann que nous générons une fois que notre système est arrivé à l'équilibre, plutôt que toute autre distribution [46].

L'équilibre des détails est utile pour rester équilibré. Mathématiquement, nous pouvons exprimer cela comme suit [13] :

$$\sum_a p_a W(a \rightarrow b) = \sum_b p_b W(b \rightarrow a) \quad (\text{III-19})$$

A partir de l'équation (III-18), on peut trouver alors :

$$p_a = \sum_b p_b W(b \rightarrow a) \quad (\text{III-20})$$

Toutefois, cette condition n'est pas suffisante pour dire que l'équilibre est décrit par la distribution de Boltzmann-Gibbs. Pour surmonter cette difficulté, nous appliquons donc une autre condition à la probabilité de transition. Pour ce faire, l'équilibre spécifique est donné par [13] :

$$p_a w(a \rightarrow b) = p_b w(b \rightarrow a) \quad (\text{III-21})$$

Cette condition montre que l'exigence d'équilibre spécifique élimine le concept de cycle limite. Comme nous considérons un système en équilibre thermique, la distribution de probabilité est l'équation de Boltzmann qui est alors [13]:

$$w(a \rightarrow b) e^{-\beta E_a} = w(b \rightarrow a) e^{-\beta E_b} \quad (\text{III-22})$$

L'équation (III-21) est la condition importante pour le choix de la transition de probabilité $w(a \rightarrow b)$. L'objectif principal est donc de créer un programme qui construit la chaîne de Markov en fonction des probabilités de transition [13].

Un choix simple de la probabilité de transition est :

$$w(a \rightarrow b) \propto e^{-1/2\beta(E_a - E_b)} \quad (\text{III-23})$$

e. Probabilité d'acceptation

Après l'avoir décrit précédemment comme un élément essentiel pour obtenir efficacement et rapidement un système en état d'équilibre, nous avons également montré que nous pouvons générer un processus de Markov avec lequel nous pouvons trouver de nouveaux états avec une probabilité qui peut répondre à l'équation (III-21). Toutefois, il est difficile de déterminer le processus de Markov approprié pour créer un nouvel état à partir d'un autre état antérieur avec un bon ensemble de probabilités de transition [46]. Selon l'équation d'équilibre détaillée, les probabilités de transition doivent satisfaire :

$$\frac{w(a \rightarrow b)}{w(b \rightarrow a)} = \frac{p_b}{p_a} = e^{-\beta(E_a - E_b)} \quad (\text{III-24})$$

Ceci signifie que les inconnues $w(a \rightarrow b)$ à définir ne dépendent pas de la fonction Z , mais seulement du facteur de Boltzmann associé à l'énergie de chaque état qui peut être déterminé [5].

Les méthodes standard existantes ne répondent parfois pas aux besoins de chaque nouveau problème. C'est pourquoi, nous estimons nécessaire de construire des algorithmes pour résoudre ce problème. Afin de résoudre ce problème, nous proposons plusieurs processus de Markov. Il est à noter que lorsqu'il nous est difficile de prévoir le processus de Markov qui donne le bon résultat de la transition, nous avons recours au taux d'acceptation pour trouver de bonnes probabilités de transition à partir de tout processus de Markov [46, 13].

La probabilité de transition est exprimée par :

$$w(a \rightarrow b) = g(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b) \quad (\text{III-25})$$

Où :

- $g(a \rightarrow b)$: Représente la probabilité de sélection, cette probabilité permet de générer un nouvel état b à partir de l'ancien état a par algorithme.
- $A(a \rightarrow b)$: Correspond à la probabilité d'acceptation (appelée également le taux d'acceptation), cette probabilité est pour l'acceptation du changement d'état. La valeur de probabilité d'acceptation est aléatoire entre 0 et 1.

Si $A(a \rightarrow b) = 0$ pour toutes les transitions, cela revient certainement à dire cela :

$$w(a \rightarrow a) = 1 \quad (\text{III-26})$$

L'équation (III-26), représente la valeur la plus importante qu'elle puisse prendre et implique que nous ne pourrions jamais quitter l'état b [46]. Cela nous offre une liberté totale dans le choix de la probabilité de sélection $g(a \rightarrow b)$, puisque la contrainte (III-24) détermine seulement le rapport [5] :

$$\frac{w(a \rightarrow b)}{w(b \rightarrow a)} = \frac{g(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b)}{g(b \rightarrow a)A(b \rightarrow a)} \quad (\text{III-27})$$

Avec :

$\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} \in [0, \infty[$, alors $g(a \rightarrow b)$ et $g(b \rightarrow a)$ peuvent prendre toutes les valeurs souhaitées.

Pour éviter que l'algorithme soit lent, l'acceptation choisie est proche de 1. Pour créer l'algorithme de Monte Carlo, nous allons créer un algorithme qui va générer les états successifs simplement avec $g(a \rightarrow b)$ données, puis nous allons sélectionner les états qui sont utiles pour la probabilité d'acceptation [13].

III-2-2 Algorithme de Métropolis

L'algorithme de Métropolis [49] a été développé en 1953 au laboratoire national de *Los Alamos* dans le cadre du programme d'armes nucléaires, principalement par les familles *Rosenbluth* et *Teller*. L'algorithme Métropolis est l'une des solutions les plus simples et les plus performantes pour les problèmes de simulation de transition de phase [46]. Cet algorithme nous permettra de présenter un grand nombre de concepts généraux impliqués dans un véritable calcul de Monte Carlo, notamment l'équilibrage, la mesure des valeurs moyennes et le calcul des erreurs [46]. L'algorithme le plus important et le plus fréquemment utilisé pour le processus de Markov est celui inventé par Métropolis et al. [50]. Il permet de calculer la variation de l'énergie du système résultant du passage de la configuration a à b . Si le changement d'énergie est négatif, alors la nouvelle configuration est automatiquement acceptée ; si, le cas contraire, elle est positive, la nouvelle configuration est acceptée avec probabilité $e^{-\beta(E_b - E_a)}$. Ainsi, l'algorithme optimal est celui dans lequel [5]:

$$p(a \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_a)} & \text{Si } E_b - E_a > 0 \\ 1 & \text{Si ailleurs} \end{cases} \quad (\text{III-28})$$

Le critère d'accessibilité est satisfait de nouveaux états sont choisis de telle manière que toute nouvelle configuration b peut en principe être obtenue à partir de a en un nombre fini d'étapes.

L'algorithme de Métropolis se présente comme suit :

1. Nous partons d'une configuration initiale (spin distribué aléatoirement).
2. Nous choisissons un spin k au hasard et considérons son retournement $S_k \rightarrow -S_k$.
3. Nous calculons la variation énergétique correspondante ΔE .
4. Si $\Delta E < 0$; on accepte le renversement.
5. Si $\Delta E > 0$; on accepte le renversement avec une probabilité $p = \exp(-\beta\Delta E)$.
6. Un nombre aléatoire est tiré r entre 0 et 1.
7. Si $r < p$; on accepte, sinon on refuse.
8. Nous revenons à la deuxième étape (2) et ainsi de suite.

La mise en œuvre pratique de l'algorithme de Métropolis est extrêmement simple et c'est l'une des principales raisons de son grand succès. Nous présentons un organigramme de cette procédure (voir Figure III-3) [50], nous avons utilisé le mot "*spin*" comme abréviation de "degré de liberté", sans impliquer aucune restriction dans le cas des systèmes magnétiques.

Tout d'abord, une nouvelle configuration b du système est générée à partir de l'actuelle a par une méthode quelconque. Par exemple, dans une simulation du modèle Ising, on peut essayer d'inverser la direction d'un seul spin. Ce spin peut être choisi au hasard, ou chacun des spins de l'échantillon peut être inversé à son tour. Ensuite, les énergies des nouvelles et anciennes configurations sont comparées ; c'est généralement facile, car le changement d'énergie lors de l'inversion d'un spin n'implique que les valeurs de quelques spins voisins. Enfin, un nombre pseudo-aléatoire généré par l'ordinateur est utilisé pour accepter ou rejeter les probabilités de déplacement données par l'équation (III-28) [50].

Lorsque le système a atteint l'équilibre, plusieurs quantités thermodynamiques importantes ont été mesurées. Pour le modèle Ising, l'algorithme Métropolis est utilisé pour calculer les quantités thermodynamiques d'intérêt. Par conséquent, l'aimantation (\mathbf{M}), l'énergie du système (\mathbf{E}), la susceptibilité magnétique (χ), la chaleur spécifique (C_v) et le cumulant du quatrième ordre du Binder des deux paramètres d'ordre (U_L), etc...

Ces grandeurs sont données par [13]:

- ❖ L'énergie interne par site :

$$E_T = \frac{1}{L^3} \langle H \rangle \quad (\text{III-29})$$

- ❖ L'aimantation du système étudié par site :

$$M = \frac{1}{L^3} \langle \sum_{i=1}^N S_i \rangle \quad (\text{III-30})$$

- ❖ La susceptibilité magnétique :

$$\chi = \frac{\beta}{L^3} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (\text{III-31})$$

- ❖ La chaleur spécifique :

$$C_v = \frac{\beta^2}{L^3} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (\text{III-32})$$

- ❖ Le paramètre de cumulant d'ordre 4 du Binder:

$$U_L = 1 - \frac{\langle M \rangle^4}{3 \langle M^2 \rangle^2} \quad (\text{III-33})$$

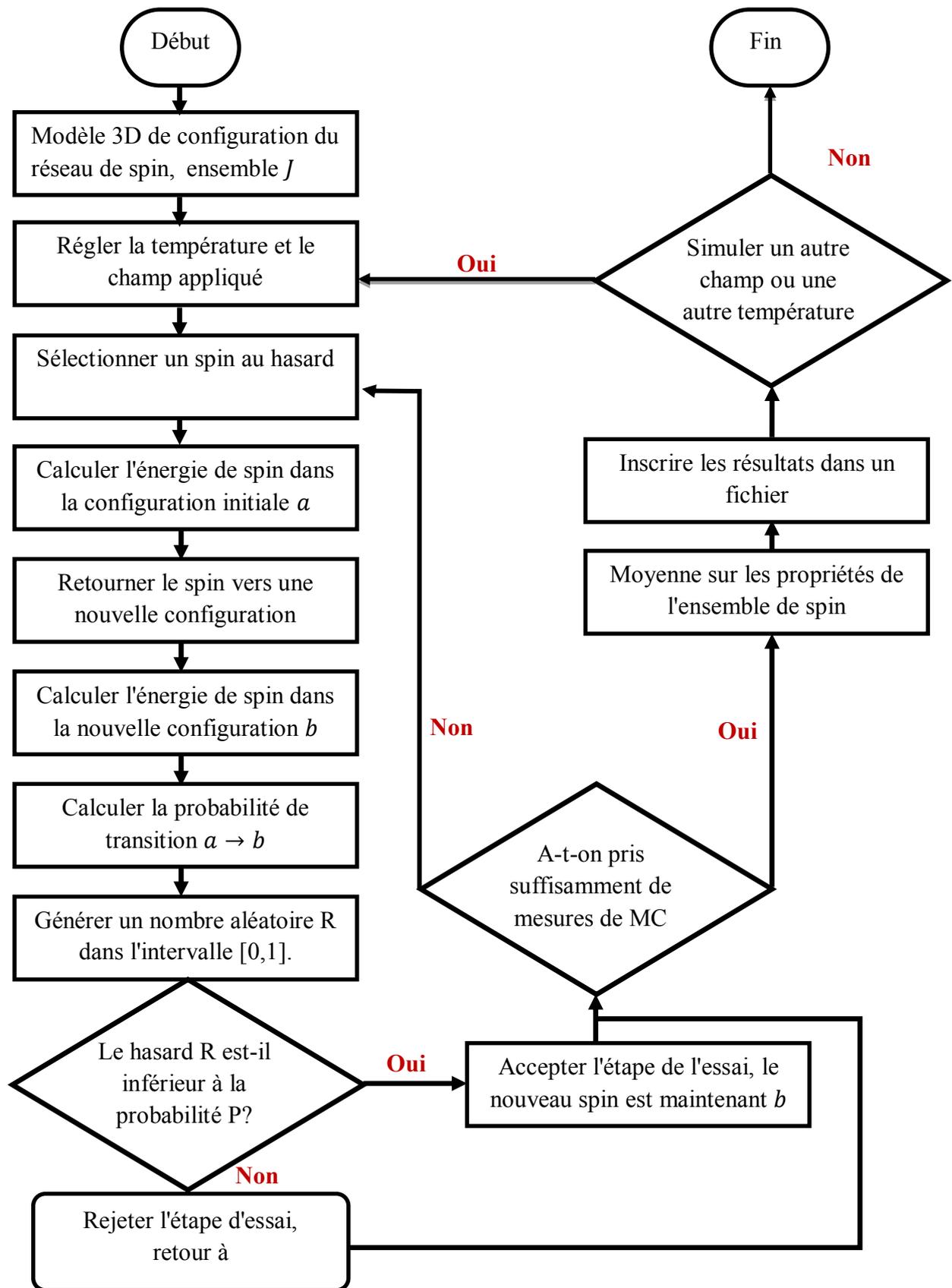


Figure III-3 : Schéma présente l'organigramme d'une simulation de Monte-Carlo avec l'algorithme de Métropolis.

III-3 Analyse d'erreurs

Il y a deux sortes d'erreurs dans la simulation de Monte Carlo : l'erreur statistique et l'erreur systématique.

III-3-1 Erreur statistique

L'erreur statistique est le résultat de changements aléatoires dans le système de simulation d'une mesure à l'autre et ne peut être supprimée qu'en générant un grand nombre d'échantillons indépendants [4].

Supposons qu'il s'agisse d'une quantité distribuée suivant une distribution gaussienne. La valeur moyenne $\langle y \rangle$ est [4] :

$$\langle y \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad (\text{III-34})$$

L'erreur standard est déterminée de la manière suivante :

$$error = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad (\text{III-35})$$

On sait que :

$$\sigma^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 \quad (\text{III-36})$$

Nous remplaçons la valeur de σ et $\langle y \rangle$ dans l'équation (III-35), alors nous obtenons :

$$error = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (y_i - \langle y \rangle)^2} \quad (\text{III-37})$$

III-3-2 Erreur systématique

L'erreur systématique résulte de la procédure utilisée pour réaliser une mesure et qui affecte l'ensemble de la simulation. Comme les erreurs systématiques ne sont pas incluses dans la fluctuation de la mesure individuelle, elles sont plus difficiles à estimer que les erreurs statistiques. Dans la simulation du modèle Ising, la principale source d'erreur systématique consiste à choisir le nombre de pas de temps de Monte Carlo pour équilibrer le système [4]. Il n'existe pas de méthode générale pour évaluer les erreurs systématiques.

Chaque source de cette erreur doit être examinée séparément et une stratégie doit être définie pour minimiser autant que possible ce type d'erreur [4].

III-4 Conditions aux limites

La méthode de Monte Carlo permet d'étudier les propriétés d'un système fini, tandis que nous nous intéressons généralement aux propriétés d'un système infini. Pour pouvoir effectuer une extrapolation significative à la limite thermodynamique [5]. L'objectif d'une simulation est de reproduire de façon approximative un système réel infini. À cette fin, des conditions limites sont appliquées pour simuler un système infini. Il y a différents types de conditions limites, on peut citer :

III-4-1 Conditions aux limites périodiques

Une manière d'éliminer les limites de bord, également appelées limites de réseau, consiste à encapsuler un réseau de dimension d sur un tore de dimension $(d + 1)$ [51]. Cette condition limite est appelée "*condition limite périodique*" a pour effet que le premier spin d'une rangée considère le dernier spin de la rangée comme un voisin le plus proche et vice versa [45]. Le même principe s'applique aux spins en haut et en bas d'une colonne. La figure III-4, illustre cette procédure pour un réseau carré. Cette procédure permet d'éliminer efficacement les effets de frontière, mais le système est toujours caractérisé par la taille L du réseau fini puisque la valeur maximale de la longueur de corrélation est limitée à $\frac{L}{2}$. Et les propriétés résultantes du système sont différentes de celles du réseau infini correspondant [45].

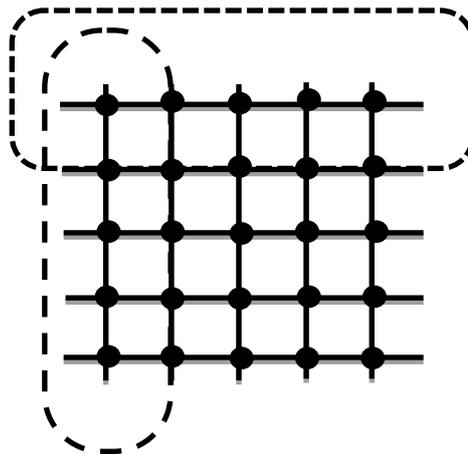


Figure III-4 : Conditions de limite périodiques pour le modèle bidimensionnel d'Ising.

III-4-2 Conditions aux limites du bord libre :

Un autre type de limite n'implique aucun type de connexion entre l'extrémité d'une ligne et une autre ligne du réseau. Au lieu de cela, les spins à la fin d'une ligne ne voient aucun voisin dans cette direction, comme le montre la figure III-5 pour le modèle bidimensionnel d'Ising [45].

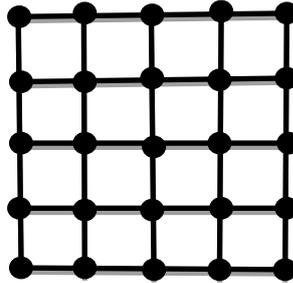


Figure III-5 : Exemple d'application des conditions aux limites pour le modèle 2D d'Ising : condition limite de bord libre.

Cette limite libre introduit non seulement un maculage de taille finie, mais aussi des effets de surface et de coin dus aux liens pendants sur les bords. (De très fortes modifications peuvent se produire près de surfaces et le comportement du système n'est pas homogène). Cependant, les propriétés des systèmes à bords libres diffèrent généralement de celles du système infini avec des conditions aux limites périodiques [52].

III-5 Conclusion

En première lieu de ce chapitre, que nous avons passée en revue, consiste principalement à étudier plusieurs modèles magnétiques, qu'ont été introduits à l'origine pour décrire le magnétisme dans les matériaux ferromagnétiques. Ces modèles nous ont permis de modéliser tous les phénomènes où des effets collectifs qui se sont produits en raison d'interactions locales entre les particules.

En second lieu, nous avons détaillé la méthode Monte Carlo utilise un algorithme statistique qui repose sur la génération de nombres aléatoires, en mettant l'accent sur l'algorithme de Métropolis, afin d'examiner les propriétés magnétiques des matériaux et pour déterminer les propriétés d'une variété de différents modèles d'équilibre.

Dans le chapitre suivant, nous allons étudier les propriétés magnétiques et les comportements critiques des films minces magnétique de modèle Ashkin Teller, de matériau ferromagnétique

dans un réseau cubique simple par la simulation de Monte Carlo basée sur l'algorithme de Métropolis.

Bibliographies

- [1] N. Métropolis and S. Ulam, The Monte Carlo method. *Journal of the American statistical association*. 44 (1949) 335-341.
- [2] H. G. Katzgraber, Introduction to Monte Carlo methods. arXiv preprint arXiv:0905.1629 (2009).
- [3] M. Roger, Méthodes de Monte-Carlo. Service de Physique de l'Etat Condensé CEA Saclay. (2008).
- [4] I. Zergoug, Modèle d'Ising dilué. Thèse de doctorat. Université d'Oran.(2015).
- [5] S. Zriouel, Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphène. Thèse de doctorat. Université Mohammed V-Rabat. (2016).
- [6] K. Hubert, T. Jacqueus, La physique statistique en exercices: Licence 3 et Master de physique. Vuibert. (2008). P. 304.
- [7] Y. Velenik, Le modèle d'Ising. Université de Genève. (2009).
- [8] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Phys.* 31 (1925) 253-258.
- [9] Santos E. E., Gayathri Muthukrishnan, Efficient simulation based on sweep selection for 2-D and 3-D Ising spin models on hierarchical clusters, *Parallel and Distributed Processing Symposium. Proceedings 18th International*. (2004). P. 229.
- [10] C. Gaetan et X. Guyon, Modélisation et statistique spatiales. Springer. (2011).
- [11] V. S. Blé, Modélisation parallèle des phénomènes nanothermiques. Thèse de doctorat. Université du Québec à Trois-Rivières. (2009).
- [12] A. T. Bui, Caractérisation et modélisation du comportement des matériaux magnétiques doux sous contrainte thermique. Thèse de doctorat. Université Claude Bernard-Lyon I. (2011).
- [13] M. Arejda, Theoretical study of the magnetic properties and the magnetocaloric effect of materials: spintronics materials (Dendrimer models) and magnetic refrigeration materials (MnAs/MnBi). Thèse de doctorat. Université Mohammed V Rabat.(2017).
- [14] F. Y. Wu, Exactly solved models: a journey in statistical mechanics: selected papers with commentaries (1963-2008). World Scientific. (2009). P. 661.
- [15] E. Carlon, Advanced Monte Carlo Methods. Academic year. 2014.
- [16] H. Feldner, Propriétés magnétiques de systèmes à deux dimensions : système frustré de spins sur réseau carré et propriétés magnétiques de systèmes finis de graphène. Thèse de doctorat. Université de Strasbourg. (2012).
- [17] A. J. Abar, et al. Monte Carlo study of a Blume–Capel mixed thin film with four-spin interactions. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 28 (2015) 2721-2730.
- [18] I. Dani, Contribution à l'étude théorique des propriétés magnétiques des matériaux cuprates multiferroïques en multicouches et nano-films. Thèse de doctorat. Université Mohammed V-Rabat.(2015).
- [19] D. Mukamel, M. Blume, Ising model for tricritical points in ternary mixtures. *Phys. Rev. A*. 10 (1974) 610.
- [20] D. Furman, S. Dattagupta, R.B. Griffiths, Global phase diagram for a three-component model. *Phys. Rev. B*. 15 (1977) 441.

- [21] J. Lajzerowicz, J. Sivardie' re, Spin-1 lattice-gas model. I. Condensation and solidification of a simple fluid. *Phys. Rev. A.* 11 (1975) 2079.
- [22] J. Sivardie' re, J. Lajzerowicz, Spin-1 lattice-gas model. II. Condensation and phase separation in a binary fluid. *Phys. Rev. A.* 11 (1975) 2090.
- [23] S. A. Kivelson, V. J. Emery, H.Q. Lin, Doped antiferromagnets in the weak-hopping limit. *Phys. Rev. B.* 42 (1990) 6523.
- [24] B. Boughazi, M. Boughrara, and M. Kerouad. Phase diagrams and magnetic properties of a ferrimagnetic cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire. *J. Magn. Magn. Mater.* 354 (2014) 173-177.
- [25] M. Blume, Theory of the first-order magnetic phase change in UO₂. *Phys. Rev.* 141 (1966) 517.
- [26] H.W. Capel, On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica A.* 32 (1966) 966-988.
- [27] K. I. Mazzitello, J. Candia, and E. V. Albano. Far-from-equilibrium growth of magnetic thin films with Blume-Capel impurities. *Phys Rev. E.* 91 (2015) 042118.
- [28] M. Blume, V. J. Emery, R. B. Griffiths, Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He₃-He₄ Mixtures. *Phys. Rev. A.* 4 (1971) 1071.
- [29] J. Ashkin, E. Teller, Statistics of two-dimensional lattices with four component. *Phys. Rev.* 64 (1943) 178.
- [30] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model. *Physica A.* 513 (2019) 104-111.
- [31] I. Dani, N. Tahiri, H. EZ-Zahraouy, A. Benyoussef, Effect of anisotropic Dzyaloshinskii–Moriya interactions on phase diagrams of the Ashkin–Teller model. *Physica A.* 455 (2016) 92-97.
- [32] F. Wegner, Duality relation between the Ashkin-Teller and the eight-vertex model. *J. Phys. C.* 5 (1972) L131.
- [33] C. Fan, On critical properties of the Ashkin-Teller model. *Phys. Lett. A.* 39 (1972) 136.
- [34] Ü. Akinci, Nonequilibrium phase transitions in isotropic Ashkin Teller model, *Physica A.* 469 (2016) 740.
- [35] R. J. Baxter, exactly solved models in statistical mechanics. Academic. London. (1982). P.502.
- [36] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin–Teller model. *J. Magn. Magn. Mater.* 500 (2020) 166365.
- [37] P. Bak, P. Kleban, W. N. Unertl, J. Ochab, G. Akinci, Phase diagram of selenium adsorbed on the Ni (100) surface: A physical realization of the Ashkin-Teller model. *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 1539.
- [38] M. S. Grønsløth, T. B. Nilssen, E. K. Dahl, E. B. Stiansen, C. M. Varma, A. Sudbo, Thermodynamic properties near the onset of loop-current order in high-T_c superconducting cuprates. *Phys. Rev. B.* 79 (2009) 094506.
- [39] C. Zhe, W. Ping, Z. Ying-Hong, Ashkin–Teller formalism for elastic response of DNA molecule to external force and torque. *Commun. Theor. Phys.* 49 (2008) 525.
- [40] M. Sluiter, Y. Kawazoe, Magnetism and chemical interactions in Metallic Alloys. *Sci. Rep. Res. Inst. Tokohu Univ. A* 40 (1995) 301-306.

- [41] F. Y. Wu and K.Y. Lin, Two phase transitions in the Ashkin-Teller model. *J. Phys. C: Solid St. Phys.* 7 (1974) L181.
- [42] P. Viot, Simulation numérique en physique statistique cours commun aux parcours physique des liquides et modélisation statistique et algorithmique des systèmes hors d'équilibre. (2006).
- [43] K. Binder, D. Stauffer, Applications of the Monte Carlo method in statistical physics. 1^{ere} edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. (1984). P. 311-320.
- [44] K. Binder, Application of Monte Carlo method in statistical physics. 2nd editions. Springer- Verlag, Berlin (1984). P. 348.
- [45] D. P. Landau et K. Binder, A Guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. 3rd editions. Cambridge University Press. (2009). P. 489.
- [46] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, Monte Carlo methods in statistical physics. Oxford University Press. New-York (1999) 496-490.
- [47] B. A. Berg, Markov Chain Monte Carlo simulations and their statistical analysis. World Scientific. (2004).
- [48] R. Y. Rubinstein et D. P. Kroese, Simulation and the Monte Carlo method. Wiley-Interscience. (2008).
- [49] N. Métropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087.
- [50] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, The Theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group (Oxford Science Publications). Oxford University Press, (1992). P. 476-474.
- [51] M. P. Allen et D. J. Tildesley, Computer simulation of liquids. Oxford University Press. (1991).
- [52] W. S. Kendall, F. Liang et J. S. Wang, Markov Chain Monte Carlo innovations and applications. World Scientific Publishing Company. (2005). P. 239.

Chapitre IV

**Étude de Monte Carlo des
films minces magnétiques
par le modèle Ashkin Teller
à Spin $-1/2$ et à Spin-1 au
point spécial**

Chapitre IV

Etude de Monte Carlo des films minces magnétiques par le modèle Ashkin Teller à Spin-1/2 et à Spin-1 au point spécial

Les propriétés magnétiques des films minces présentent un intérêt croissant et ont fait l'objet de plusieurs études théoriques et expérimentales. Dans le domaine du magnétisme, le film mince est un thème actuel de phénomènes critiques [1-8]. En outre, la surface peut avoir une phase ordonnée même si le volume est paramagnétique, et elle a une température de transition plus élevée que celle du volume, ce qui a été observé expérimentalement [9, 10, 11]. De plus, en raison de l'existence d'une surface libre, les propriétés magnétiques des matériaux en couches minces sont radicalement différentes de leur équivalent en volume, alors que l'interaction d'échange de surface J_s est différente de celle du volume J_b [12], elle brise la symétrie de translation, ce qui signifie que les atomes de surface sont intégrés dans un environnement moins symétrique que celui des atomes internes [13, 14].

Du point de vue théorique, il existe plusieurs modèles magnétiques qui ont été appliqués aux films minces, tels que le modèle Blume Capel [2], le modèle Blume Emery Griffiths (BEG) [15], le modèle Heisenberg [14], etc...

Dans ce travail, nous allons étudier un modèle magnétique avec une interaction à quatre spin appelé modèle Ashkin-Teller sur un film mince. Ce modèle est l'un des modèles les plus importants [16], en raison de la richesse des phénomènes critiques révélés par ses diagrammes de phase bidimensionnels et tridimensionnels [17]. Le modèle Ashkin-Teller (AT) [18] proposé initialement pour un mélange à quatre composants, est défini comme une généralisation de modèle Ising à un système à quatre composants.

Les caractéristiques les plus stimulantes et intéressantes de ce modèle est le comportement critique non universel le long d'une ligne auto-duale, où les exposants varient continuellement [19] et la présence de nouvelles phases partiellement ordonnées [20].

Dans notre travail, nous nous intéressons pour la première fois à notre connaissance aux films minces dans le cas du modèle Ashkin-Teller (AT), de matériau ferromagnétique, dans un réseau cubique simple et nous considérons que toutes les interactions bilinéaires (surface et volume) et le couplage à quatre spin sont limités aux premiers voisins les plus proches. Par conséquent, la plupart des modèles appliqués aux films minces ont été de caractère d'universalité Ising, et nous nous intéressons à un modèle non universel qui est le modèle Ashkin Teller appliqué aux films minces.

Le travail présenté dans cette thèse est divisé en deux parties:

- ❖ *Dans la partie A* : Nous avons étudié l'effet de l'interaction de couplage à quatre spin J_4 sur les comportements critiques et les propriétés thermodynamiques de surface des films minces du modèle Ashkin Teller à spin-1/2, où une attention particulière est portée au développement des exposants de l'aimantation de surface du système, par la méthode de Monte Carlo, basée sur l'algorithme de Métropolis.
- ❖ *Dans la partie B* : Nous avons abordé le même système, mais nous avons introduit un autre paramètre qui est l'effet du champ cristallin D/J_{2b} sur les diagrammes de phases et les propriétés magnétiques de ce système de modèle Ashkin Teller à spin-1, par la méthode de Monte Carlo, basée sur l'algorithme de Métropolis.

IV-A) Etude l'effet de J_4 sur les comportements critiques et les propriétés thermodynamiques de surface des films minces de modèle Ashkin Teller à spin-1/2.

IV-A-1 Modèle et formalisme

Nous considérons un film ferromagnétique mince d'épaisseur N , dans un réseau cubique simple de dimension $(L \times L \times N)$, en unités d'espacement de réseau. La géométrie du film nécessite deux surfaces libres, par exemple : les couches supérieure et inférieure ($Z = 1$ et $Z = N$) [21] et des conditions limites périodiques dans les directions (x, y) sont appliquées pour chaque couche du film. De plus, dans la direction Z qui a une épaisseur limitée N , des conditions aux limites libres sont appliquées. Dans la région de volume du système, le spin a six voisins les plus proches, tandis qu'en surface, le spin a cinq voisins les plus proches.

Le système est décrit par le modèle Hamiltonian Ashkin Teller, qui est décrit comme deux modèles d'Ising superposés couplés par un terme d'interaction à quatre spin [18]. Alors ce système peut être écrit comme suit :

$$H = -\sum_{i,j} J_{2ij} (S_i^Z S_j^Z + \sigma_i^Z \sigma_j^Z) - \sum_{i,j} J_{4ij} (S_i^Z S_j^Z \sigma_i^Z \sigma_j^Z) \quad (\text{IV-1})$$

Où :

$$J_{2ij} = \begin{cases} J_{2s} & Z = 1, Z = N \\ J_{2b} & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{IV-2})$$

Et

$$J_{4ij} = \begin{cases} J_{4s} & Z = 1, Z = N \\ J_{4b} & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{IV-3})$$

Où :

- La sommation n'est effectuée que sur les paires de spins du plus proche voisin, alors que les spins S_i^Z et σ_i^Z sont situés sur les sites d'un réseau cubique et prennent les valeurs $S_i^Z = \pm 1$ et $\sigma_i^Z = \pm 1$.
- J_{2s} et J_{2b} : Désigne les interactions d'échange bilinéaire des deux modèles Ising de surface et de volume.
- J_{4s} et J_{4b} : Sont les interactions pour quatre spin de surface et de volume qui couplent deux modèles d'Ising pour produire le modèle Ashkin Teller (AT).

Les simulations sont réalisées par une méthode numérique de Monte Carlo basée sur l'algorithme de Métropolis, pour un film cubique simple de modèle AT, contenant par le nombre de spins ($L \times L \times N$), tel que N représente le nombre de couches dans le film ou son épaisseur et ($L \times L$) est le nombre de sites dans chaque couche du film. Nous avons étudié des films d'épaisseur $N = 4, 5, 6$ et 10 avec une taille $L = 50$, et nous avons utilisé 10^5 étapes MC pour équilibrer le système et plus (5×10^5) étapes MC pour calculer les observables [22]. Les barres d'erreur ont été calculées à l'aide de la méthode Jackknife [23]. Plusieurs simulations supplémentaires ont été effectuées pour $L = 70, 80$ et 150 , mais aucune différence apparente n'a été constatée avec les résultats présentés dans ce manuscrit.

Lorsque nous étudions les propriétés du film de notre modèle, les quantités les plus intéressantes sont les suivantes :

- ❖ L'aimantation du film par site $|m_\alpha|$ où $\alpha = S^Z, \sigma^Z, \sigma S^Z$.

$$|m_\alpha| = \frac{1}{NL^2} \langle |\sum_{xyz} \alpha(x, y, z)| \rangle \quad (\text{IV-4})$$

- ❖ L'aimantation du film par couche $|m_\alpha(Z)|$ où $1 \leq Z \leq N$.

$$|m_\alpha(Z)| = \frac{1}{L^2} \langle |\sum_{xy} \alpha(x, y, z)| \rangle \quad (\text{IV-5})$$

- ❖ La susceptibilité du film par site χ_α :

$$\chi_\alpha = \frac{NL^2}{k_B T} \left[\left\langle \left(\frac{1}{NL^2} \sum_{xyz} \alpha(x, y, z) \right)^2 \right\rangle - (m_\alpha)^2 \right] \quad (\text{IV-6})$$

- ❖ La susceptibilité du film par couche $\chi_\alpha(Z)$:

$$\chi_\alpha(Z) = \frac{L^2}{k_B T} \left[\left\langle \left(\frac{1}{L^2} \sum_{xy} \alpha(x, y, z) \right)^2 \right\rangle - (m_\alpha(Z))^2 \right] \quad (\text{IV-7})$$

Avec : k_B est la constante de Boltzmann et T est la température absolue.

IV-A-2 Résultats et discussions

Nous étudierons l'influence de l'interaction à quatre composants avec le couplage d'échange J_4 de la surface et de volume, sur les comportements critiques et les propriétés magnétiques du film mince à spin-1/2 sur un réseau cubique simple. En outre, nous intéressons dans le cas des interactions sont ferromagnétiques. Par conséquent, nous avons utilisé dans nos calculs des paramètres qui sont évalués en termes d'interaction d'échange en volume, par exemple : l'interaction d'échange bilinéaire de la surface J_2 est définie par le rapport $R_s = J_{2s}/J_{2b}$, et pour le couplage d'échange J_4 dans deux cas (surface et volume) sont définis respectivement comme suit : $J_{4s} = J_{4s}/J_{2b}$ et $J_{4b} = J_{4b}/J_{2b}$. La température est alors distincte de $k_B T/J_{2b}$, avec k_B fixé à 1.

Ce travail comporte trois parties :

- Les diagrammes de phases.
- Les propriétés thermodynamiques.
- Les exposants effectifs et critiques.

a) Diagrammes de phases

Il est préférable de rappeler les propriétés caractéristiques d'un système ferromagnétique en film mince qui présente des diagrammes de phases intéressants [24]. Dans nos analyses numériques, nous fixons la valeur de l'interaction d'échange en volume J_{2b} par unité, tandis que le rapport (surface / volume) pour J_2 et J_4 et la température $k_B T/J_{2b}$ sont normalisés.

En revanche, nous avons examiné l'effet de couplage d'échange à quatre composants J_4 sur les diagrammes de phases ($k_B T_c/J_{2b}$, $R_s = (J_{2s}/J_{2b})$) pour différentes épaisseurs ($N = 4, 5, 6$ et 10) de film mince ferromagnétique, ce qui est clairement démontré dans la Figure IV-1(a-d) où les températures critiques sont calculées à partir de la divergence des susceptibilités associées aux aimantations, c'est-à-dire le maximum.

D'autre part, pour différentes valeurs de l'interaction de couplage $J_{4s} = J_{4s}/J_{2b}$ et $J_{4b} = J_{4b}/J_{2b}$, la Figure IV-1(a-d) montre des résultats typiques dans lesquels nous pouvons déduire qu'il existe différentes interactions d'échange bilinéaire de surface au point critique de notre système.

Cependant, pour ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 0.0$), c'est le cas où l'effet de surface est dominant par rapport au volume qui appartient au modèle d'Ising (voir la Figure IV-1a), on peut observer que toutes les courbes se croisent en un même point appelé le "point spécial" $R_s = R_{sp}$ avec la valeur $R_s = R_{sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.0$, associée aux trois spins S , σ et σS , où la surface et le volume sont devenus simultanément critiques, correspondant à la température de transition du film $k_B T_c/J_{2b} = 4.5$ qui ne dépend pas de l'épaisseur N , et elle est équivalente à la même valeur de la température de transition du volume $k_B T_c^b/J_{2b}$.

Ensuite, le diagramme de phase de la Figure IV-1b a été déterminé dans le cas où les effets de surface et de volume sont respectivement présents ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 1.0$), nous avons remarqué que ce diagramme présente également un comportement intéressant, qu'il y a une valeur particulière $R_s = R_{1sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.5$ correspondant à la température critique de volume $k_B T_c^b/J_{2b} = 6.3$ associée aux spins S , σ et σS .

D'autre part, l'une des caractéristiques les plus importantes de modèle AT est la présence de nouvelles phases partiellement ordonnées, alors qu'à partir de la variation du couplage d'échange J_4 , nous avons obtenu deux nouvelles phases partiellement ordonnées, la première phase est ($\langle \sigma S \rangle \neq 0$, $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0$) a été obtenue pour ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) qui est présente dans le modèle 3D AT et la deuxième phase est ($\langle S \rangle \neq 0$, $\langle \sigma \rangle \neq 0$, $\langle \sigma S \rangle = 0$) pour ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) (voir Figure IV-2(a-b)).

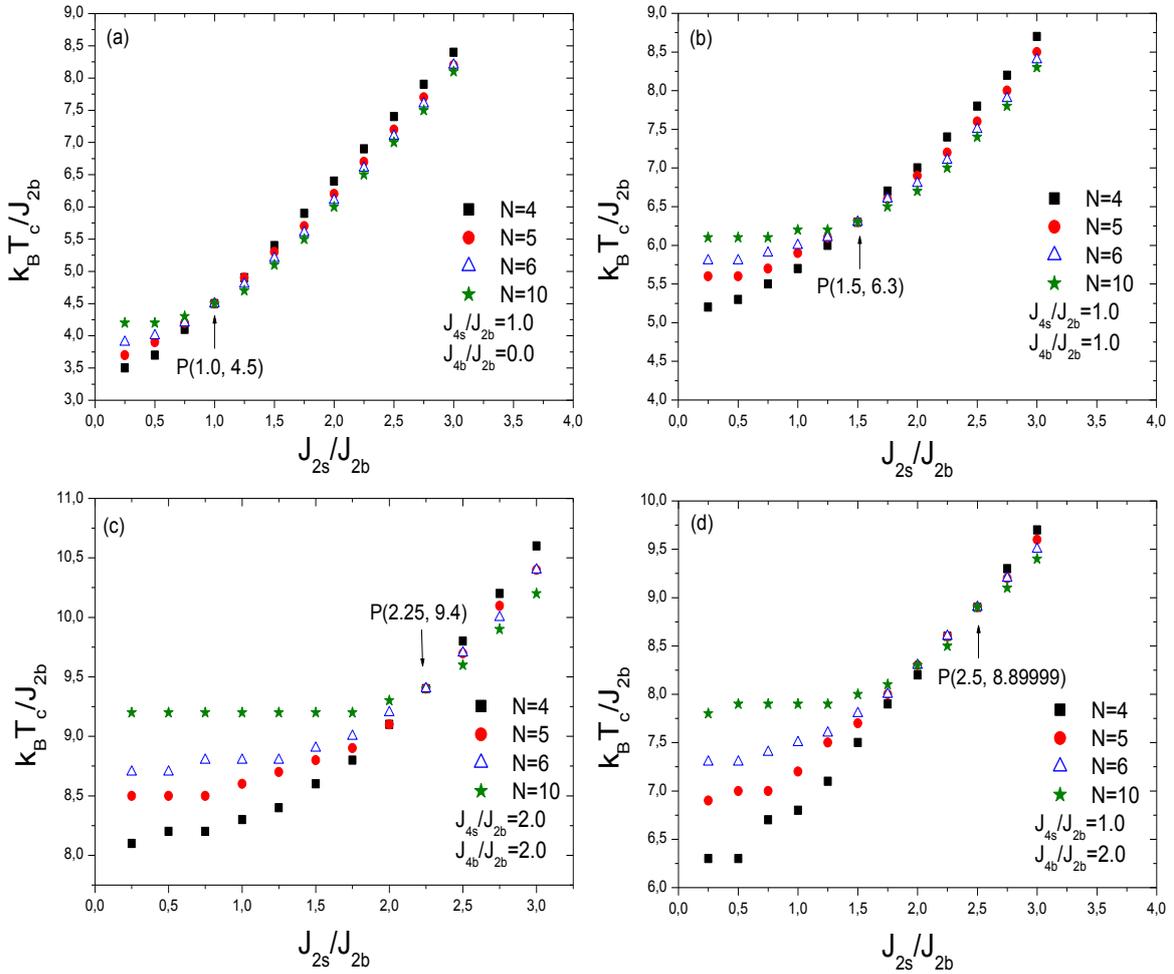


Figure IV-1 : Diagrammes de phases de la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ en fonction de rapport de l'interaction de couplage bilinéaire $R_s = (J_{2s} / J_{2b})$ pour différentes d'épaisseur du film et pour (a) ($J_{4s} / J_{2b} = 1.0$; $J_{4b} / J_{2b} = 0.0$), (b) ($J_{4s} / J_{2b} = 1.0$; $J_{4b} / J_{2b} = 1.0$), (c) ($J_{4s} / J_{2b} = 2.0$; $J_{4b} / J_{2b} = 2.0$) et (d) ($J_{4s} / J_{2b} = 1.0$; $J_{4b} / J_{2b} = 2.0$). Déterminer par la simulation de Monte Carlo pour un système de taille $L = 50$.

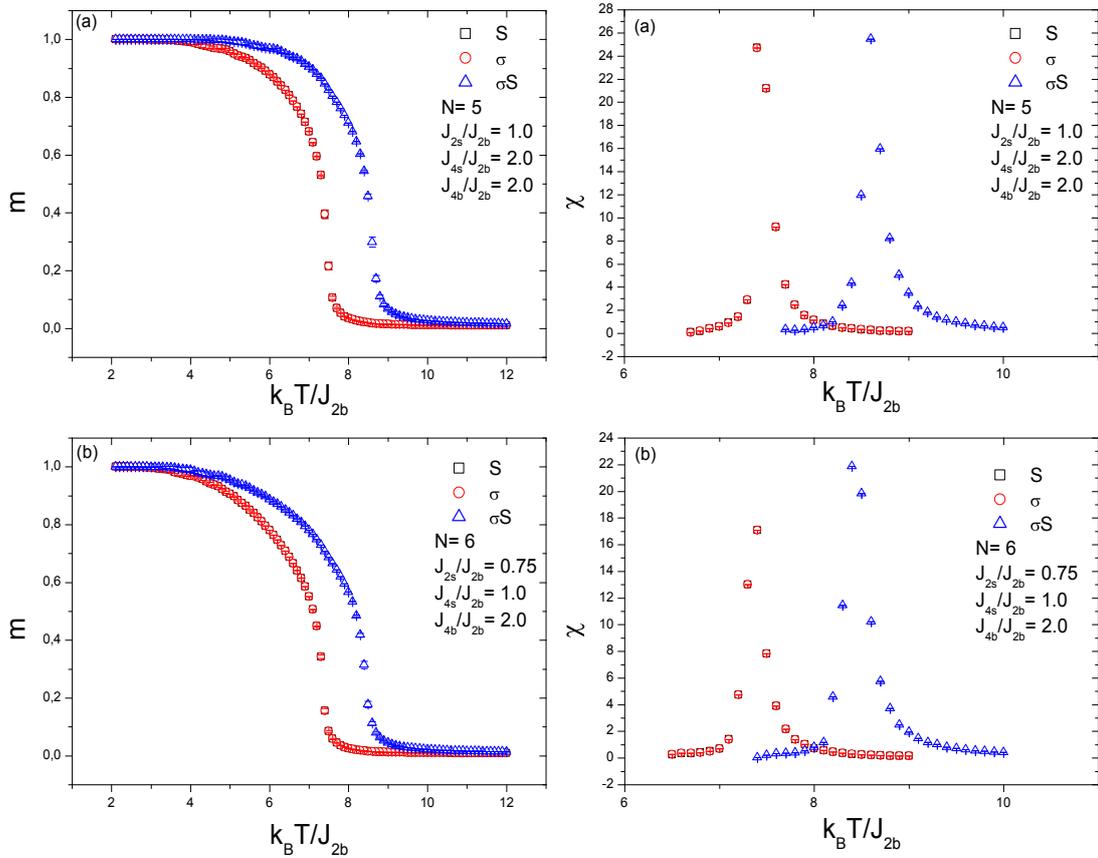


Figure IV-2 : La dépendance thermique des aimantations et des susceptibilités par site avec des barres d'erreur pour (a) ($N = 5, J_{2s}/J_{2b} = 1.0$) dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) et (b) ($N = 6, J_{2s}/J_{2b} = 0.75$) dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), avec la taille du système $L=50$.

La Figure IV-1c, montre un diagramme de phase de film d'épaisseur N (4, 5, 6 et 10) pour ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$). Ainsi, nous avons vu que pour chaque épaisseur N , les lignes critiques de la phase (σS) se rencontrent en un point appelé point multicritique $R_s = R_{2sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 2.25$, qui induit par la simultanité de la criticalité de surface bidimensionnelle et de la criticalité de volume tridimensionnelle, avec la température critique correspondante est ($k_B T_c^b / J_{2b} = 9.4$).

Ensuite, nous avons également constaté dans la Figure IV-1d, qu'il existe un point spécial $R_s = R_{3sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 2.5$ dont la température de transition de volume est $k_B T_c^b / J_{2b} = 8.89999$, pour ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) de la phase ($(S), (\sigma)$) où l'effet de volume est dominant par rapport à la surface ; ceci est très clair dans la Figure IV-1d.

Cependant, nous avons établi que ces diagrammes de phases présentent un comportement intéressant, à savoir la présence d'un couplage spécial R_{sp} où tous les films possèdent une température critique T_c qui est unique pour une épaisseur arbitraire N et pour chaque valeur du couplage d'échange de J_4 .

Néanmoins, nous avons également observé que si le rapport de couplage de surface R_s est inférieur au rapport de couplage de point spécial R_{sp} , la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ du film de modèle Ashkin Teller est inférieure à la température de transition du volume $k_B T_c^b / J_{2b}$, et le magnétisme de volume est dominant par rapport au magnétisme de surface. De plus, nous avons remarqué que lorsque l'épaisseur du film augmente, la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ augmente également et se rapproche asymptotiquement de $k_B T_c^b / J_{2b}$. En revanche, pour $R_s > R_{sp}$, elle est supérieure à la température critique de volume, et elle diminue lorsque l'épaisseur du film est élevée.

Nous avons principalement étudié le cas de $J_4 = 0$ afin de pouvoir examiner nos calculs, et nous avons trouvé des résultats similaires à ceux de référence [26].

b) Propriétés thermodynamiques

Les aimantations et les susceptibilités sont des grandeurs physiques importantes qui décrivent les propriétés de la transition de phase, en particulier sa température critique. Par conséquent, nous avons déterminé la dépendance thermique des profils d'aimantation et des susceptibilités pour deux cas "*par site* et *par couche*" (calculés par les valeurs de l'interaction d'échange bilinéaire de surface au point spécial), qui sont obtenus à partir des équations (IV-4, IV-5, IV-6 et IV-7) sous l'effet de l'interaction d'échange à quatre composantes du modèle Ashkin Teller et pour diverses valeurs de l'épaisseur du film, pour les trois états de spins S , σ et σS , qui sont bien démontrés dans les Figures suivantes.

La Figure IV-3(a-d) présente les aimantations de la surface (m_1) et par site (m) au point spécial $R_s = R_{sp} = 1.0$ (ce point a été trouvé dans la Figure précédente (voir la Figure IV-1a)) en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de ($J_{4s} / J_{2b} = 1.0$; $J_{4b} / J_{2b} = 0.0$). Nous avons observé que les courbes obtenues sont similaires pour tous les spins et pour chaque N du film et qu'elles ont la même température critique T_c , ce qui signifie que l'épaisseur de film mince de modèle Ashkin Teller n'a aucun effet sur la température de transition du film. Ensuite, les aimantations de la surface (m_1) représentant le comportement magnétique autour de T_c .

En outre, la nature de la transition de phase est définie par la continuité et la discontinuité des paramètres d'ordre, tandis que ces courbes présentent un comportement caractéristique de transition de phase de second ordre.

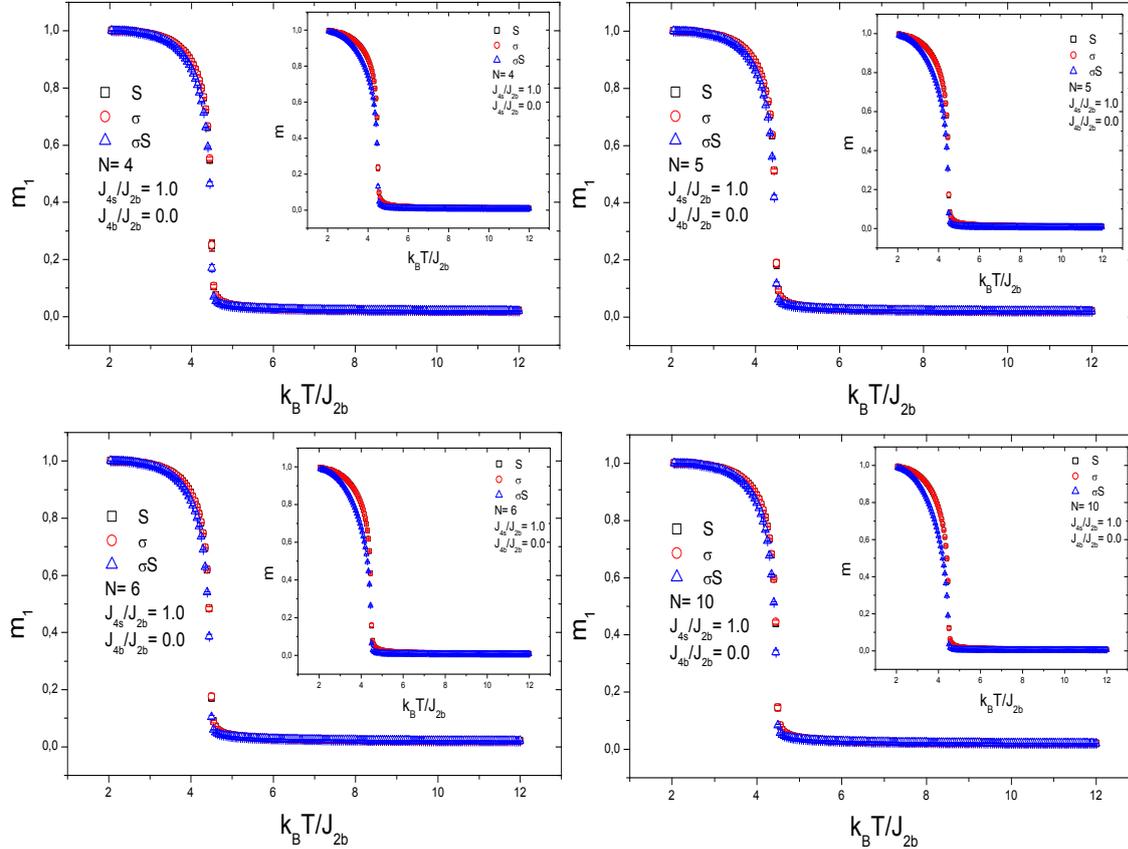


Figure IV-3 : La dépendance des aimantations par couche (m_1) et par site m en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de $(J_{4s} / J_{2b} = 1.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 0.0)$ pour les spins (S), (σ) et (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.0$), pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

La dépendance thermique des susceptibilités de surface (χ_1) et par site (χ) au même point spécial, pour les mêmes variations des paramètres de l'aimantation tels que J_4 et N (voir la Figure IV-3(a-d)) sont représentés dans la Figure IV-4(a-d). De plus, ces susceptibilités sont décrites par la variation de la valeur de l'aimantation. Ainsi, nous avons constaté que tous les pics de ces courbes de susceptibilité sont identiques pour les trois spins (S , σ et σS) et pour chaque N .

Il est donc possible de déterminer la température au pic de susceptibilité magnétique pour illustrer la température critique approximative dans les systèmes finis, à partir de là, on peut

définir dans cette Figure que la température critique T_c de film mince de modèle AT est égale à (4.5), pour toutes les courbes de (χ_1) et (χ) .

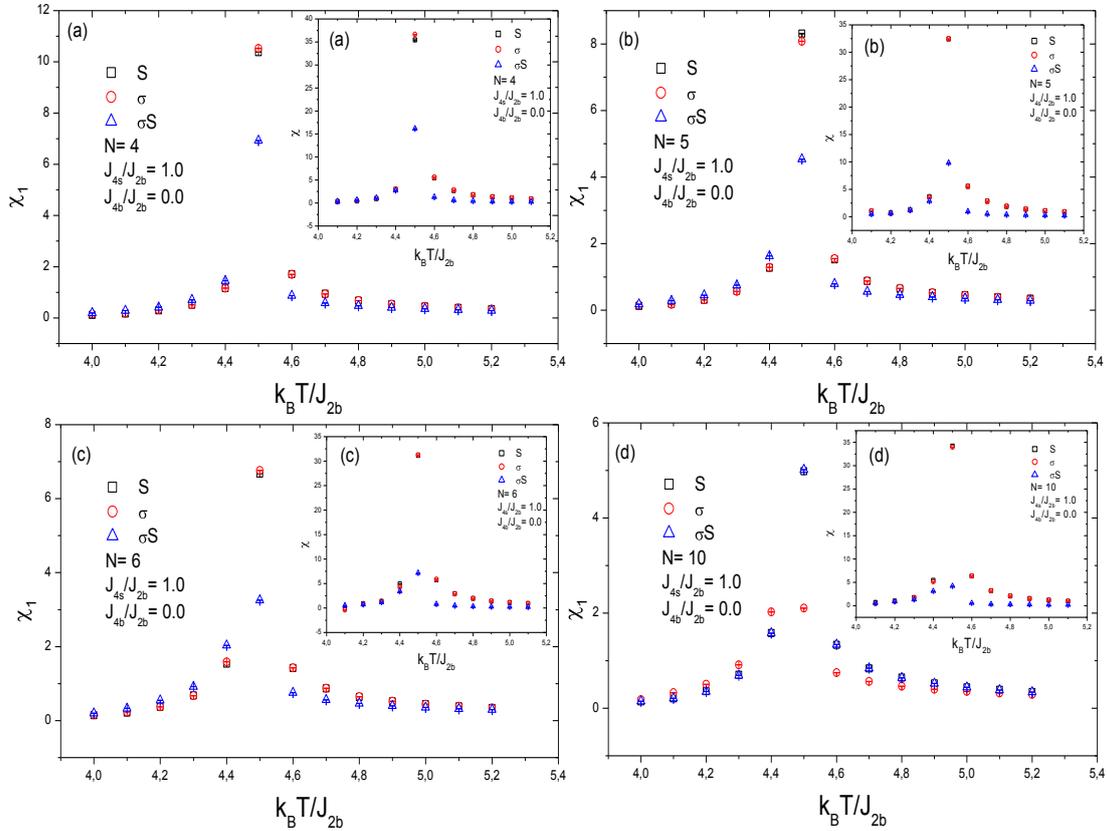


Figure IV-4 : Dépendance thermique de la susceptibilité de surface (χ_1) associée à l'aimantation de surface et de la susceptibilité par site (χ) associée à l'aimantation par site du système, dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 0.0$) pour les spins (S), (σ) et (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.0$) pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

Pour le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 1.0$), nous avons également tracé les aimantations et les susceptibilités en fonction de la température pour les trois états de spin et l'épaisseur du film N allant de 4 à 10 (voir les Figures IV-5(a-d) et 6(a-d)). Les courbes d'aimantation nous ont permis de constater qu'il y a une transition de phase de premier ordre, ce qui est bien illustré dans la Figure IV-5(a-d). Nous avons montré que toutes les susceptibilités divergent au même point de la température de transition de phase $T_c = 6.3$ (Figure IV-6(a-d)).

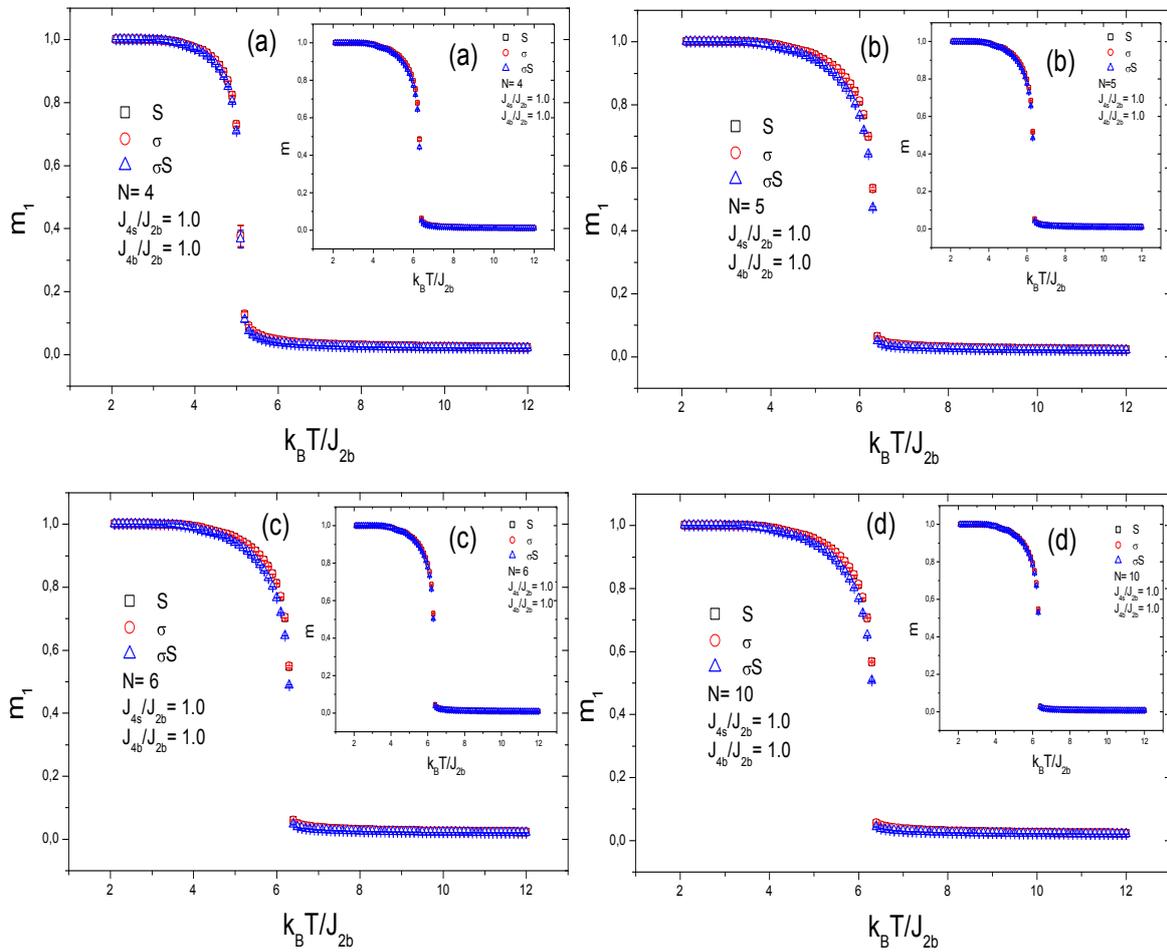


Figure IV-5 : La dépendance des aimantations par couche et par site avec des barres d'erreur en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de $(J_{4s} / J_{2b} = 1.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 1.0)$ pour les spins $(S), (\sigma)$ et (σS) , avec le rapport au point spécial $(R_s = R_{1sp} = 1.5)$, pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

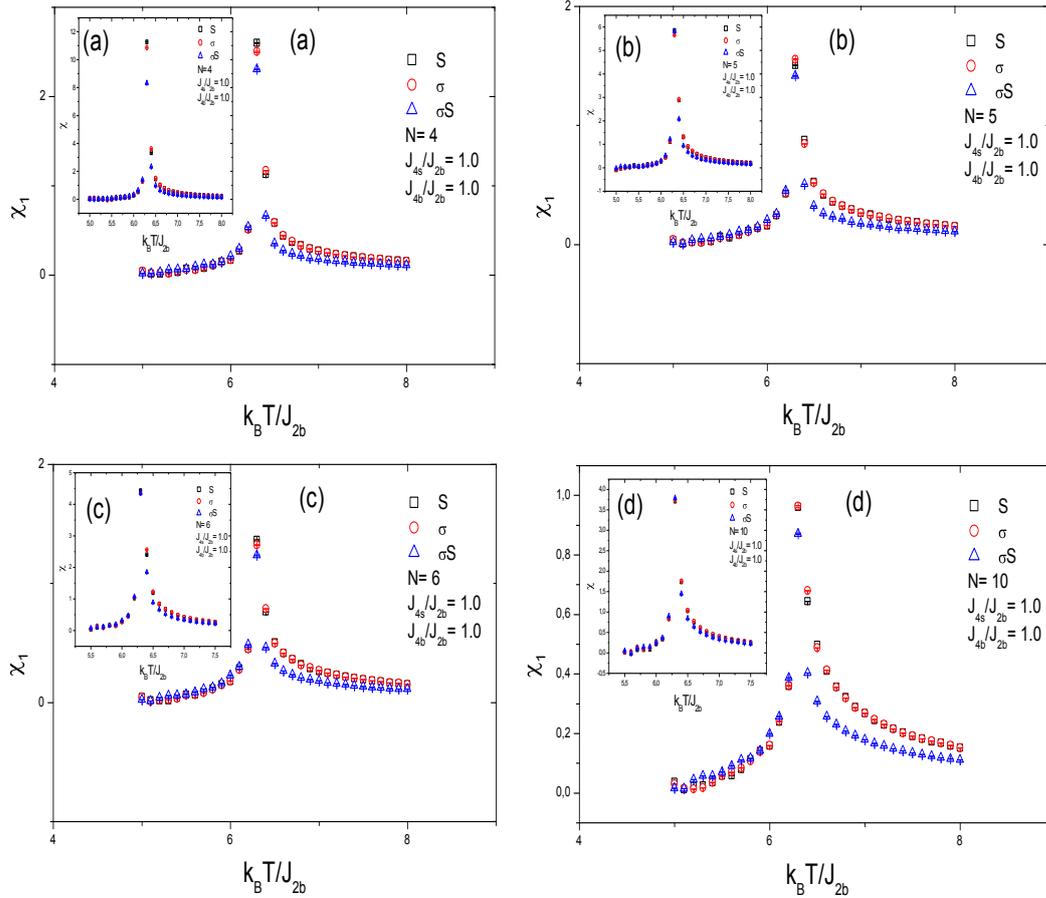


Figure IV-6 : Dépendance thermique des susceptibilités de surface et par site avec des barres d'erreur dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0)$ pour les trois états de spins (S), (σ) et (σS), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{1sp} = 1.5$) pour (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, (c) $N = 6$ et (d) $N = 10$, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

En outre, l'étude des aimantations "*par couche*" et "*par site*" en fonction de la température au point spécial $R_s = R_{2sp} = 2.25$, dans le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, pour le spin (σS), est décrite dans la Figure IV-7. Nous avons observé que dans ce cas, la transition de phase est de second ordre et que les aimantations sont presque identiques, c'est-à-dire qu'elles ont la même température de transition du film T_c . Pour clarifier cela, nous avons examiné les susceptibilités de la surface au point spécial R_{2sp} en fonction de la température (voir la Figure IV-8), montrant que toutes les courbes ont des pics égaux pour toute épaisseur de film N . D'autre part, l'interprétation des résultats obtenus pour le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$ (Figure IV-9 et Figure IV-10) est presque la même que celle obtenue précédemment, la transition est toujours de second ordre, ce qui est clairement indiqué dans la Figure IV-9, à

savoir que les susceptibilités de surface sont liées aux aimantations de surface et les susceptibilités du système correspondent aux aimantations par site.

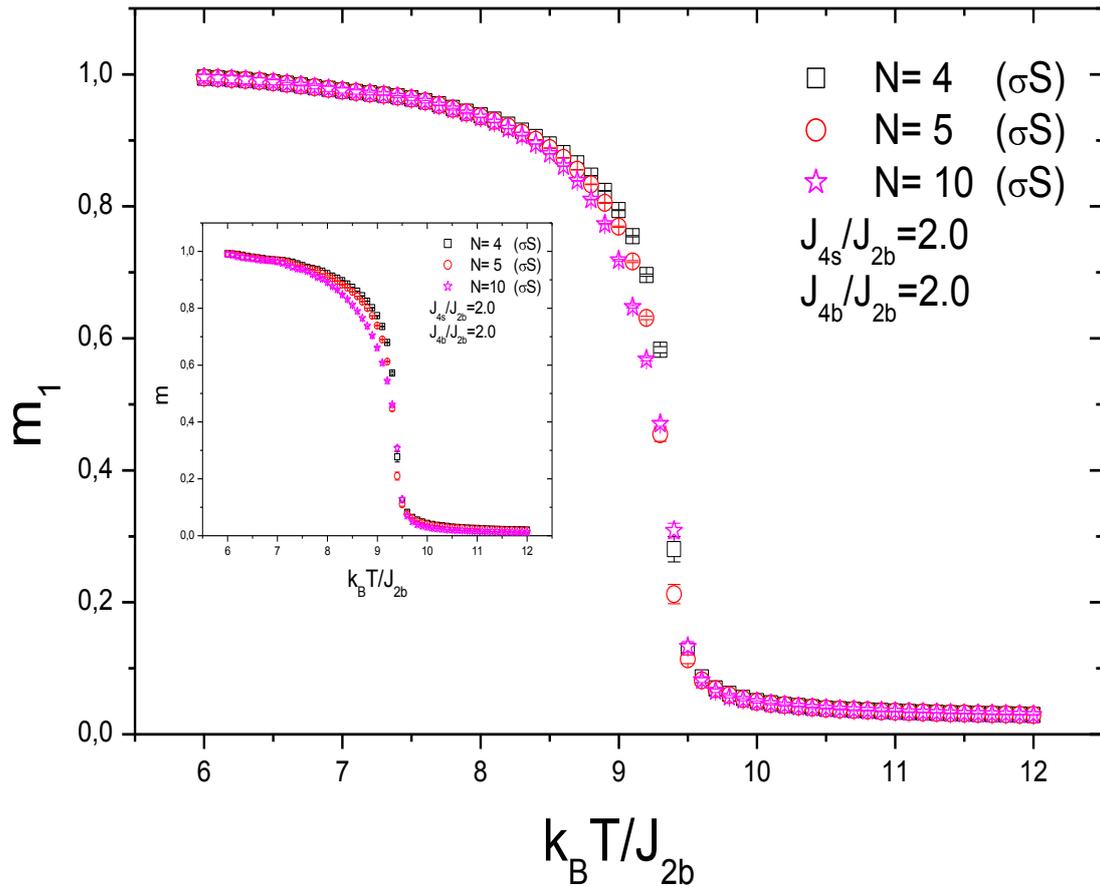


Figure IV-7 : La variation thermique des aimantations par couche et par site avec des barres d'erreur dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$ pour le spin (σS) , avec le rapport au point spécial $(R_s = R_{2sp} = 2.25)$, pour N de 4 à 10, avec la taille du système $L=50$.

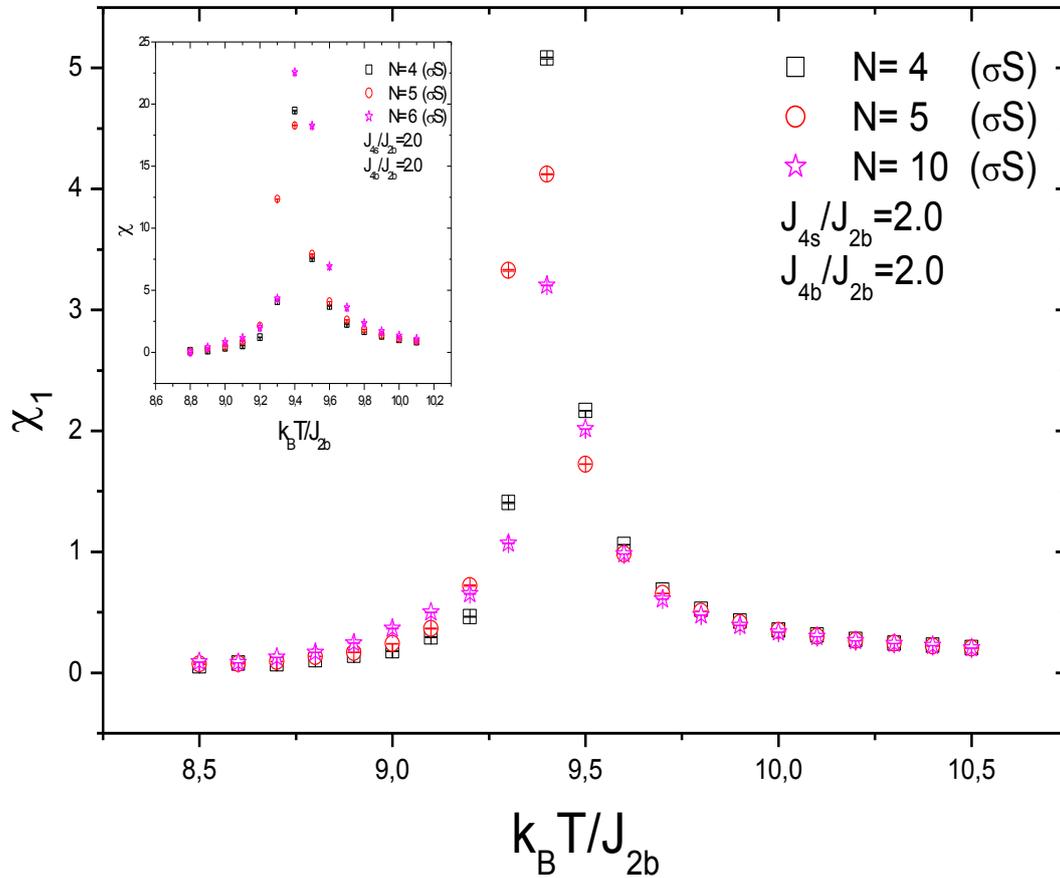


Figure IV-8 : La variation thermique des susceptibilités de surface et par site avec des barres d'erreur dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$ pour le spin (σS) , avec le rapport au point spécial $(R_s = R_{2sp} = 2.25)$, pour $N = 4, 5$ et 10 , avec la taille du système $L=50$.

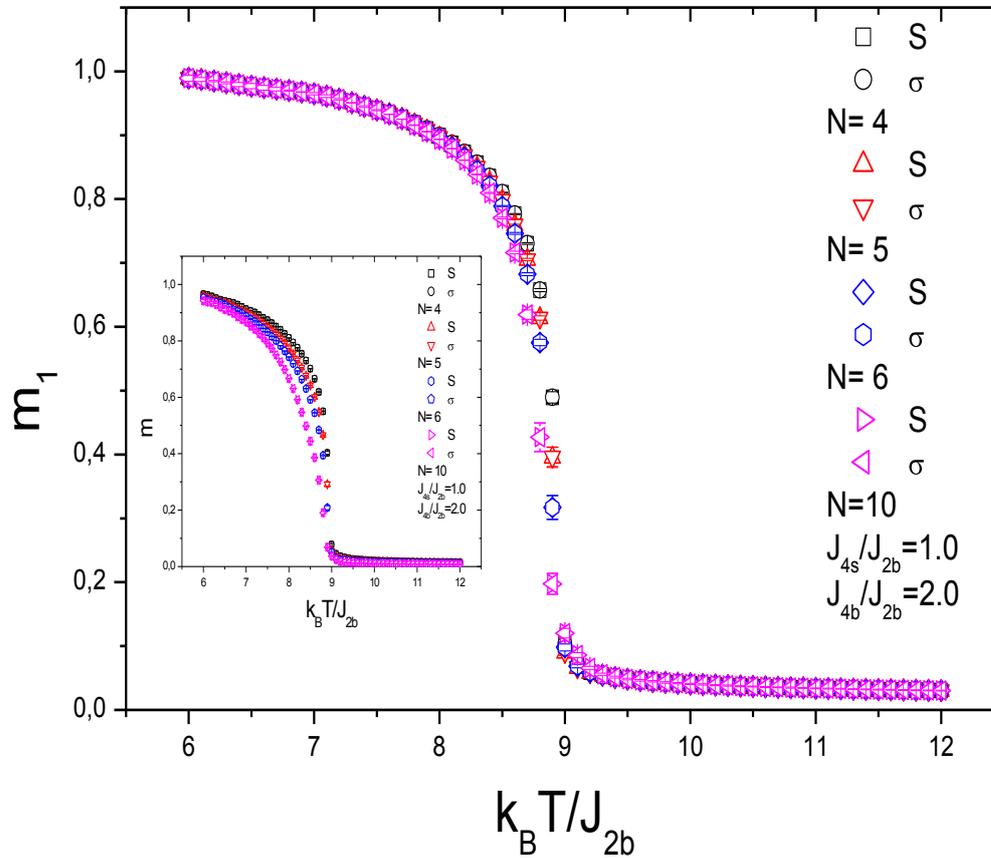


Figure IV-9 : La dépendance des aimantations de surface et par site avec des barres d'erreur en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour les spins ($(S), (\sigma)$), avec le rapport au point spécial $R_s = R_{3sp} = 2.5$), pour N de 4 à 10, avec la taille du système $L=50$.

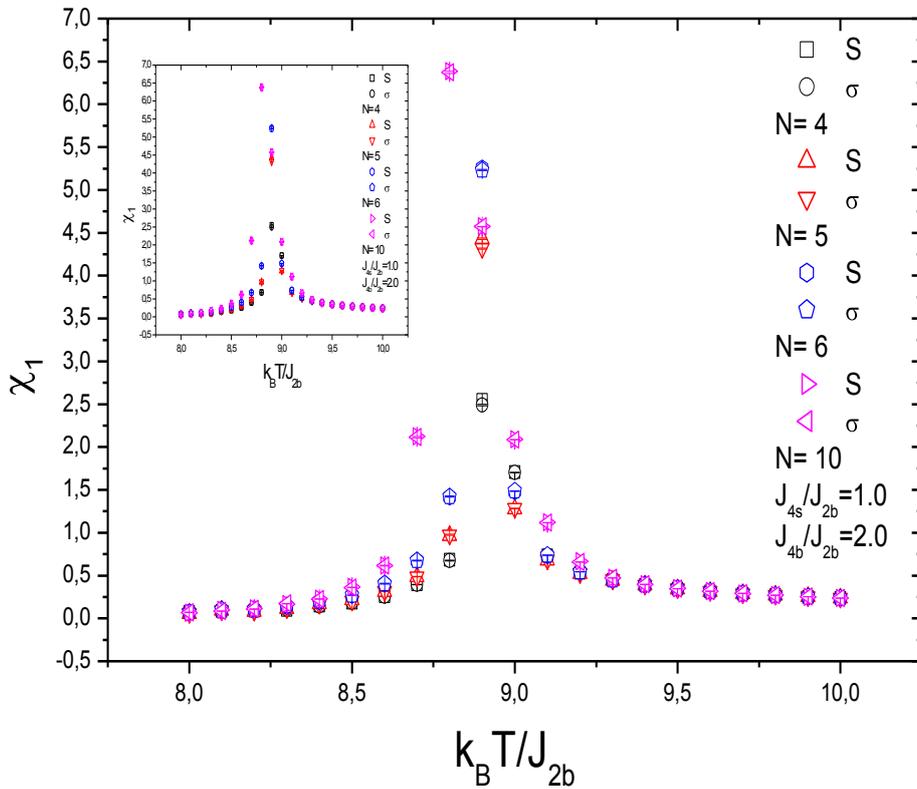


Figure IV-10 : La dépendance des susceptibilités de surface et par site avec des barres d'erreur en fonction de la température $k_B T / J_{2b}$ dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour les spins (S), (σ), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{3sp} = 2.5$), pour N de 4 à 10, avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

c) *Exposants effectifs et critiques.*

Dans cette partie, nous allons calculer les exposants effectifs et nous allons également estimer les valeurs de l'exposant critique de l'aimantation de surface aux transitions spéciales et aux températures critiques, sous l'effet de l'interaction d'échange à quatre composantes J_4 (surface et volume), pour différentes valeurs de l'épaisseur N de film mince de modèle Ashkin Teller, de taille $L \times L$ (200×200) où les effets de taille finie sont négligeables. Enfin, nous avons comparé nos résultats avec ceux d'autres études.

L'aimantation de surface de film Ashkin Teller devrait disparaître à l'approche du point critique tel que :

$$m_1(t) = t^{\beta_{eff1}(t)} \quad (IV-8)$$

Où :

$$t = \frac{|T-T_c|}{T_c} \quad (IV-9)$$

Avec :

- t : la température réduite.
- T_c : la température critique.

Par conséquent, l'exposant effectif de surface β_{eff1} désigne l'équation suivante :

$$\beta_{eff1}(t) = \frac{d \ln(m_1)}{d \ln(t)} \quad (IV-10)$$

L'équation (IV-10) peut être ramenée à une équation simple, en considérant l'approximation de la température discrète réduite t_i et t_{i+1} , nous trouvons alors:

$$\beta_{eff1}(t) = \frac{\ln(m(t_i)/m(t_{i+1}))}{\ln(t_i/t_{i+1})} \quad (IV-11)$$

L'évolution de l'exposant effectif de surface β_{eff1} en fonction de la température réduite " t " pour différentes valeurs de N du film dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 0.0$), au point spécial $R_s = R_{sp} = 1.0$ avec $T_c = 4.5$, est illustrée dans la Figure IV-11. Cette Figure montre l'augmentation de β_{eff1} pour les spins (S) et (σ) avec la croissance de $N = 4$ à 20, et diminue de façon presque linéaire avec l'augmentation de la température réduite. Ensuite, nous avons remarqué que pour les températures éloignées du point critique ($t \geq 20$), les courbes β_{eff1} sont identiques pour tous les N , alors qu'il est possible de démontrer qu'au point spécial, la température critique de tous les films est la même.

Ensuite, la possibilité de déterminer, lorsque " t " tend vers zéro, un exposant critique de l'aimantation de surface β_{1m} pour chaque épaisseur N du film qui est caractérisée par la valeur maximale de l'exposant $\beta_{eff1}(N)$ (voir Figure IV-11).

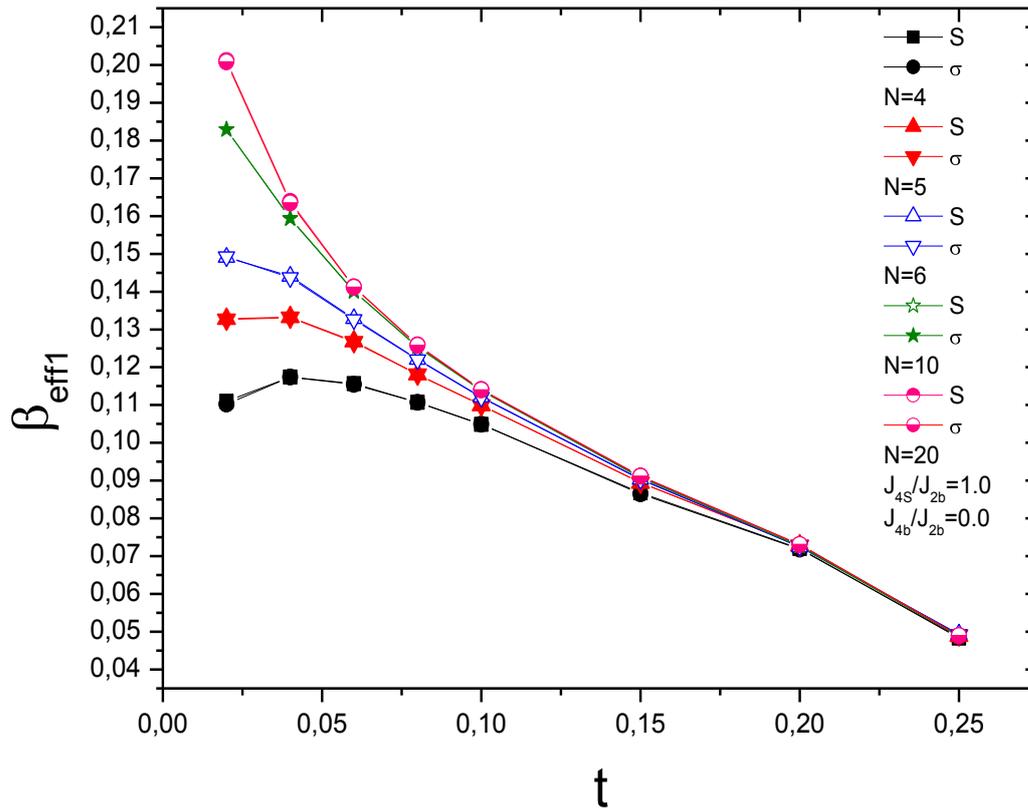


Figure IV-11 : L'exposant effectif de surface β_{eff1} en fonction de la température réduite t pour plusieurs épaisseurs de film pour les spins ((S), (σ)) dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 0.0$), avec $R_s = R_{sp} = 1.0$ et $T_c = 4.5$. La taille du système est $L \times L = 200 \times 200$.

Par conséquent, les valeurs correspondant à l'exposant critique de l'aimantation de surface ($\beta_{1m}(N)$) peuvent également être ajustées linéairement comme indiqué dans la Figure IV-12. Ensuite, lorsque $1/N$ tend vers zéro, la valeur de $\beta_{1(sp)} \approx 0.211 \mp 0.003$, cette valeur est en accord avec la valeur estimée dans le modèle d'Ising en film mince avec $\beta_1^m = 0.211$ [22] et elle est comprise entre ces deux valeurs $\beta_1^m = 0.175 \pm 0.025$ [25] et $\beta_1^m = 0.2375$ [15] [26], ce qui donne que le volume est dominante par rapport à la surface.

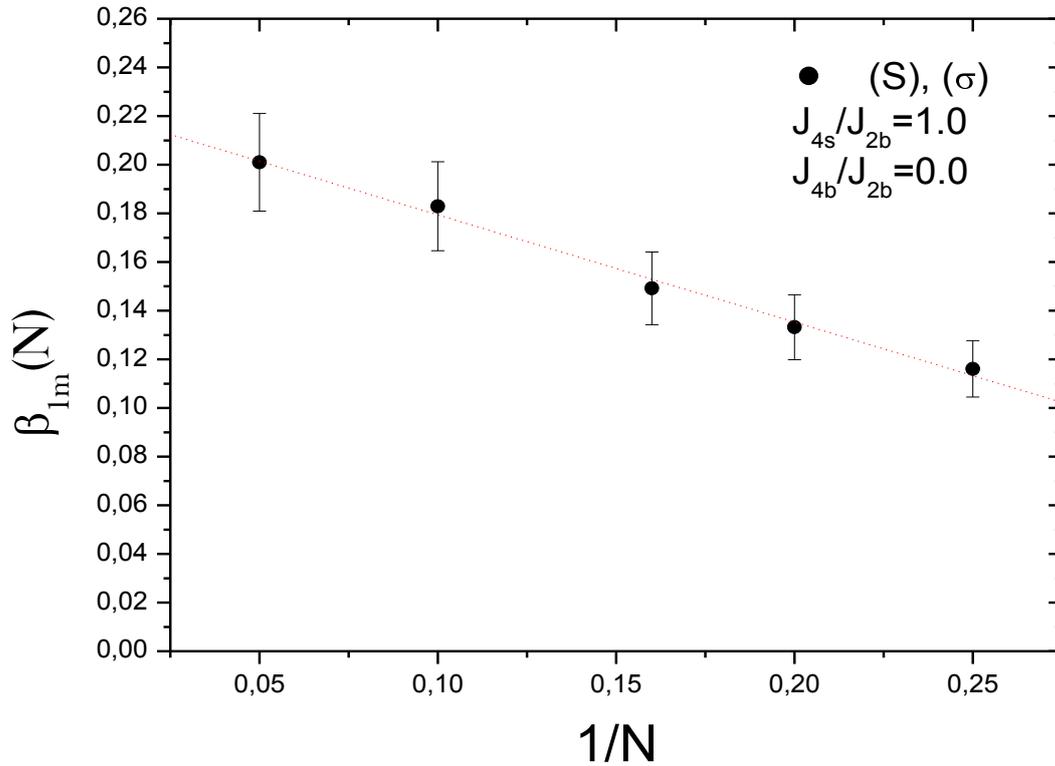


Figure IV-12 : L'exposant critique de l'aimantation de surface $\beta_{1m}(N)$ en fonction de $1/N$, dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 0.0$), la ligne pointillée correspond à l'ajustement linéaire associé aux valeurs maximales des simulations numériques de β_{eff1} .

D'autre part, nous avons également étudié la dépendance thermique de β_{eff1} pour le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$) au point spécial $R_s = R_{2sp} = 2.25$ avec la température critique $T_c = 9.4$, pour l'épaisseur N varie de $N = 4, 5, 10$ et 20 , pour le spin (σS), est montré dans la Figure IV-13. Nous avons constaté que les courbes de β_{eff1} de toutes les épaisseurs de film deviennent identiques à partir de $t \geq 0.20$, ce qui montre que tous les films ont la même température critique au point spécial.

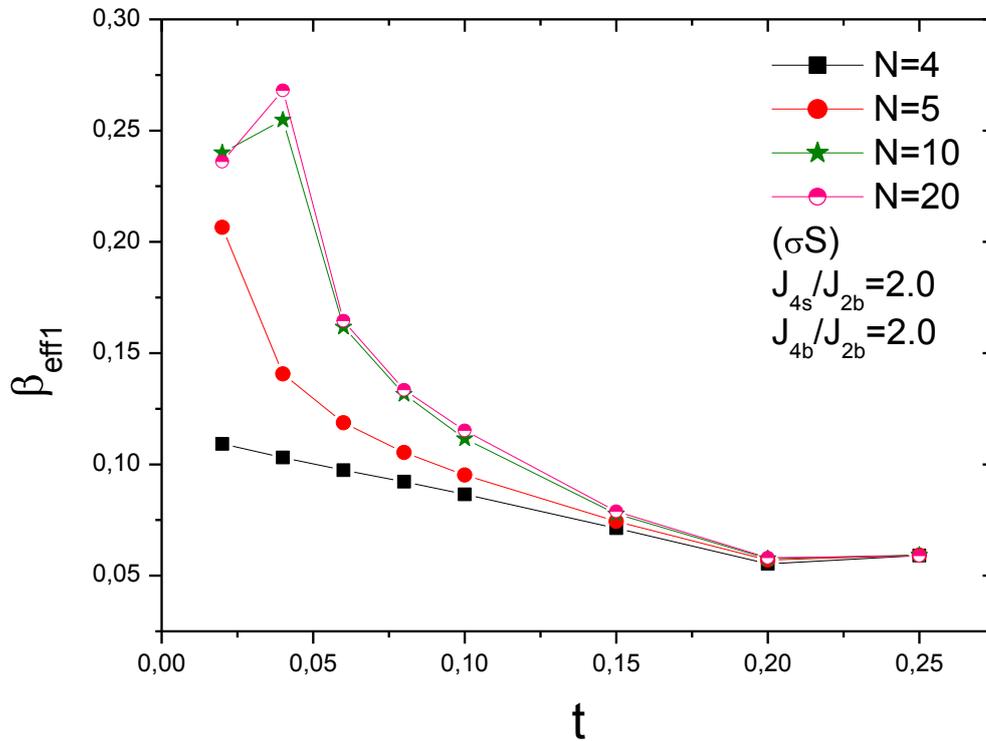


Figure IV-13 : L'exposant effectif de surface β_{eff1} en fonction de la température réduite t pour plusieurs d'épaisseur du film N pour le spin (σS) dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, avec $R_s = R_{2sp} = 2.25$ et $T_c = 9.4$. La taille du système est $L \times L = 200 \times 200$.

Par conséquent, en ajustant linéairement les valeurs correspondant à $\beta_{1m}(N)$ (qui se trouve par les valeurs maximales de l'exposant $\beta_{eff1}(N)$ lorsque $t \rightarrow 0$) (voir Figure IV-14), nous avons estimé la valeur $\beta_{1(2sp)} \approx 0.30 \mp 0.03$, cette valeur est proche de la valeur estimée dans le modèle d'Ising 3D avec $\beta_1^m = 0.3258 \mp 0.0044$ [27], également proche de la valeur $\beta_1^m = 0.3269(6)$ [28].

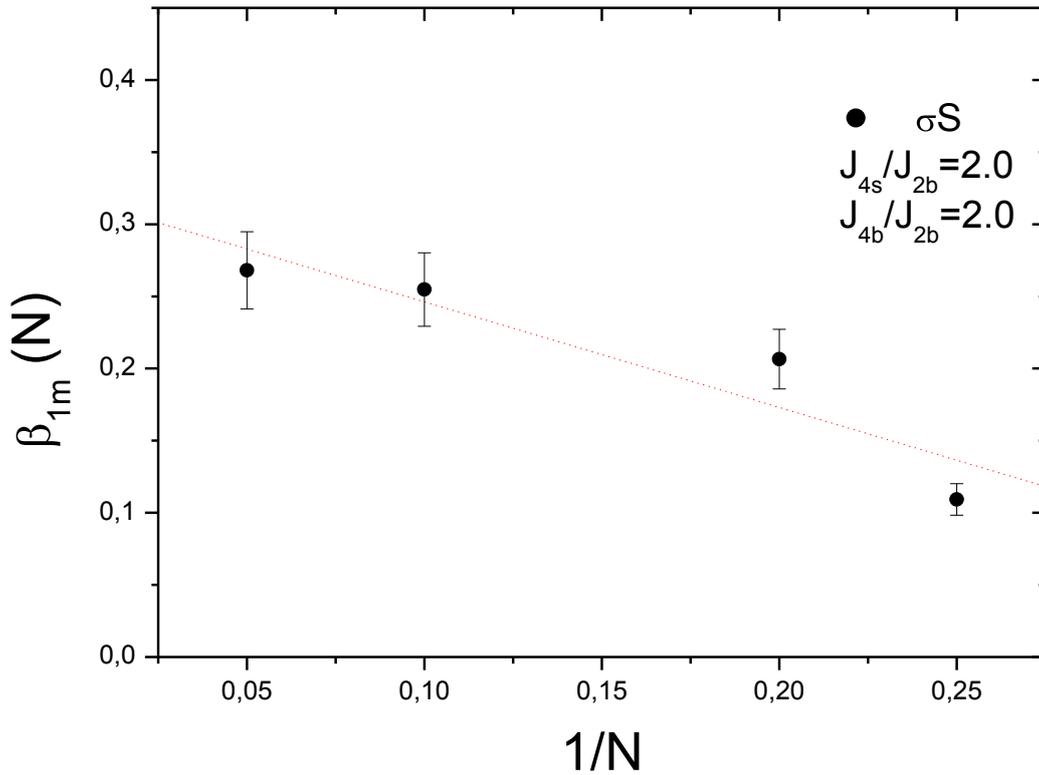


Figure IV-14 : L'exposant critique de l'aimantation de surface $\beta_{1m}(N)$ en fonction de $1/N$, dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), la ligne pointillée correspond à l'ajustement linéaire associé aux valeurs maximales des simulations numériques de β_{eff1} .

L'interprétation des résultats obtenus à partir de la dépendance thermique de l'exposant β_{eff1} dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour les spins (S) et (σ), au point spécial $R_s = R_{3sp} = 2.5$ avec $T_c = 8.89999$, pour N est comprise entre 4 et 20 (Figure IV-15), est la même que celle obtenue précédemment. L'estimation de $\beta_{1m}(N)$ (voir Figure IV-16) dans ce cas est $\beta_{1(3sp)} \approx 0.223 \mp 0.004$, nous avons remarqué que cette valeur est proche de l'estimation de l'exposant critique $\beta_1^m = 0.237(5)$ du modèle tridimensionnel d'Ising du film [29] $\beta_1^m = 0.2375(15)$ [26]. Nous avons également noté que cette valeur est proche avec la valeur calculée par un modèle Ising en film mince tel que : $\beta_1^m = 0.211$ [22] et également proche de l'estimation de l'exposant critique de surface Ising au point de transition spécial en trois dimensions avec la valeur $\beta_1^m = 0.245$ [30, 31]. Nous avons constaté que la valeur que nous avons obtenue est proche de celle calculée dans la Figure IV-12, alors que le volume est dominante par rapport à la surface.

Les résultats obtenus dans notre étude sont résumés dans le tableau IV-1.

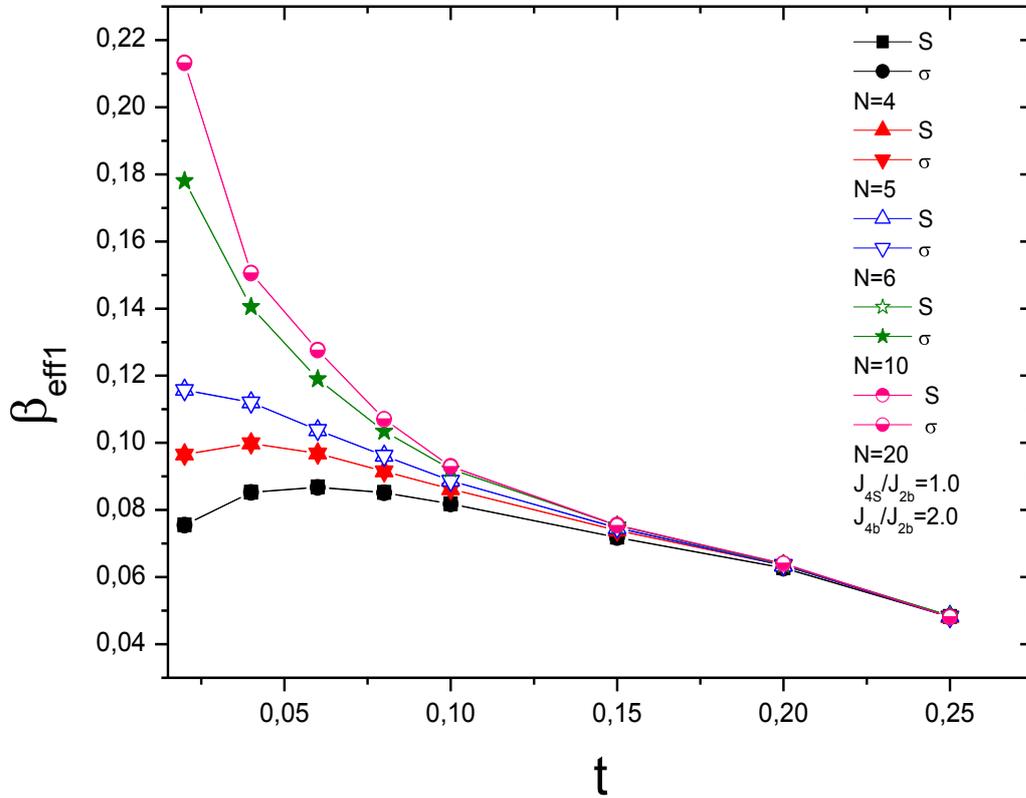


Figure IV-15 : L'exposant effectif de surface β_{eff1} en fonction de la température réduite t pour plusieurs épaisseurs de film N pour les spins ((S), (σ)) dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1,0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2,0$), avec $R_s = R_{3sp} = 2,5$ et $T_c = 8,89999$. La taille du système est $L \times L = 200 \times 200$.

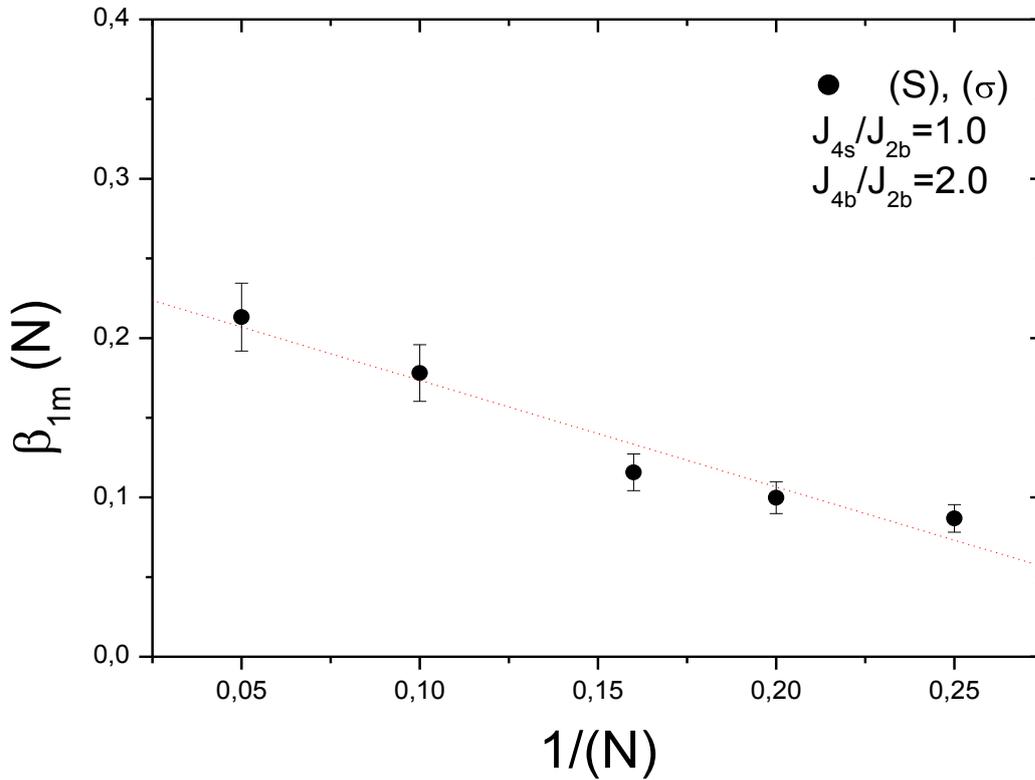


Figure IV-16 : L'exposant critique de l'aimantation de surface $\beta_{1m}(N)$ en fonction de $1/N$, dans le cas $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, la ligne pointillée correspond à l'ajustement linéaire associé aux valeurs maximales des simulations numériques de β_{eff1} .

Tableau IV-1 : Représente les valeurs des exposants critiques de surface aux points spéciaux et aux températures critiques, pour diverses valeurs de l'interaction d'échange à quatre composants.

L'interaction d'échange à quatre composants (surface et volume)	Le rapport de l'interaction d'échange au point spécial	Température critique	Exposant critique de surface au point spécial
$(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 0.0)$	$R_{sp} = 1.0$	$T_c = 4.5$	$\beta_{1(sp)} \approx 0.211 \mp 0.003$
$(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$	$R_{2sp} = 2.25$	$T_c = 9.4$	$\beta_{1(2sp)} \approx 0.30 \mp 0.03$
$(J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$	$R_{3sp} = 2.5$	$T_c = 8.89999$	$\beta_{1(3sp)} \approx 0.223 \mp 0.004$

IV-A-3 Conclusion

En bref, nous avons utilisé une méthode numérique non perturbatrice, à savoir la méthode de Monte Carlo basée sur l'algorithme Métropolis, pour étudier l'effet de l'interaction de couplage à quatre composantes J_4 (surface, volume) sur les diagrammes de phases, les propriétés thermodynamiques et les exposants effectifs, à partir d'un film mince ferromagnétique de type du modèle Ashkin Teller à spin-1/2. Nous avons montré qu'il existe un rapport d'interaction d'échange (surface / volume) au point spécial $R_s = (J_{2s}/J_{2b})_{sp}$ pour chaque diagramme de phase, dont la température critique T_c de tous les films est la même. Nous avons constaté que ce rapport dépend du couplage à quatre composantes J_4 . Ensuite, nous avons trouvé de nouvelles phases à haute température telles que les phases ($\langle \sigma S \rangle \neq 0, \langle S \rangle = 0$ et $\langle \sigma \rangle = 0$) et ($\langle S \rangle \neq 0, \langle \sigma \rangle \neq 0$ et $\langle \sigma S \rangle = 0$). Ensuite, l'effet des rapports des interactions des couplages bilinéaires (surface / volume) au point spécial est également étudié. En outre, le système présente un comportement de transition de phase de premier et de second ordre à partir de la variation de couplage d'échange $(J_{4s}/J_{2b}), (J_{4b}/J_{2b})$. Ensuite, les exposants critiques de l'aimantation de surface β_{1m} sont calculés à partir de l'exposant effectif de surface β_{eff1} , en ajustant linéairement les valeurs correspondant à $\beta_{1m}(N)$, on obtient la valeur $\beta_{1(sp)} \approx 0.211 \mp 0.003$ qui est en accord avec la valeur estimée par le modèle d'Ising en film mince de *Moussa et Bekhechi* [22] et être plus proche de résultat de *Ruge et Wagner* [26] que de celui de *Binder et Landau* [25], pour le premier cas ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0; J_{4b}/J_{2b} = 0.0$).

Dans le cas de modèle Ising ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), $\beta_{1(2sp)} \approx 0.30 \mp 0.03$, cette valeur est proche de celle trouvée par *Ferrenberg et Landau* [27] et *Talapov et Blöte* [28]. $\beta_{1(3sp)} \approx 0.223 \mp 0.004$ dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), cette valeur est proche de l'estimation de l'exposant critique par *Ruge et al* [29] et [26], également proche de l'estimation de l'exposant critique de surface d'Ising par *Diehl et Dietrich* [30, 31] et également proche avec la valeur calculée de modèle Ising en film mince [22].

Enfin, nous avons montré comment un modèle non universel présente un point spécial comme le modèle Ising.

IV-B) Propriétés magnétiques et diagrammes de phases des films minces ferromagnétiques de modèle spin-1 Ashkin Teller en présence d'un champ cristallin.

IV-B-1 Modèle et méthode

Nous considérons un film mince ferromagnétique contenant jusqu'à N monocouches dans la géométrie cubique simple de taille $(L \times L \times N)$, décrite par le modèle d'Ashkin Teller [18], qui est défini comme deux modèles d'Ising superposés liés par un terme d'interaction à quatre spin (Figure IV-17), avec la présence d'un champ cristallin décrit par l'Hamiltonien suivant :

$$H = -\sum_{i,j} J_{2ij} (S_i^Z S_j^Z + \sigma_i^Z \sigma_j^Z) - \sum_{i,j} J_{4ij} (S_i^Z S_j^Z \sigma_i^Z \sigma_j^Z) - D \sum_i ((S_i^Z)^2 + (\sigma_i^Z)^2) \quad (\text{IV-8})$$

Où :

$$J_{2ij} = \begin{cases} J_{2s} & Z = 1, Z = N \\ J_{2b} & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{IV-9})$$

et

$$J_{4ij} = \begin{cases} J_{4s} & Z = 1, Z = N \\ J_{4b} & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{IV-10})$$

Où :

- La sommation est exécutée aux spins voisins les plus proches de la couche mince, les spins S_i^Z et σ_i^Z sont situés sur les sites i et j d'un réseau, qui prennent trois valeurs $\{S_i^Z = \mp 1, 0\}$ et $\{\sigma_i^Z = \mp 1, 0\}$.
- J_{2s} et J_{4s} sont les interactions d'échange bilinéaire et à quatre composantes de la surface, respectivement, ($Z = 1$ et $Z = N$).
- J_{2b} et J_{4b} sont les interactions d'échange bilinéaire et à quatre composantes de volume, respectivement.
- D : Désigne le champ de cristallin qui est implémenté sur toutes les spins du système.

Dans nos simulations, nous avons appliqué une méthode de simulation numérique qui est la méthode de Monte Carlo (MC), basée sur l'algorithme Métropolis [32, 33], pour calculer l'Hamiltonien indiqué par l'équation (IV-8), sur un film cubique $(L \times L \times N)$ de modèle Ashkin Teller à spin-1. Par conséquent, nous utilisons des conditions aux limites libres dans la

direction Z qui est d'une épaisseur finie N et des conditions aux limites périodiques dans les directions X et Y .

Nous avons examiné les films d'épaisseur $N = 3, 4$ et 6 de taille $L = 50$, pour plusieurs valeurs de champ cristallin D . Plusieurs simulations supplémentaires ont été effectuées pour $L = 60, 70, 80, 100$, et 150 , mais aucune différence apparente n'a été observée avec les résultats présentés ici. Dans notre recherche, nous avons effectué plus de 5×10^5 pas MC pour chaque configuration de spin et nous avons appliqué 10^5 pas MC par site pour équilibrer le système.

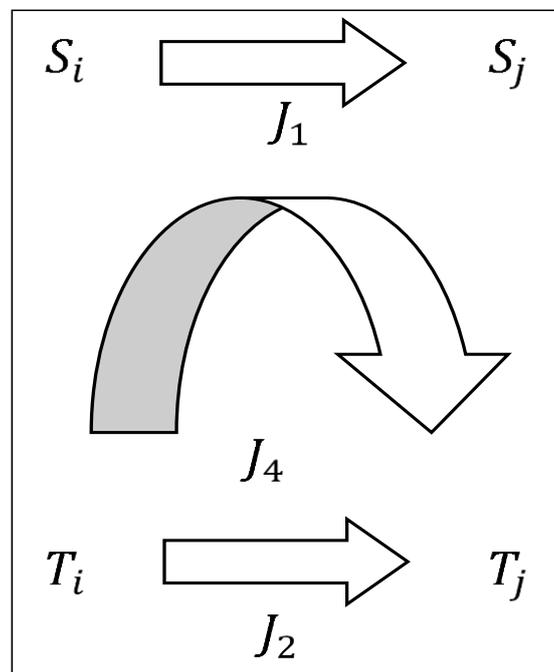


Figure IV-17 : Interactions Ashkin Teller sur une plaquette. Deux modèles d'Ising avec des interactions J_1 et J_2 liés par une interaction à quatre spin J_4 .

IV-B-2 Résultats et interprétation

Dans cette section, nous allons discuter de l'influence du champ cristallin D et l'effet de l'interaction à quatre spin avec le couplage d'échange J_4 , de la surface et de volume, sur les diagrammes de phases et les propriétés magnétiques des films ferromagnétiques minces de modèle Ashkin Teller à spin-1, dans un réseau cubique simple. En outre, nous étudierons également l'effet de l'épaisseur du film N , sur les comportements critiques du système.

En outre, nous notons que la valeur de l'interaction d'échange bilinéaire en volume J_{2b} est fixée à l'unité. Nous prenons également le rapport (surface / volume) normalisé de l'interaction d'échange $R_s = J_{2s}/J_{2b}$, ainsi que le couplage d'échange J_4 dans deux cas (surface et volume) définis respectivement comme suit ($J_{4s} = J_{4s}/J_{2b}$ et $J_{4b} = J_{4b}/J_{2b}$), le champ cristallin D/J_{2b} et la température est $k_B T/J_{2b}$ tout au long du calcul. Par conséquent, les couplages d'échanges sont limités au cas ferromagnétique.

Dans les Figures IV-18(a-d) et IV-19(a-d), nous avons étudié l'effet du champ cristallin D/J_{2b} , sur les diagrammes de phases dans le plan ($k_B T_c/J_{2b}$, $R_s = (J_{2s}/J_{2b})$), pour différentes épaisseurs de film N , pour diverses valeurs du couplage d'échange à quatre composants ($J_{4s} = J_{4s}/J_{2b}$; $J_{4b} = J_{4b}/J_{2b}$). Dans lequel les températures sont déterminées à partir du maximum des susceptibilités liées aux aimantations.

Par conséquent, la Figure IV-18(a-d) présente les diagrammes de phases dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 1.0$), où il y a des effets de surface et de volume, pour plusieurs valeurs de champ cristallin ($D/J_{2b} = -3.0, -2.0, 2.0$ et 3.0) et pour différentes épaisseurs de couche ($N = 3, 4$ et 6). Ensuite, en raison de la présence des surfaces modifiées (J_{2s}/J_{2b}), les diagrammes de phases montrent un comportement intéressant, en particulier la présence d'un point spécial $R_s = R_{sp}$, où tous les films ont une température critique $k_B T_c/J_{2b}$, qui est unique pour une épaisseur arbitraire N et pour chaque valeur de D/J_{2b} . Alors que pour la Figure IV-18a, la valeur de point spécial est $R_s = R_{sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.5$ à $D/J_{2b} = 2.0$. Cette valeur est liée aux trois états de spin (S, σ et σS), dans lesquels la surface et le volume sont devenus simultanément critiques, correspondant à la température critique du film $k_B T_c/J_{2b} = 4.8$, et elle est similaire à la température critique de volume $k_B T_c^b/J_{2b}$. Ainsi, la valeur du point spécial R_{sp} obtenu est la même que celle trouvée dans nos travaux précédents ($R_c = 1.5$ avec $T_c = 6.3$) [34], mais la température critique est plus élevée que celle calculée dans cette étude. En outre, la valeur R_{sp} est comparable à $R_c = 1.45$ dans Réf [35].

Dans le cas de la Figure IV-18b, la valeur de point spécial est $R_{sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.5$, est la même valeur que dans la Figure IV-18a, dans laquelle la température critique en volume est égale à $\{k_B T_c^b/J_{2b} = 3.6$ à $D/J_{2b} = -2.0\}$. Cette température est inférieure à celle calculée dans le cas de $D/J_{2b} = 2.0$. Autrement, dans la Figure IV-18c, le point spécial a la même valeur de $R_{sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.5$, mais sa température est plus élevée que celle trouvée précédemment, tels que : $\{k_B T_c^b/J_{2b} = 5.0$ à $D/J_{2b} = 3.0\}$.

Dans la Figure IV-18d, nous avons une valeur différente pour le point spécial que celle trouvée pour ($D/J_{2b} = -2.0, 2.0$ et 3.0) et a été déterminée comme $R_{sp1}(J_{2s}/J_{2b}) =$

1.37411, correspondant à la température critique du film $\{k_B T_c^b / J_{2b} = 2.9 \text{ à } D / J_{2b} = -3.0\}$; qui est inférieure aux températures trouvées dans les Figures IV-18a, b et c.

Alors que cette valeur de point spécial R_{sp1} est en accord avec la valeur calculée par la théorie du champ effectif (EFT), des films minces de spin-1 Blume-Capel en présence de champs cristallins aléatoires éteints avec $\{R_c = 1.378 \text{ à } \Delta = 10.0 \text{ et } p = 0.1\}$ [36].

La valeur de R_{sp1} est proche de la valeur $\{R_c = 1.39 \text{ à } p = 0.5 \text{ et } D = -1.0\}$ et de la valeur $\{R_c = 1.35 \text{ à } p = 0.9 \text{ et } D = -1.0\}$ par la simulation Monte Carlo [37], et au-dessus de la valeur obtenue par l'EFT, d'un film ferromagnétique Ising dilué avec $S=1$ dans un champ transversal, avec $R_c = 1.331$ [38] et la valeur $R_c = 1.265$ trouvée par *Moutie et al.* [39].

Cette valeur de R_{sp1} est supérieure à la valeur trouvée, avec $R_c = 1.3068$, par la théorie du champ effectif des transitions de couches dans les films minces ferromagnétiques de modèle de Blume-Capel dans Réf [4] et $R_c = 1.3069$ dans Réf [40].

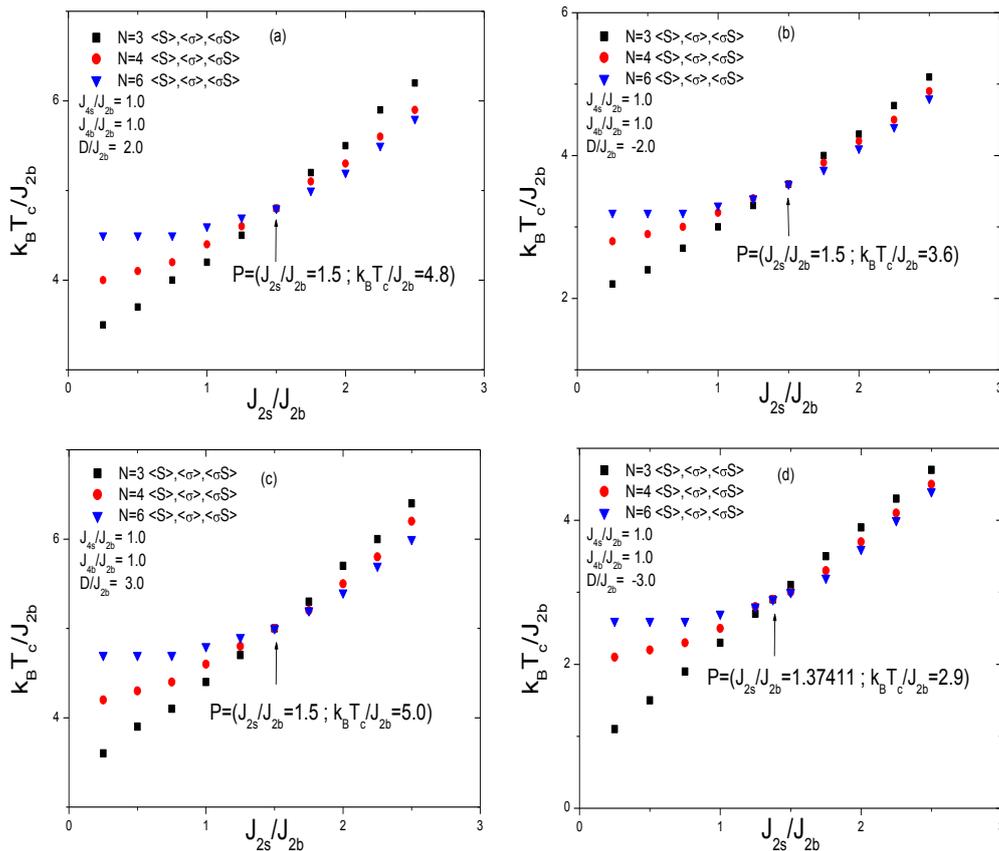


Figure IV-18 : Diagrammes de phases de la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ en fonction du rapport de l'interaction de couplage bilinéaire ($R_s = J_{2s} / J_{2b}$), pour différentes épaisseurs du film ($N = 3, 4$ et 6), pour (a) $D / J_{2b} = 2.0$, (b) $D / J_{2b} = -2.0$, (c) $D / J_{2b} = 3.0$ et (d) $D / J_{2b} = -3.0$, dans le cas ($J_{4s} / J_{2b} = 1.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 1.0$). Déterminer par la simulation de Monte Carlo pour un système de taille $L = 50$.

D'autre part, nous avons également examiné dans la Figure IV-19(a-d), les diagrammes de phases dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$, pour plusieurs valeurs de $(D/J_{2b} = -3.0, -2.0, 2.0 \text{ et } 3.0)$.

En outre, sous l'effet du champ cristallin, nous avons remarqué que pour des valeurs positives de $(D/J_{2b} = 2.0, 3.0)$, nous avons obtenu une nouvelle phase partiellement ordonnée (une des caractéristiques les plus importantes du modèle Ashkin Teller) appelée phase $\langle \sigma S \rangle$: $(\langle \sigma S \rangle \neq 0, \langle S \rangle = 0, \langle \sigma \rangle = 0)$ comme le montrent les Figures IV-19a et c.

Par conséquent, on peut voir sur la Figure IV-19(a-d) que toutes les courbes se croisent au même point appelé point spécial ou point multicritique $R_s = R_{sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.5$, qui résulte de la simultanéité de la criticalité de surface bidimensionnelle et de la criticalité de volume tridimensionnelle, correspondant aux températures critiques du système $(k_B T_c/J_{2b} = k_B T_c^b/J_{2b} = 6.1, 4.8, 6.3 \text{ et } 4.4 \text{ pour } D/J_{2b} = 2.0, -2.0, 3.0 \text{ et } -3.0, \text{ respectivement})$. Nous avons également remarqué que la valeur R_{sp} calculée, est le même point spécial des valeurs positives et négatives du champ cristallin, c'est-à-dire que ce point est indépendant de l'effet de D/J_{2b} dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0)$.

La valeur critique R_{sp} calculée dans ce cas est nettement inférieure à celle déterminée dans notre travail très récents avec la valeur $R_{2sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 2.25$ [34], également inférieure à celle trouvée dans Réf [41], pour le modèle d'Ising spin-1/2 avec la valeur $R_c = 1.52$ par la simulation de Monte Carlo, au-dessus de la valeur découverte pour le film spin-1 Blume-Capel Ising par la méthode de MC, avec la valeur de $R_c = 1.45$ [2]. Conformément à la valeur $R_c = 1.50$ des films minces d'Ising par la simulation de MC [22], et même avec les travaux [29, 42] avec le couplage de surface critique $J_{1c}/J = 1.5004(20)$.

Comme nous l'avons déjà mentionné, R_{sp} est un paramètre critique spécifique au magnétisme en film mince. En d'autres termes, pour $R_{sp} < R_s$ où la magnétisation de volume est prédominante par rapport à la magnétisation de surface, la température critique du film $k_B T_c/J_{2b}$ est inférieure à la température critique de volume $k_B T_c^b/J_{2b}$, tandis que la température critique augmente pour les films plus épais. Pour $R_{sp} > R_s$ où la magnétisation de surface devient plus importante que la magnétisation de volume, la température critique du film $k_B T_c/J_{2b}$ est supérieure à $k_B T_c^b/J_{2b}$ et les films plus épais ont une température critique plus faible.

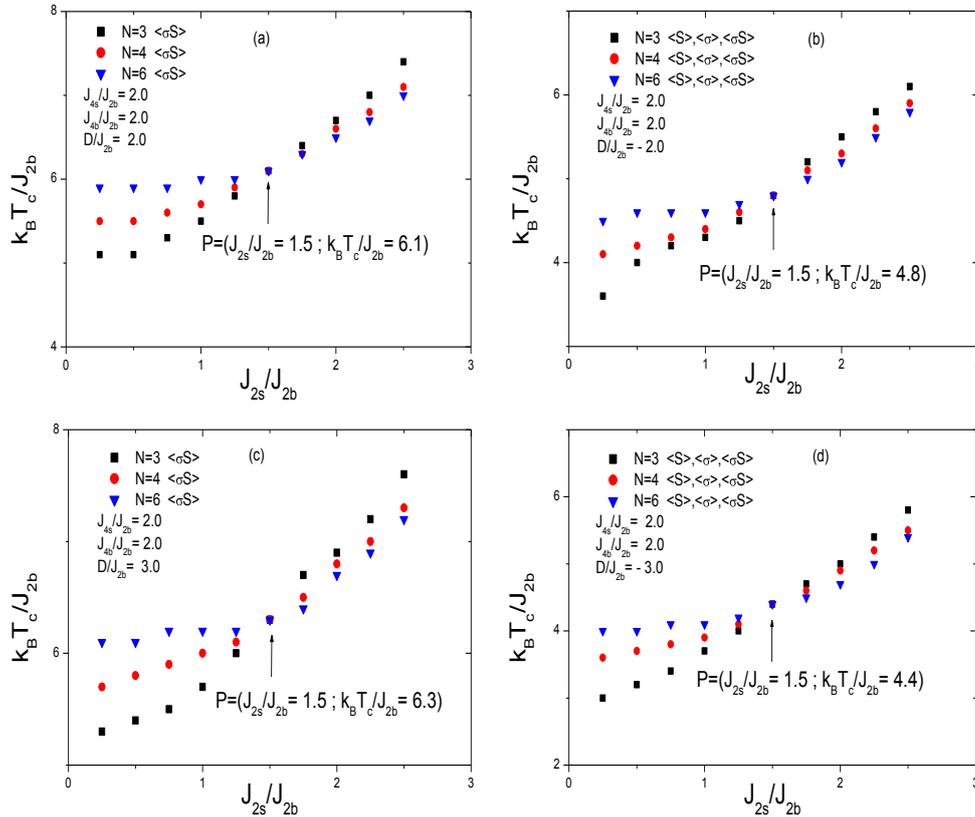


Figure IV-19 : Diagrammes de phases de la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ en fonction du rapport de l'interaction de couplage bilinéaire ($R_s = J_{2s} / J_{2b}$) pour différentes épaisseurs du film ($N = 3, 4$ et 6), pour (a) $D/J_{2b} = 2.0$, (b) $D/J_{2b} = -2.0$, (c) $D/J_{2b} = 3.0$ et (d) $D/J_{2b} = -3.0$, dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 2.0$). La taille du système $L = 50$.

Les propriétés magnétiques de film mince d'Ashkin Teller à spin-1 ne peuvent être étudiées qu'en résolvant les équations (IV-4), (IV-5), (IV-6) et (IV-7). Par conséquent, dans les Figures IV-20(a-f), IV-21(a-f), IV-22(a-b) et IV-23(a-f), les effets de $(J_{4s}/J_{2b}; J_{4b}/J_{2b})$ et D/J_{2b} sont présents. En outre, dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0; J_{4b}/J_{2b} = 1.0)$, l'influence thermique des courbes de susceptibilité typiques (χ_1) et les profils d'aimantation par couche (m_1) du système, à $R_s = R_{sp} = 1.5$ et $(D/J_{2b} = -2.0, 2.0)$ ont été illustrés dans la Figure IV-20 (a-f). De plus, la nature de la transition de phase est établie à partir de la discontinuité et de la continuité des paramètres d'ordre. De plus, les courbes des aimantations de surface (m_1) montrent un comportement typique de la transition de phase du premier ordre. Nous avons observé que tous les pics de susceptibilité (χ_1) ont les mêmes températures critiques telles que: ($\{T_c = 4.8$ à $D/J_{2b} = 2.0\}$ et $\{T_c = 3.6$ à $D/J_{2b} = -2.0\}$) dans les trois spins ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$) et pour chaque épaisseur de film N . Indiquant que ces températures critiques sont indépendantes de N .

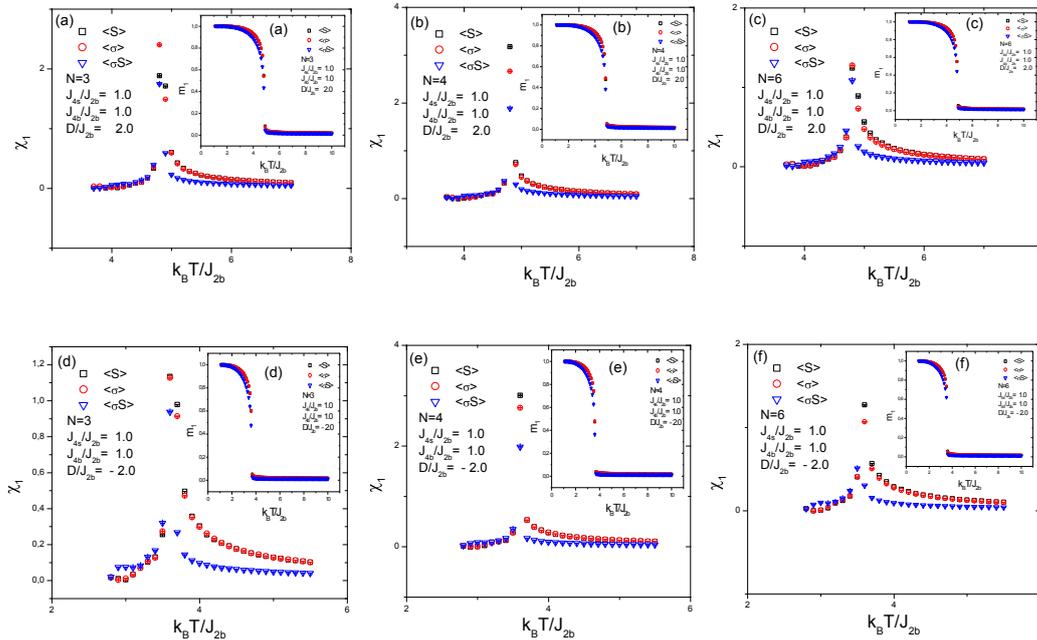


Figure IV-20 : La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche avec des barres d'erreur dans le cas de $(J_{4s}/J_{2b} = 1.0; J_{4b}/J_{2b} = 1.0)$, pour diverses valeurs du champ cristallin telles que: ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$) pour $D/J_{2b} = 2.0$, et pour $(D/J_{2b} = -2.0)$ ((d) $N = 3$, (e) $N = 4$ et (f) $N = 6$), pour les spins ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et avec le taille du système $L = 50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

Concernant la Figure IV-21(a-f), nous avons également constaté que les susceptibilités par couche (χ_1) divergent aux mêmes températures critiques du système telles que : $\{T_c = 5.0 \text{ à } D/J_{2b} = 3.0 \text{ et } R_{sp} = 1.5\}$ et $\{T_c = 2.9 \text{ à } D/J_{2b} = -3.0 \text{ et } R_{sp1} = 1.37411\}$, pour ($N = 3, 4$ et 6) et pour ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$). Toutefois, les aimantations par couche (m_1) présentent également la transition de phase de premier ordre. Ensuite, ces courbes des aimantations sont similaires pour trois spins et pour chaque N .

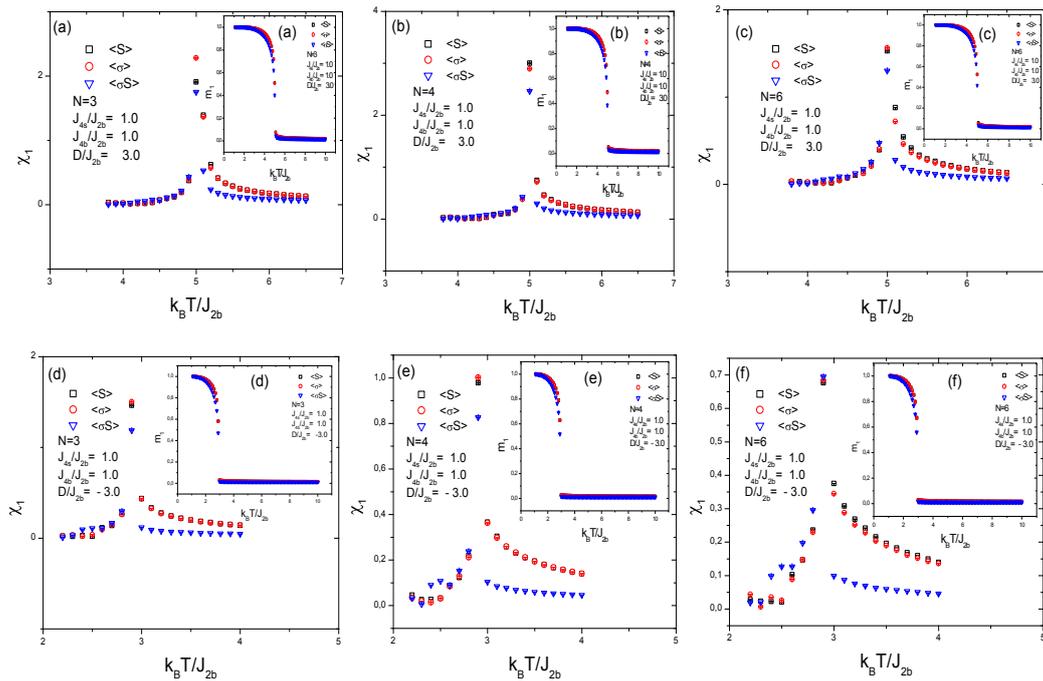


Figure IV-21: La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche avec des barres d'erreur dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0$), pour diverses valeurs du champ cristallin telles que: ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$) pour $D/J_{2b} = 3.0$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et ((d) $N = 3$, (e) $N = 4$ et (f) $N = 6$) pour ($D/J_{2b} = -3.0$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp1} = 1.37411$), pour les spins ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$), avec le taille du système $L = 50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

Dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), nous avons également tracé les susceptibilités de surface (χ_1) et les aimantations de surface (m_1) en fonction de la température $k_B T_c / J_{2b}$ pour la phase ($\langle \sigma S \rangle$) et avec le rapport au point spécial $R_{sp} = 1.5$ (voir Figure IV-22). Nous avons observé que tous les pics de ces courbes de susceptibilités sont identiques pour toute épaisseur de film N , c'est-à-dire qu'ils ont la même température critique, tandis que pour les Figures IV-22a et b : ($\{T_c = 6.1$ à $D/J_{2b} = 2.0\}$ et $\{T_c = 6.3$ à $D/J_{2b} = 3.0\}$, respectivement).

Pour la Figure IV-23 (a-c) et (d-f), les températures critiques sont ($\{T_c = 4.8$ à $D/J_{2b} = -2.0\}$ et $\{T_c = 4.4$ à $D/J_{2b} = -3.0\}$, respectivement), dans les trois phases ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$). Par conséquent, la discontinuité des courbes des aimantations de surface (m_1) comme montré dans la Figure IV-22 (a-f) et la Figure IV-23 (a-f), présente une transition de phase de premier ordre.

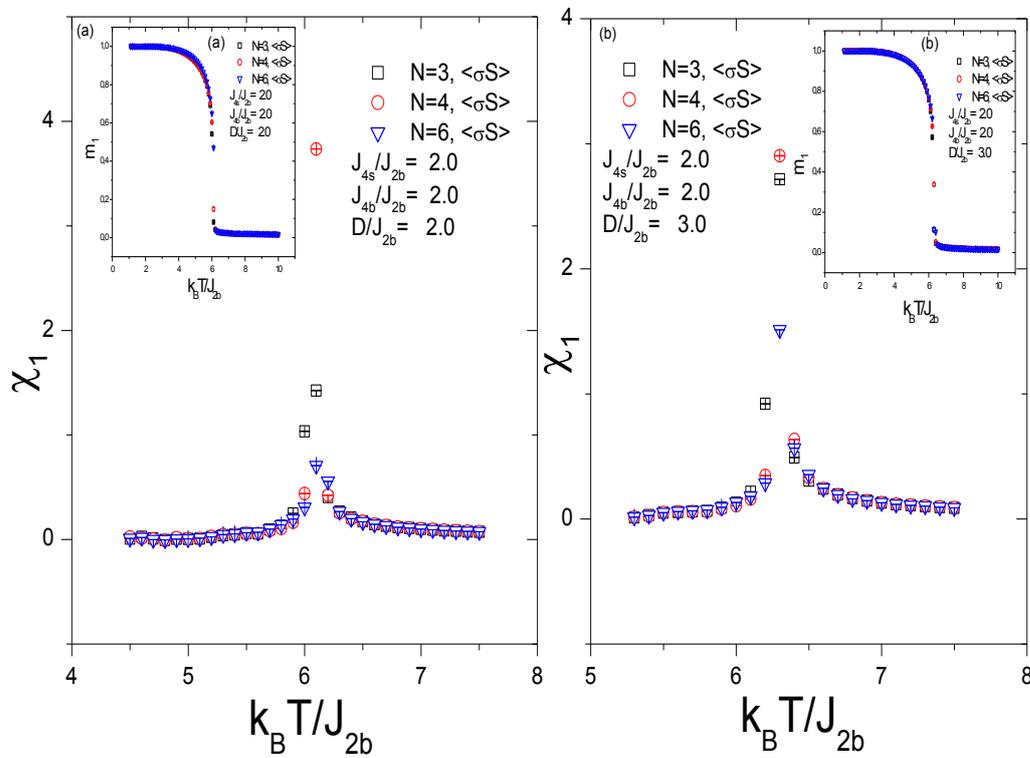


Figure IV-22 : La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche, dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour diverses épaisseurs du film ($N = 3, 4$ et 6) et pour différentes valeurs du champ cristallin telles que : (a) pour ($D/J_{2b} = 2.0$) et (b) pour ($D/J_{2b} = 3.0$), pour la phase $\langle \sigma S \rangle$, avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

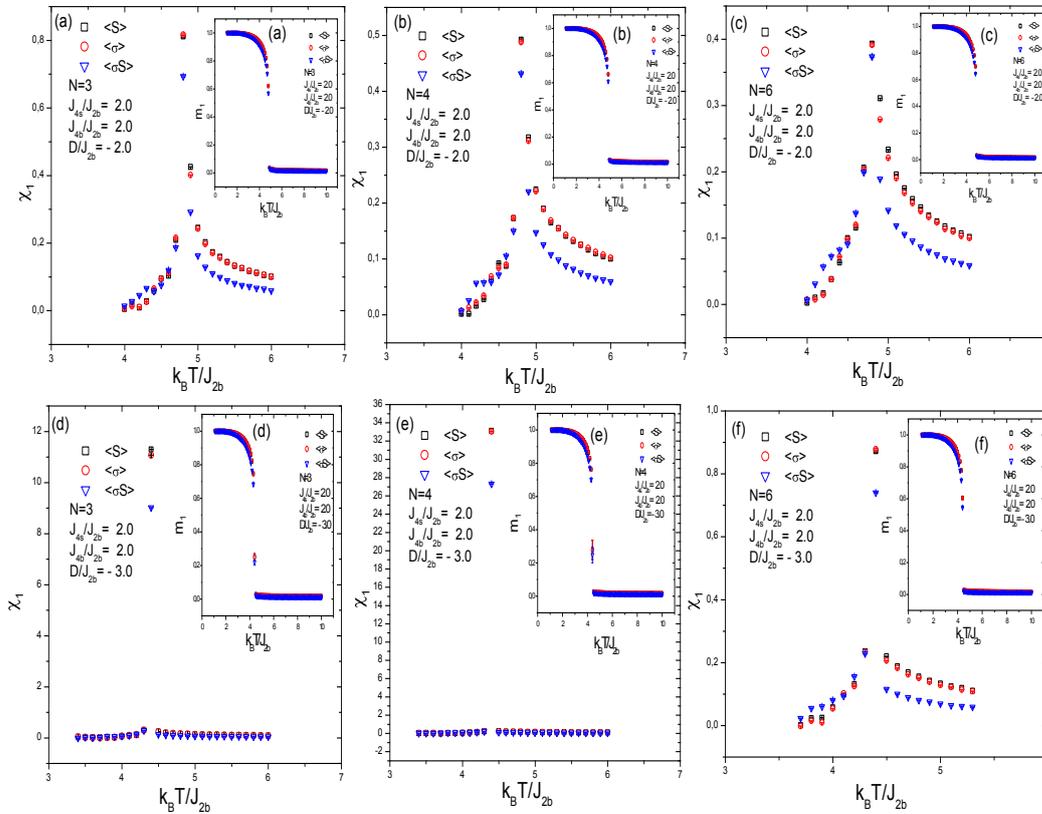


Figure IV-23: La dépendance thermique des susceptibilités et des aimantations par couche, dans le cas ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour différentes valeurs du champ cristallin telles que : ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$) pour ($D/J_{2b} = -2.0$) et ((d) $N = 3$, (e) $N = 4$ et (f) $N = 6$) pour $D/J_{2b} = -3.0$), pour les trois spins ($\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$), avec le rapport au point spécial ($R_s = R_{sp} = 1.5$) et avec la taille du système $L=50$. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles.

Les Figures IV-24 et 25, montrent les diagrammes de phases dans le plan ($k_B T_c / J_{2b}$, D / J_{2b}), dans le cas de ($J_{4s} / J_{2b} = 1.0$; $J_{4b} / J_{2b} = 1.0$), N allant de (3, 4 et 6), pour les trois spins et pour (J_{2s} / J_{2b} en dessous et au-dessus de R_{sp}) [18]. Par conséquent, la Figure IV-24 présente le cas de $J_{2s} / J_{2b} = 0.5 < R_{sp}$. On voit que les phases (Baxter) et paramagnétique (P) sont séparées par la transition de phase de premier ordre, on a remarqué que lorsque l'épaisseur de film N augmente, la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ augmente et $k_B T_c / J_{2b}$ augmente avec l'augmentation de D / J_{2b} , d'une valeur minimale de $D / J_{2b} = -4.5$ aux valeurs de saturation à des valeurs plus élevées de D / J_{2b} telles que : ($\{N = 3, T_c^{sat} / J_{2b} = 4.5\}$; $\{N = 4,$

$T_c^{sat}/J_{2b} = 5.0$) et $\{N = 6, T_c^{sat}/J_{2b} = 5.5\}$), ces valeurs de saturation dépendent de l'épaisseur du film N .

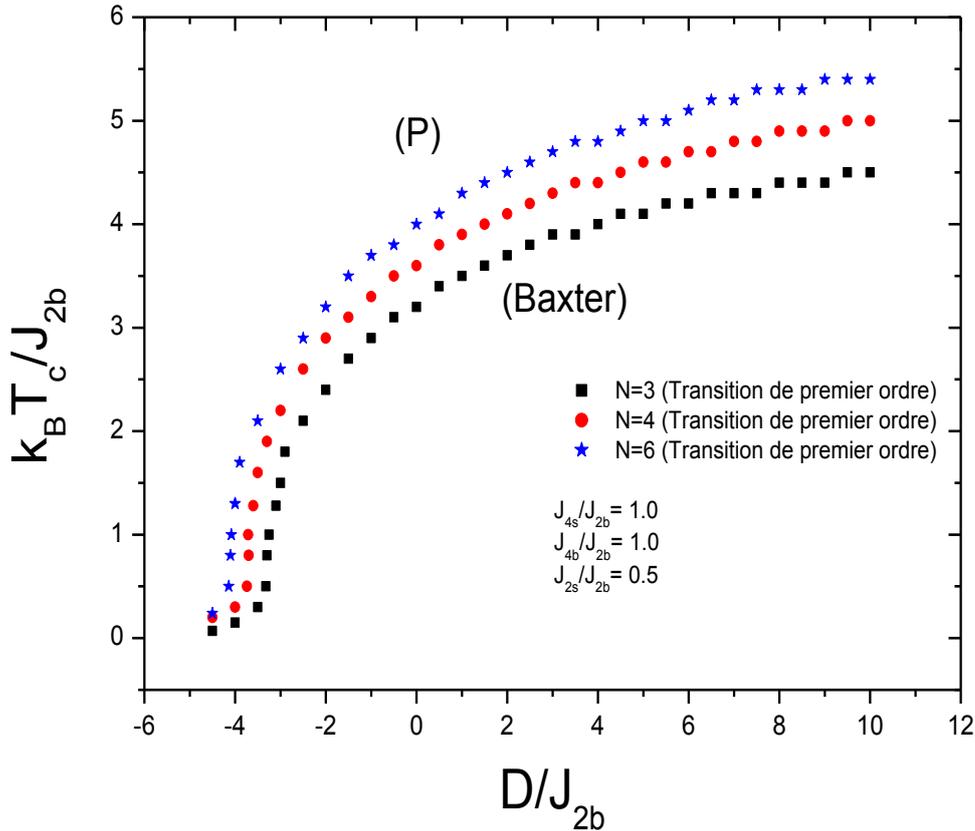


Figure IV-24 : La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D / J_{2b} pour $J_{2s} / J_{2b} = 0.5 < R_{sp}$ et pour différentes valeurs de l'épaisseur du film N , dans le cas de ($J_{4s} / J_{2b} = 1.0$; $J_{4b} / J_{2b} = 1.0$) et pour les spins (S), (σ) et (σS).

Dans la Figure IV-25 (cas de $J_{2s} / J_{2b} = 2.5 > R_{sp}$ [2]), nous avons observé que les phases désordonnées (paramagnétiques) et ordonnées (Baxter) sont séparées par une transition de phase de premier ordre pour les valeurs fortement négatives de D / J_{2b} . Ensuite, à partir de $D / J_{2b} = -4$ à 10, la transition est de second ordre. Ces deux lignes de transitions de phases se rencontrent en un point tricritique, dont les coordonnées dépendent de l'épaisseur de film, alors que pour ($\{N = 3, k_B T_c / J_{2b} = 4.1\}$; $\{N = 4, k_B T_c / J_{2b} = 3.9\}$ et $\{N = 6, k_B T_c / J_{2b} = 3.8\}$, sont à $D / J_{2b} = -4.0$). Ce résultat est plus élevé que celui obtenu dans la Réf [2]. Par

conséquent, on peut également montrer que la température critique augmente de zéro à une valeur fortement négative de $D/J_{2b} = -7.5$ pour atteindre des valeurs de saturation à des valeurs positives élevées de $D/J_{2b} = 10$. Ces valeurs de saturation diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur du film (par exemple : $\{N = 3, T_c^{sat}/J_{2b} = 7.3\}$; $\{N = 4, T_c^{sat}/J_{2b} = 7.0\}$ et $\{N = 6, T_c^{sat}/J_{2b} = 6.9\}$, à $D/J_{2b} = 10$).

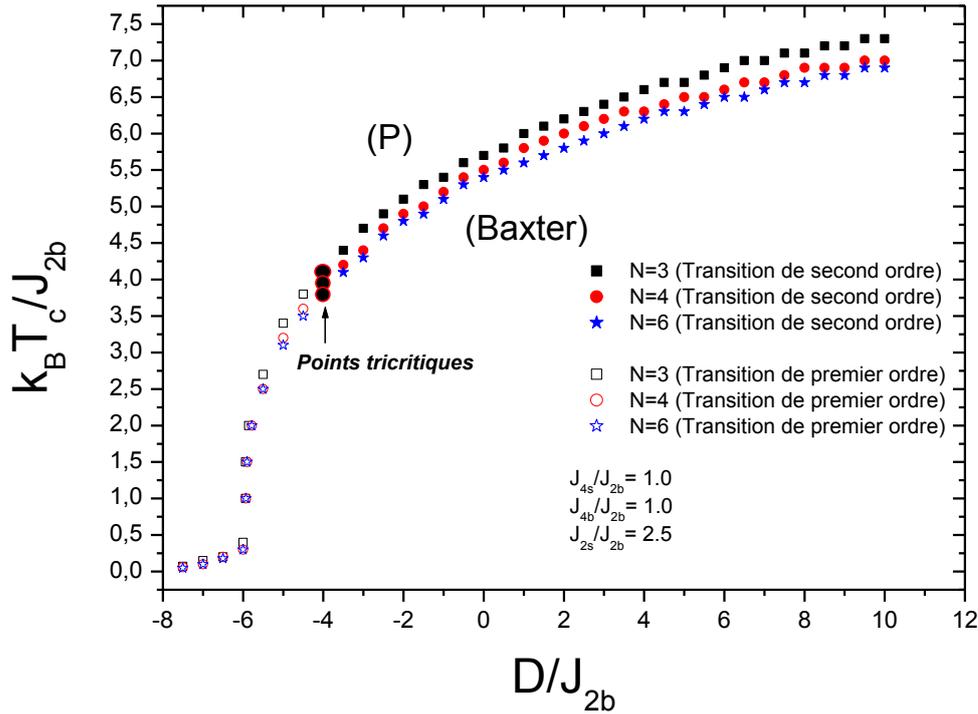


Figure IV-25: La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D/J_{2b} pour $J_{2s}/J_{2b} = 2.5 > R_{sp}$ et pour différentes valeurs de l'épaisseur du film N , dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 1.0$) et pour les spins (S), (σ) et (σS).

En revanche, le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$), pour $J_{2s}/J_{2b} = 0.5 < R_{sp}$, nous avons obtenu une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle \sigma S \rangle$ à haute température ($\langle S \rangle = 0$, $\langle \sigma \rangle = 0$ et $\langle \sigma S \rangle \neq 0$), pour les valeurs positives de D/J_{2b} et pour chaque N de film, cela est clairement démontré dans la Figure IV-26(a-c). De plus, cette phase obtenue se situe entre la phase paramagnétique, où ($\langle S \rangle = \langle \sigma \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$) et la phase de Baxter, où ($\langle S \rangle$ et $\langle \sigma \rangle$ sont ordonnés ferromagnétiquement et $\langle \sigma S \rangle \neq 0$), séparées par une transition de phase de second ordre. La phase trouvée $\langle \sigma S \rangle$ est similaire à la phase calculée dans le modèle Ashkin Teller de spin-1 en $d=2$, qui a été étudiée par des calculs

d'échelle finie de matrice de transfert (TMFSS) et des simulations de Monte Carlo [43]. Ensuite, la transition de phase de premier ordre est entre la phase désordonnée (P) et la phase ordonnée (Baxter) pour les valeurs négatives de D/J_{2b} .

Le point tricritique qui a été déterminé par une transition de phase discontinue changée en une transition continue, les coordonnées de ce point sont : ($\{N = 3, k_B T_c/J_{2b} = 4.4$ (Figure IV – 26a)); ($\{N = 4, k_B T_c/J_{2b} = 4.6$ (Figure IV – 26b)) et ($\{N = 6, k_B T_c/J_{2b} = 4.9$ (Figure IV – 26c)), à $D/J_{2b} = 0.0$). Ces valeurs de points tricritiques sont supérieures à celles calculées dans le premier cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 1.0 ; J_{4b}/J_{2b} = 1.0$) et pour $J_{2s}/J_{2b} = 2.5 > R_{sp}$. Nous avons également découvert que la température critique augmente avec l'augmentation de D/J_{2b} .

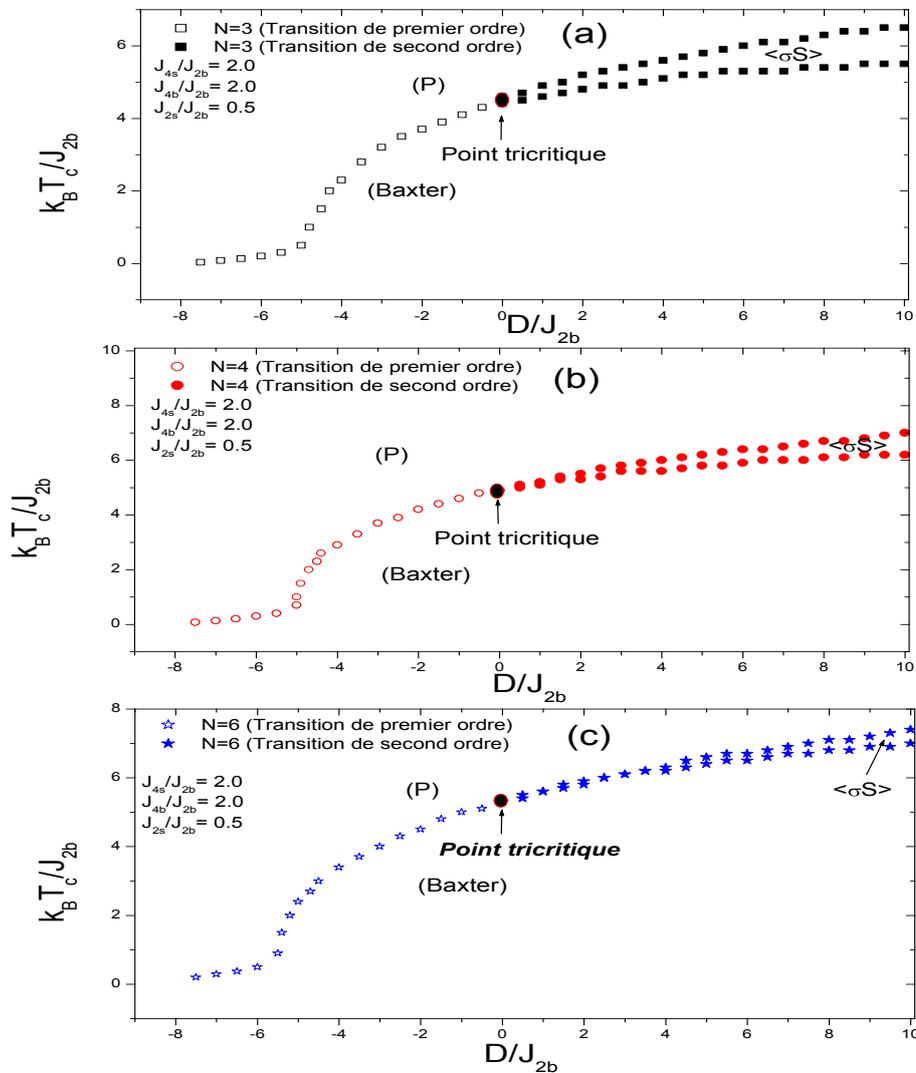


Figure IV-26 : La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D / J_{2b} , pour $J_{2s} / J_{2b} = 0.5 < R_{sp}$, pour ((a) $N = 3$, (b) $N = 4$ et (c) $N = 6$), dans le cas de ($J_{4s} / J_{2b} = 2.0 ; J_{4b} / J_{2b} = 2.0$).

Enfin, dans la Figure IV-27 (cas de $J_{2s}/J_{2b} = 2.5 > R_{sp}$), la ligne de transition entre la phase ordonnée (Baxter) et la phase désordonnée (P), se présente sous la même forme que dans ce dernier cas de $J_{2s}/J_{2b} = 0.5 < R_{sp}$, qui est décrit dans la Figure IV-24. Ainsi, nous avons vu que la température critique $k_B T_c / J_{2b}$ diminue avec l'augmentation de N et augmente avec l'augmentation de D/J_{2b} , pour atteindre des valeurs de saturation à des valeurs élevées de champ cristallin, qui dépendent de l'épaisseur de film N , (par exemple, $\{N = 3, T_c^{sat} / J_{2b} = 8.7\}$; $\{N = 4, T_c^{sat} / J_{2b} = 8.4\}$ et $\{N = 6, T_c^{sat} / J_{2b} = 8.3\}$).

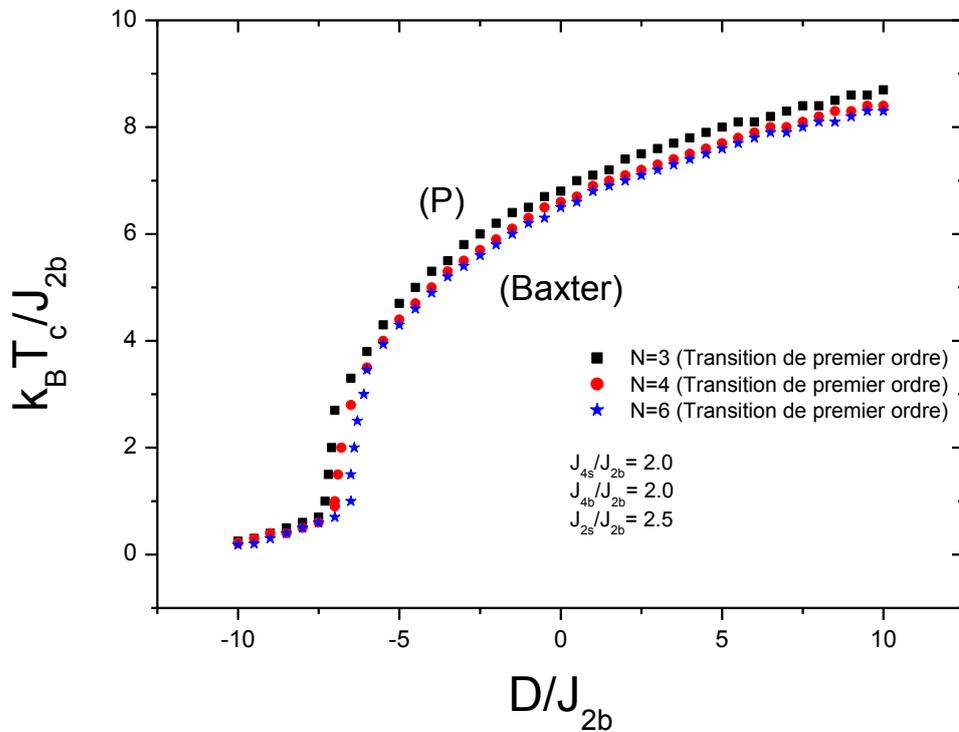


Figure IV-27 : La température critique ($k_B T_c / J_{2b}$) en fonction du champ cristallin D/J_{2b} pour $J_{2s}/J_{2b} = 2.5 > R_{sp}$ et pour différentes valeurs de l'épaisseur du film N , dans le cas de ($J_{4s}/J_{2b} = 2.0$; $J_{4b}/J_{2b} = 2.0$).

IV-B-3 Conclusion

En bref, en utilisant la simulation Monte Carlo, nous avons étudié en détail les diagrammes de phases et les propriétés thermodynamiques du modèle Ashkin Teller à spin-1, appliqué aux films minces ferromagnétiques, sous les effets du champ cristallin D/J_{2b} et du couplage d'échange à quatre composants $(J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b})$. Par conséquent, en raison de la présence de l'interaction d'échange bilinéaire de surface modifiée (J_{2s}/J_{2b}) , les diagrammes de phases $(k_B T_c/J_{2b}, J_{2s}/J_{2b})$, montrent un comportement intéressant, expliqué par la présence du point spécial R_{sp} pour différentes valeurs de D/J_{2b} et $(J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b})$, qui est indépendant de l'épaisseur du film N . Ensuite, pour les grandes valeurs de $(J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b})$, le point spécial R_{sp} est indépendant de D/J_{2b} . Par conséquent, nous avons obtenu la valeur $R_{sp}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.5$, qui est la même que celle trouvée par *Benmansour et al* [34], proche à des résultats obtenus par *Tucker* [35] et par *Zaim et al* [2]. Cette valeur est proche de celle établie par *Landau et Binder* [41]. Ensuite, elle est en accord avec les valeurs calculées par *Moussa et Bekhechi* [22], *El Amraoui et Khmou* [42] et *Ruge et al* [29]. Ainsi, nous avons également trouvé la valeur $R_{sp1}(J_{2s}/J_{2b}) = 1.37411$, qui est en accord avec la valeur calculée par *Yüksel* [36], proche de la valeur de *Boughrara et al* [37]. Ensuite, cette valeur découverte R_{sp1} est supérieure à la valeur obtenue par *Jia et Wang* [38], supérieure aux valeurs trouvées par *Yüsel et Ümit* [4], *Sarmiento et Tucker* [40] et par *Moutie et al* [39].

Les profils de l'aimantation présentent un comportement de transition de phase de premier ordre. En outre, les diagrammes de phases dans le plan $(k_B T_c/J_{2b}, D/J_{2b})$, montrent une grande variété de transitions de phases de premier et de deuxième ordre, qui se rencontrent en points tricritiques, qui dépendent de N . Il a été établi que les températures critiques n'augmentent avec l'épaisseur du film N que lorsque $(J_{2s}/J_{2b} = 0.5 < R_{sp})$. Enfin, nous avons obtenu une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle \sigma S \rangle$ à haute température pour les valeurs positives de D/J_{2b} , pour une grande valeur de $(J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b})$ et pour chaque N , qui est situé entre les phases paramagnétiques et de Baxter séparées par une transition de phase de second ordre.

Bibliographies

- [1] Y. Yüksel, Monte Carlo simulations of dynamic phase transitions in ultrathin Blume–Capel films. *Phys. Lett. A.* 377 (2013) 2494-2504.
- [2] A. Zaim, Y. EL Amraoui, M. Kerouad, H. Arhchoui, Monte Carlo study of the spin-1 Blume–Capel Ising film. *J. Magn. Magn. Mater.* 320 (2008) 1030–1034.
- [3] A. Moutie, M. Kerouad, The random transverse Ising thin film with decorated ferrimagnetic surfaces. *J. Magn. Magn. Mater.* 238 (2002) 233–245.
- [4] Y. Yüksel, Ü. Akinci, Universality aspects of layering transitions in ferromagnetic Blume–Capel thin films. *Physica B.* 433 (2014) 96-101.
- [5] M.-C. Chung, M. Kaulke, I. Peschel, M. Pleimling, W. Selke, Ising films with surface defects. *Eur. Phys. J. B,* 18 (2000) 655–661.
- [6] A. Masrour, A. Jabar, Surface behavior of magnetic phase transitions: A Monte Carlo study. *App. Surf. Sci.* 432 (2018) 78-84.
- [7] C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, G. Lauhoff, Magnetism in ultrathin film structures. *Reports on Progress in Physics.* 71 (2008) 056501.
- [8] B. Heinrich, J. A.C. Bland, (Ed.), *Ultrathin magnetic structures II: Measurement techniques and novel magnetic properties.* Springer Science & Business Media, (1994).
- [9] C. Rau, S. Eichner, Electron-spin polarization at single-crystalline Cr and Ni surfaces determined with electron-capture spectroscopy, *Phys. Rev. Lett,* 47 (1981) 939.
- [10] C. Rau, C. Jin, M. Robert, Ferromagnetic order at Tb surfaces above the bulk Curie temperature. *App. phys.* 63 (1988) 3667-3668.
- [11] D. Weller, S. F Alvarado, W. Gudat, K. Schröder, M. Campagna, Observation of surface-enhanced magnetic order and magnetic surface reconstruction on Gd (0001). *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 1555.
- [12] L. Bahmad, A. Benyoussef, H. Ez-Zahraouy, Surface coupling effect on wetting and layering transitions. *SuSc.* 536 (2003) 114-120.
- [13] Ü. Akinci, Effects of the randomly distributed magnetic field on the phase diagrams of the transverse Ising thin film. *J. Magn. Magn. Mater.* 329 (2013) 178–187.
- [14] Ü. Akinci, Random field distributed Heisenberg model on a thin film geometry. *J. Magn. Magn. Mater.* 368 (2014) 36-43.
- [15] I. Dani, N. Tahiri, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef, A Monte Carlo study of the spin-1 Blume–Emery–Griffiths phase diagrams within biquadratic exchange anisotropy. *Physica A.* 407 (2014) 295-302.
- [16] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model. *Physica A.* 513 (2019) 104-111.
- [17] I. Dani, N. Tahiri, H. EZ-Zahraouy, A. Benyoussef, Effect of anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions on phase diagrams of the Ashkin-Teller model. *Physica A.* 455 (2016) 92-97.
- [18] J. Ashkin, E. Teller, Statistics of two-dimensional lattices with four components. *Phys. Rev.* 64 (1943) 178.
- [19] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics,* Academic, London, (1982).
- [20] S. Bekhechi, A. Benyoussef, A. El kenz B. Ettaki, M. Loulidi, Phase transitions in the mixed Ashkin-Teller model. *Eur. Phys. J. B.* 18 (2000) 275-282.

- [21] A. Oubelkacem, A. Ainane, M. Saber, P. Häussler. The spin -1/2 Ising film with a perfect surface. *Phys Scr.* 73 (2006) 325-331.
- [22] N. Moussa, S. Bekhechi, Surface critical behavior of thin Ising films at the 'special point'. *Physica A.* 320 (2003) 435-442.
- [23] Bernd A. Berg, Markov chain Monte Carlo simulations and their statistical analysis: with web-based Fortran code. World Scientific Publishing Company. (2004).
- [24] Y. Yüksel, Ü. Akinci, E. Vatansever, Influence of modified surface effects on the magnetocaloric properties of ferromagnetic thin films, *Thin Solid Films.* 646 (2018) 67-74.
- [25] K. Binder, D.P. Landau, Crossover scaling and critical behavior at the "surface-bulk" multicritical point. *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984) 318.
- [26] C. Ruge, F. Wagner, Critical parameters for the $d = 3$ Ising model in a film geometry. *Phys. Rev. B.* 52 (1995) 4209.
- [27] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau, Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study. *Phys. Rev. B,* 44 (1991) 5081.
- [28] A. L. Talapov, H.W. J. Blöte, The magnetization of the 3D Ising model. *J. Phys. A* 29 (1996) 5727.
- [29] C. Ruge, S. Dunkelmann, F. Wagner, J. wulf, Study of the three-dimensional Ising model on film geometry with the cluster Monte Carlo method. *J. stat. phys.* 73 (1993) 293-317.
- [30] H. W. Diehl and S. Dietrich. Field-theoretical approach to multicritical behavior near free surfaces. *Phys. Rev. B* 24 (1981) 2878.
- [31] H. W. Diehl, in *Phase transitions and critical phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz. Academic, New York. (1986).
- [32] N. Métropolis. A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.* 21(1953)1087.
- [33] M. E. J. Newman, G.T. Barkema, *Monte Carlo methods in statical physics*, Clarendon Press Oxford. (1999).
- [34] A. Benmansour, S. Bekhechi, B. E. N. Brahmi, N. Moussa, H. Ez-Zahraouy, Monte Carlo study of thin magnetic Ashkin Teller films at the special point. *J. Magn. Magn. Mater.* 511 (2020).
- [35] J. W. Tucker, A Monte Carlo study of thin spin-1 Ising films with surface exchange enhancement. *J. Magn. Magn. Mater.* 210 (2000) 383.
- [36] Y. Yüksel, An effective field theory study of layering transitions in Blume–Capel thin films in the presence of quenched random crystal fields. *Physica A.* 396 (2014) 9-18.
- [37] M. Boughrara, M. Kerouad, A. Zaim, A Monte Carlo study of the Blume-Capel thin film in the presence of a random crystal field. *J. Magn. Magn. Mater.* 410 (2016) 218-222.
- [38] C. Jia, X-Z. Wang, Phase diagrams of a diluted Ising ferromagnetic film with spin-1 in a transverse field. *J. Phys. : Condens. Matter.* 8 (1996) 5745.
- [39] A. Moutie, M. Kerouad, B. Laaboudi, The spin-1/2 Ising film in a random transverse field. *Chin. J. Phys.* 38 (2000) 975.
- [40] E. F. Sarmiento, J. W. Tucker, Phase transitions of ferromagnetic Ising films in a transverse field. *J. Magn. Magn. Mater.* 118 (1993) 133.
- [41] D. P. Landau, K. Binder, Monte Carlo study of surface phase transitions in the three-dimensional Ising model. *Phys. Rev. B.* 41(1990) 4633.
- [42] Y. El Amraoui, A. Khmou, Phase diagrams and magnetic properties of Ising thin film Part II: exchange interaction anisotropy near the surface film. *J. Magn. Magn. Mater.* 218 (2000) 182-190.
- [43] M. Bادهdah, S. Bekhechi, A. Benyoussef, and B. Ettaki, Numerical study of the spin-1 Ashkin-Teller model. *Phys. Rev. B.* 59 (1998) 625.

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale et perspectives

De nos jours, les propriétés magnétiques des systèmes à dimensions finies tels que les films minces, présentent un grand intérêt et ont fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales. Du point de vue théorique, un grand intérêt a été accordé aux phénomènes critiques.

Le travail de cette thèse consacré principalement à l'étude d'un des domaines les plus actifs de la physique moderne, à savoir la recherche sur les films minces, par la méthode de Monte Carlo dans le cadre de spin Ising. Pour ce fait, nous avons présenté plusieurs modèles magnétiques de spin qui ont été appliquées aux films minces, tels que : le modèle Ising qui est certainement le modèle le plus célèbre de physique statistique et nous avons utilisé ce modèle comme modèle de base pour notre démarche, le modèle de Potts, le modèle Heisenberg, le modèle de Blume capel, le modèle Blume-Emery-Griffiths et nous nous intéressons à un modèle magnétique avec une interaction à quatre composants appelant le modèle Ashkin Teller.

Le travail présenté dans ce manuscrit est subdivisé en deux parties :

La partie A : Concerne l'étude théorique par la méthode de Monte Carlo, l'effet de l'interaction à quatre spin avec le couplage d'échange J_4 de la surface et de volume et également nous avons étudié l'effet de l'épaisseur du film N , sur les comportements critiques et les propriétés magnétiques du film mince à spin-1/2 sur un réseau cubique simple. Nous avons démontré qu'il existe un rapport d'interaction d'échange (surface / volume) au point spécial $R_s = (J_{2s}/J_{2b})_{sp}$ pour chaque diagramme de phase, dont la température critique T_c de

tous les films est la même. Nous avons remarqué que ce rapport dépend du couplage à quatre composantes J_4 . Ensuite, nous avons obtenu de nouvelles phases à haute température telles que les phases ($\langle \sigma S \rangle \neq 0, \langle S \rangle = 0$ et $\langle \sigma \rangle = 0$) et ($\langle S \rangle \neq 0, \langle \sigma \rangle \neq 0$ et $\langle \sigma S \rangle = 0$). En outre, le système présente un comportement de transitions de phases du premier et du second ordre à partir de la variation de couplage d'échange $(J_{4s}/J_{2b}), (J_{4b}/J_{2b})$. En outre, les exposants critiques de l'aimantation de surface β_{1m} sont calculés à partir de l'exposant de surface effectif β_{eff1} , en ajustant linéairement les valeurs correspondant à $\beta_{1m}(N)$. D'autre part, les résultats estimées par les exposants critiques de l'aimantation de surface β_{1m} sont en bon accord avec les autres travaux.

Dans la partie B, nous avons abordé le même système mais en introduisant un autre effet qui est le paramètre du champ cristallin D/J_{2b} , sur les diagrammes de phases et les propriétés magnétiques de ce système de modèle Ashkin Teller à spin-1. Par conséquent, grâce à la présence de l'interaction d'échange bilinéaire de surfaces modifiées (J_{2s}/J_{2b}) , les diagrammes de phases présentent un comportement intéressant, expliqué par la présence du point spécial R_{sp} pour diverses valeurs de D/J_{2b} et $(J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b})$, qui est indépendant de l'épaisseur du film N . Ensuite, pour les grandes valeurs de $(J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b})$, le point spécial R_{sp} est indépendant de D/J_{2b} . Les résultats obtenues par ce point spécial sont en accord et plus proches à des valeurs trouvées par d'autres travaux antérieurs de diverses méthodes numériques. Les profils de l'aimantation montrent un comportement de transition de phase du premier ordre. En outre, les diagrammes de phases dans le plan $(k_B T_c/J_{2b}, D/J_{2b})$ présentent une grande variété de transitions de phases de premier et de seconde ordre, lesquelles se rencontrent en des points tricritiques, qui sont en fonction de N . Il a été démontré que les températures augmentent avec l'épaisseur du film N uniquement lorsque $(J_{2s}/J_{2b} = 0.5 < R_{sp})$. Enfin, nous avons trouvé une nouvelle phase partiellement ordonnée ($\langle \sigma S \rangle \neq 0, \langle S \rangle = 0$ et $\langle \sigma \rangle = 0$) à haute température pour les valeurs positives de D/J_{2b} , pour une valeur importante de $(J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b})$ et pour chaque N , qui se trouve entre les phases paramagnétiques et de Baxter séparées par une transition de phase de second ordre.

Le travail entrepris dans cette thèse ouvre des perspectives qui méritent d'être étudiées en occurrence :

- D'étudier les propriétés magnétiques du modèle Ashkin-Teller appliquée aux films minces avec des mélanges de spin sur différents types de réseaux.
- Ce système sera également analysé sous l'effet de champ magnétique.

- Nous pensons de reprendre le même problème mais dans le cas où nous considérons que les interactions d'échanges entre les spins sont de second voisin au lieu de premier voisin, pour examiner leur influence sur les résultats présentées dans ce travail.
- D'étudier l'effet du champ transverse par la théorie du champ moyen sur les films minces magnétiques du modèle Ashkin Teller.
- Traiter les propriétés magnétiques d'un système ferromagnétique multicouche avec l'interaction dipôle-dipôle.
- Etudier les propriétés magnétiques des systèmes bicouche, tricouche et multicouche dans le cadre de spin Ising.

Résumer

À l'aide de la simulation de Monte Carlo, nous avons étudié les comportements critiques et les diagrammes de phases des films minces ferromagnétiques de modèle Ashkin Teller à spin-1/2 et également à spin-1. Dans la première partie : L'effet de l'interaction avec le couplage d'échange J_4 est étudié. Les diagrammes de phase présentent différents rapports de l'interaction d'échange de surface au point spécial, à laquelle toutes les épaisseurs de films ont la même température critique. Le système présente des transitions de premier et de second ordre. De plus, aux descriptions des points spéciaux, nous avons trouvé une autre phase partiellement ordonnée pour certaines valeurs de l'interaction du paramètre. Enfin, les exposants critiques de l'aimantation de surface β_{1m} sont estimés. Dans la deuxième partie : Les effets du champ cristallin D/J_{2b} et de couplage à quatre spins ($J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b}$), ont été étudiés en détail. Les diagrammes de phase montrent le point spécial, pour différentes valeurs de D/J_{2b} et ($J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b}$). Ensuite, nous avons trouvé des diagrammes de phase riches avec des transitions de phase du premier et du second ordre qui se rencontrent à des points tricritiques, qui dépendent de l'épaisseur de film N . Finalement, ce modèle présente une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle \sigma S \rangle$, entre la phase paramagnétique et la phase de Baxter, qui sont séparées par une transition de phase du second ordre, pour des valeurs positives de D/J_{2b} et pour chaque épaisseur de film N .

Mots-Clefs : Films minces ferromagnétique, Modèle Ashkin Teller, Simulation Monte Carlo, Point spécial, Point tricritiques.

Abstract

Using Monte Carlo simulations, we have studied the critical behaviours and phase diagrams of the spin-1/2 and spin-1 Ashkin Teller model ferromagnetic thin films. In the first part: The effect of the interaction with the exchange coupling J_4 is studied. The phase diagrams present different ratios of the surface exchange interaction at the special point, in which all the films thickness have the same critical temperature. First and second order transitions appears in the system. Moreover, at the special point descriptions, we found another partially ordered phase for certain values of the parameter's interaction. Finally, the critical exponents of the surface magnetization β_{1m} are estimated. In the second part, the effects of the crystal field D/J_{2b} and four-spins coupling ($J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b}$) has been studied in details. The phase diagrams in the ($k_B T_c/J_{2b}, J_{2s}/J_{2b}$) plane exhibits the special point, for different values of D/J_{2b} and ($J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b}$). Then, we found rich phase diagrams with first- and second-order phase transitions that meet at tricritical points, that are depended on the film thickness N . Finally, this model presents a new partially ordered phase $\langle \sigma S \rangle$, between the paramagnetic phase and the Baxter phase, which are separated by a second-order phase transition, for positive values of D/J_{2b} and for each film thickness N .

Keywords: Ferromagnetic thin films, Ashkin Teller model, Monte Carlo simulation, Special point, Tricritical point.

ملخص: باستخدام محاكاة مونت كارلو، قمنا بدراسة السلوكيات الحرجة ومخططات الطور للأغشية الرقيقة "الفيرومغناطيسية" ذو السبين 1/2 و السبين 1 لنموذج أشكين تالير. في الجزء الأول: تمت دراسة تأثير تفاعل الاقتران التبادلي J_4 . تظهر مخططات الطور نسبًا مختلفة عن تفاعل التبادل السطحي عند نقطة حرجة، حيث يكون لكل سموك الأغشية نفس درجة الحرارة الحرجة. والنظام يظهر أن الانتقالات هي من الدرجة الأولى والثانية. زيادة على أوصاف النقاط الحرجة وجدنا مرحلة أخرى مرتبة جزئيًا بقيم معينة لتفاعل المؤشرات. وأخيرًا، يتم تقدير الأسس الحرجة لمغنطة السطح β_{1m} . في الجزء الثاني: تمت دراسة تفصيلية لتأثيرات المجال البلوري D/J_{2b} والاقتران الرباعي ($J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b}$). تظهر مخططات الطور في المستوى ($k_B T_c/J_{2b}, J_{2s}/J_{2b}$) النقطة الحرجة، لقيم مختلفة من D/J_{2b} و ($J_{4s}/J_{2b}, J_{4b}/J_{2b}$). بعد ذلك، وجدنا مخططات طور كثيفة الإنتقالات من طور الدرجة الأولى والثانية تلنقي عند نقاط ثلاثية حرجة، والتي تتعلق بسماكة الفيلم N . في الأخير، يقدم هذا النموذج مرحلة جديدة مرتبة جزئيًا $\langle \sigma S \rangle$ ، بين المرحلة البارامغناطيسية و مرحلة باكستر، واللتين هما منفصلتين بانتقال طوري من الدرجة الثانية، بقيم موجبة لـ D/J_{2b} و لكل سمك غشائي N .

الكلمات المفتاحية: الأغشية الرقيقة المغناطيسية، نموذج أشكين تيلر، محاكاة مونت كارلو، النقطة الحرجة، النقط الثلاثية الحرجة