



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

**UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID – TLEMCCEN**

# THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

**DOCTORAT LMD**

Spécialité : *Physique Computationnelle*

Par :

**Mr AMIMER Zakariya**

Sur le thème

---

## **Etude du modèle d'Ashkin-Teller à spins mélangés $S=1$ et $\sigma=3/2$ sous l'effet d'anisotropies différentes par la méthode de Monte Carlo**

---

Soutenue publiquement le juillet 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme BEDRANE Zeyneb	Professeur	Université de Tlemcen	Présidente
M <sup>r</sup> BEKHECHI Smaïne	Professeur	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
Mr BRAHMI Nabil Badr-Eddine	M-C-A	Université de Tlemcen	Co-Directeur de thèse
Mr BENTALHA Zine el Abidine	Professeur	Université de Tlemcen	Examineur
Mr HABCHI Mohammed	M-C-A	ESSA-Tlemcen	Examineur

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

# Dédicace

*Je dédie cette thèse à ... ✍*

*Quelqu'un qui a bu la tasse vide, pour m'arroser une goutte d'amour, à celui qui a récolté les épines de mon chemin, pour me préparer le terrain pour apprendre :*

*"أبي وأمي"*

## **MA TRÈS CHÈRE MÈRE**

*Source inépuisable de tendresse, de patience et de sacrifice. Ta prière et ta Bénédiction m'ont été d'un grand secours tout au long de ma vie. J'espère ne jamais te décevoir, ni trahir ta confiance et tes sacrifices. Puisse Dieu tout puissant, te préserver et t'accorder santé, longue vie et Bonheur.*

## **MON TRÈS CHÈRE PÈRE**

*De tous les pères, tu es le meilleur. Tu as été et tu seras toujours un exemple pour moi par tes qualités humaines, ta persévérance et perfectionnisme. En témoignage de brut d'années de sacrifices, de sollicitudes, d'encouragement et de prières. En ce jour, j'espère réaliser l'un de tes rêves., ma reconnaissance et mon profond amour. Puisse Dieu vous préserver et vous procurer santé et bonheur.*

*Mes frères, ma sœur qui n'ont cessé d'être pour moi des exemples de persévérance, de courage et de générosité.*

*Tous les fils de mes frères*

*Tous Les membres de ma famille*

*Tous les amis et les proches sans exception*

*Mes chers collègues de l'université ABOU BAKR BALKAID, TLEMCEM*

*Mes chers collègues dans mon école de carrière.*

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

*Qui m'a aidé de loin et à proximité*

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



*Zaki*

# *Remerciement*

*Louange à Dieu, qui nous a permis de présenter cette recherche, nous a facilité la tâche, nous a accordé des connaissances utiles et nous a facilité le chemin de la connaissance. Oh mon Dieu, louange à toi, et merci à toi, car tu m'as aidé et m'accordé le succès ...*

*En effet, après avoir rédigé cette recherche, je n'aurais jamais pu entreprendre ce travail de doctorat sans le soutien des nombreuses personnes dont la générosité, le bon sens de l'humour et l'intérêt pour mes recherches m'ont permis d'avancer dans ce domaine.*

*La réalisation de ce mémoire a été faite au niveau de laboratoire d'automatique de l'Université ABOU BAKR BELKAID de TLEMCEM (LAT) sous la direction de professeure **Tayeb BENOUAZ**, je tiens à leur exprimer particulièrement ma gratitude, ils ont guidé mes travaux avec beaucoup de patience tout le long de la préparation de cette thèse. "Oh mon Dieu, pardonne-lui, aie pitié de lui, pardonne-lui et honore-le." "اللهم اغفر له وارحمه واعف عنه وأكرم نزله"*

*Merci aussi à Monsieur **Abdelhak CHIKHAOUI**, professeure à l'Université ABOU BAKR BELKAID de TLEMCEM Qui a pris sa place de directeur de laboratoire (LAT) C'est grâce à lui que j'ai pu concilier avec bonheur recherche théorique et appliquée pendant cette thèse.*

*Qui m'a accueilli pendant quatre ans dans son laboratoire. Ses membres aussi particulièrement **Mlle Fouzia BELARIBI**.*

Je tiens à remercier Monsieur **Smaine BEKHECHI**, Professeur à l'Université ABOU BAKR BELKAID de TLEMCEM, qui m'a encadré tout au long de cette thèse et qui m'a fait partager ses brillantes intuitions. Qu'il soit aussi remercié pour sa gentillesse, sa disponibilité permanente et pour les nombreux encouragements qu'il m'a prodigués.

Je remercie Monsieur **Nabil Badre-Eddin BRAHMI**, Cette thèse est le fruit d'une collaboration de plus de quatre années avec lui. C'est à ses côtés que j'ai compris ce que rigueur et précision voulaient dire.

Je désire aussi remercier la professeure **Mme BEDRANE Zeyneb** à l'université de Tlemcen Qui accepte d'être président du jury de ma thèse avec fierté.

Qu'elle en soit remerciée. J'exprime ma gratitude à Monsieur **BENTALHA Zine el Abidine** Professeur à l'Université de Tlemcen et à Monsieur **HABCHI Mohamed M-C-A** à l'ESSA de Tlemcen, qui ont bien voulu être examinateurs.

Je tiens aussi à remercier tous les membres de laboratoire théorique, qui m'a accueilli pendant quatre ans au sein de son laboratoire. C'est grâce à lui que j'ai pu concilier avec bonheur recherche théorique et appliquée pendant cette thèse.

J'aimerais également remercier les nombreuses personnes ayant pris soin de répondre à mes questions, durant des entretiens ou au travers de questionnaires, pour le temps qu'elles ont bien voulu accorder à mes travaux. Leurs témoignages m'ont été précieux pour établir mon raisonnement et bénéficier d'une vision d'ensemble sur mes interrogations particulier **Dr Amel Benmansour et Dr Rania Boudafla**.

Merci aussi à Monsieur **Hamid EZ-ZAHRAOUI** et Monsieur **Abdeldjalil RACHADI** Professeurs de l'enseignement supérieur à la Faculté des sciences de Rabat, Maroc dont les thèmes de recherche ont fortement inspiré cette thèse. Nous vous remercions également pour vos encouragements. Je remercie également Ainsi que des étudiants du laboratoire de l'Université Mohammed V de Rabat

Enfin, j'adresse mes sincères remerciements à ma famille pour leur soutien inconditionnel, ainsi qu'à mes proches, en particulier mon père et ma mère.

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

# Tableau des matières

Liste des figures

Liste des tableaux

**Introduction Générale.** 1

*Références.* 7

***Chapitre I : Théorie de la mécanique statistique des transitions de phase et de leurs propriétés magnétiques.***

1. *Principe de la physique statistique.* 9

1.1. *Théorie de la mécanique statistique.* 10

1.2. *États macroscopiques et microscopiques.* 10

2. *Transitions de phase.* 11

2.1. *Qu'est-ce qu'une transition de phase ?* 11

2.2. *Paramètre d'ordre.* 12

2.3. *Exemple des transitions de phase.* 13

2.4. *Propriétés des transitions de phase.* 13

2.4.1. *Diagrammes des phases.* 13

2.4.2. *Classification des phases de transition.* 15

2.4.3. *Exposants critiques.* 20

2.4.4. *Universalité.* 22

2.4.5. *Transition ferromagnétique-paramagnétique.* 23

2.4.6. Transition conducteur-supraconducteur.	24
3. Théorie de Landau.	24
4. Introduction au magnétisme.	26
5. Caractéristiques magnétiques.	27
5.1. Aimantation et susceptibilité.	27
5.2. Boucle d'hystérésis.	28
6. Classifications du magnétisme.	29
6.1. Diamagnétisme.	30
6.2. Paramagnétisme.	31
6.3. Ferromagnétisme.	33
6.4. Antiferromagnétisme.	34
6.5. Ferrimagnétisme.	36
Conclusion	37
Références	38

## **Chapitre II : les modèles de spins et la méthode de simulation.**

1. Généralité	41
2. Notion de spin.	41
3. Introduction sur le model d'Ising.	42
4. Modèles de Potts.	44
5. Modèle de Blume-Emery-Griffiths (BEG).	45
6. Modèle de Blume Capel (BC).	46
7. Modèle de XY.	46

8. <i>Modèle de Heisenberg.</i>	47
9. <i>Modèle d'Ashkin Teller (ATM).</i>	47
9.1. Généralité.	47
9.2. Applications du modèle Ashkin-Teller.	50
9.3. Différentes méthodes théoriques et numériques appliqué à l'ATM.	51
10. <i>Qu'est-ce que la simulation ?</i>	51
10.1. Définition.	51
10.2. Classification des modèles de simulation.	52
10.2.1. Modèles statiques et dynamiques.	52
10.2.2. Modèles déterministes et Stochastiques.	52
10.2.3. Modèles de simulation continus et discrets.	53
11. <i>Simulation de Monte Carlo (MCM).</i>	53
11.1. Applications classiques de la Méthode de Monte Carlo.	53
11.1.1. Échantillonnage.	53
11.1.2. Estimation.	54
11.1.3. Optimisation.	54
12. <i>Guide d'échantillonnage de Monte Carlo.</i>	54
12.1. Nombres aléatoires.	54
12.2. Échelle à taille finie.	55
12.3. Évaluation de l'énergie libre et de l'entropie.	55
12.4. Conditions aux limites.	56
13. <i>Chaîne de Markov Monte Carlo (MCMC).</i>	56



14. <i>Algorithme de Métropolis.</i>	57
15. <i>Analyse des erreurs.</i>	58
Conclusion.	59
Références.	60
<b><i>Chapitre III : Résultats et discussion.</i></b>	
<i>Introduction.</i>	65
<b><i>Partie A : Model Ashkin Teller à spin mélangés (<math>s=1, \sigma=3/2</math>).</i></b>	
1. Modèle et diagramme de phase de l'état fondamental.	65
2. Simulation de Monte Carlo.	69
3. Résultats et discussions.	70
<b><i>Partie B : Modèle Ashkin Teller à spin mélangés (<math>s=1/2, \sigma=3/2</math>).</i></b>	
1. Diagramme de phase à l'état fondamental.	80
2. Simulation de Monte Carlo.	82
<i>Références.</i>	88
<b>Conclusion Générale et perspective.</b>	89

## Liste des figures

<b>Figure I.1 :</b> <i>L'aimantation locale moyenne, résultant de la moyenne des moments magnétiques atomiques au voisinage de <math>x</math>.</i>	12
<b>Figure I.2 :</b> <i>Diagramme de phase caractéristique.</i>	14
<b>Figure I.3 :</b> <i>Diagramme de phase caractéristique d'un ferromagnétique.</i>	15
<b>Figure I.4 :</b> <i>Deux possibilités de changement <math>\delta G</math> de l'énergie libre associées aux transitions de phase du 1er et du 2ème ordre.</i>	17
<b>Figure I.5 :</b> <i>Transitions du premier ordre. Les potentiels comme <math>G</math> sont continus à la transition, mais les dérivées premières et les grandeurs associées (<math>V</math> et <math>S</math>) sont discontinues.</i>	18
<b>Figure I.6 :</b> <i>Transitions du deuxième ordre, les dérivées premières de <math>G</math> sont continuées, mais certaines dérivées secondes divergent : <math>C_p</math>, par exemple, tend vers l'infini.</i>	19
<b>Figure I.7 :</b> <i>transition de phase du 1<sup>er</sup> et 2<sup>ème</sup> ordre selon Landau</i>	19
<b>Figure I.8 :</b> <i>aimantation à champ nul d'un ferromagnétique. En dessous de la température critique, il existe une magnétisation spontanée.</i>	21
<b>Figure I.9 :</b> <i>Dépendance de la susceptibilité à la température.</i>	22
<b>Figure I.10 :</b> <i>Relation entre <math>F_L(T, V, N, \Psi) - F_0(T, V, N)</math> et <math>\Psi</math>.</i>	26
<b>Figure I.11 :</b> <i>Boucle d'hystérésis pour un Ferro- ou ferrimagnétique.</i>	29
<b>Figure I.12 :</b> <i>(a) Dépendance sur le champ de l'aimantation et variation thermique de la susceptibilité magnétique ; (b) pour des substances diamagnétiques.</i>	30
<b>Figure I.13 :</b> <i>Alignement des électrons à l'opposé du champ magnétique (<math>H</math>).</i>	31
<b>Figure I.13 :</b> <i>comportement paramagnétique présente (a) : la magnétisation en fonction de champ magnétique. (b) : Inverse de susceptibilité en fonction de la température.</i>	32
<b>Figure I.14 :</b> <i>Les matériaux paramagnétiques.</i>	32

<b>Figure I.16 :</b> <i>a) Dépendance du champ de magnétisation (<math>T_i &lt; T_C &lt; T_2 &lt; T_3</math>), b) Dépendance de la température de <math>1/\chi</math>, c) Dépendance de la température de la magnétisation spontanée.</i>	33
<b>Figure I.17 :</b> <i>Matériaux ferromagnétiques montrent un alignement parallèle des moments magnétiques.</i>	34
<b>Figure I.18 :</b> <i>a) dépendance d'aimantation en fonction de champ magnétique b) inverse de susceptibilité en fonction de température</i>	35
<b>Figure I.19 :</b> <i>Arrangement antiferromagnétique des spins atomiques.</i>	35
<b>Figure I.20 :</b> <i>Deux grandeurs présente le comportement ferrimagnétique.</i>	36
<b>Figure I.21 :</b> <i>comportement ferrimagnétique.</i>	36
<b>Figure II.1 :</b> <i>Réseau carré et une paire de sites voisins les plus proches ij.</i>	44
<b>Figure III.1 :</b> <i>Diagramme de phase de l'état fondamental dans le cas de <math>D_1=0</math>.</i>	66
<b>Figure III.2 :</b> <i>Diagramme de phase de l'état fondamental dans le cas de <math>D_2=0</math>.</i>	67
<b>Figure III.3 :</b> <i>Diagramme de phase de l'état fondamental dans le cas <math>D_1 = D_2 = D</math>.</i>	68
<b>Figure III.4 :</b> <i>la magnétisation (les paramètres <math>\sigma</math> ; <math>S</math> ; <math>\sigma S</math>) en fonction de la température, avec la taille <math>L = 30</math>, avec le champ cristallin <math>D_1 = 0</math> ; nous prenons <math>K_4 = 1</math> et pour <math>D_2=6</math></i>	70
<i>Un comportement continu est observé signalant une transition de second ordre.</i>	
<b>Figure III.5 :</b> <i>la susceptibilité (les paramètres <math>\sigma</math> ; <math>S</math> ; <math>\sigma S</math>) en fonction de la température, avec la taille <math>L = 30</math>, avec le champ cristallin <math>D_1 = 0</math> ; nous prenons <math>K_4 = 1</math> et pour <math>D_2 =</math></i>	71
<i>6 associer à la magnétisation de figure III.4.</i>	
<b>Figure III.6 :</b> <i>la magnétisation (les paramètres <math>\sigma</math> ; <math>S</math> ; <math>\sigma S</math>) en fonction de la température, avec la taille <math>L = 30</math>, avec le champ cristallin <math>D_1 = 0</math> ; nous prenons <math>K_4 = 1</math> et pour <math>D_2 =</math></i>	71
<i>-6. Un comportement continu est observé signalant une transition de second ordre.</i>	
<b>Figure III.7 :</b> <i>la susceptibilité (les paramètres <math>\sigma</math> ; <math>S</math> ; <math>\sigma S</math>) en fonction de la température, avec la taille <math>L=30</math>, avec le champ cristallin <math>D_1=0</math> ; nous prenons <math>K_4 = 1</math> et pour <math>D_2=-6</math></i>	72

- Figure III.8 :** *Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1 = D2 = D$ ,  $K4 = 1$ ,  $D = -6$*  73
- Figure III.9 :** *susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1=D2 = D$ ,  $K4= 1$ ,  $D = -6$ .* 73
- Figure III.10 :** *Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1 = D2 =D$ ,  $K4 = 3$ ,  $D=-2$  un ordre partiel est observé à haute température.* 74
- Figure III.11 :** *Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1=D2=D$ ,  $K4= 3$ ,  $D = -2$  un ordre partiel est observé à haute température.* 74
- Figure III.12 :** *Diagramme de phase dans le plan " $D2/K2$  ;  $T/K2$ " pour  $K4 = 1$  par simulation MC avec  $L = 30$ .* 76
- Figure III.13 :** *Diagramme de phase dans le plan " $D/K2$  ;  $T/K2$ " pour  $K4 = 1$  par simulation MC avec  $L = 30$ .* 76
- Figure III.14 :** *Diagramme de phase dans le plan " $D/K2$  ;  $T/K2$ " pour  $K4 = 3$  par simulation MC avec  $L = 30$*  77
- Figure III.15 :** *Aimantation (les paramètres  $\sigma$ ,  $S$ ,  $\sigma S$ ) en fonction de la température pour un système de taille  $L = 30$  avec  $T = 1$ .* 78
- Figure III.16 :** *Variation de cumulant de Binder pour différents choix de la taille  $L$  en fonction de la température dans le cas  $K4/K2 = 1$  et  $D2/K2=3$  " $D1 = 0$ " pour le paramètre d'ordre  $\sigma$ .* 79
- Figure III.17 :** *Variation de de la susceptibilité pour différents choix de la taille  $L$  en fonction de la température dans le cas  $K4/K2 = 1$  et  $D2/K2 = 3$  " $D1 = 0$ " pour le paramètre d'ordre  $\sigma$ .* 79
- Figure III.18 :** *Variation de l'aimantation pour différents choix de la taille  $L$  en fonction de la température dans le cas  $K4/K2 = 1$  et  $D2/K2 = 3$  " $D1 = 0$ " pour le paramètre d'ordre  $\sigma$*  80
- Figure III.19 :** *Diagramme de phase de l'état fondamental* 81

- Figure III.20 :** *Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  ( $D=-9$  et  $K4=3$ ).* 82
- Figure III.21 :** *susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  associée à l'aimantation (figure 20) ( $D=-9$  et  $K4=3$ )* 83
- Figure III.22 :** *Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  ( $D=4$  et  $K4=3$ ).* 83
- Figure III.23 :** *Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  associée à l'aimantation (figure III.20) ( $D=-9$  et  $K4=3$ )* 84
- Figure III.24 :** *Diagramme de phase dans le plan " $D^2/K^2$  ;  $T/K^2$ " pour  $K4 = 3$  par simulation MC avec  $L = 30$ .* 85
- Figure III.25 :** *aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  ( $D=-7$  et  $K4=6$ ).* 85
- Figure III.26 :** *Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  associée à l'aimantation (figure III.20) ( $D=-9$  et  $K4=3$ ).* 87
- Figure III.27 :** *Diagramme de phase dans le plan  $T$  ;  $D$  avec  $K4=6$  sous la simulation de MC.* 87

## *Liste des tableaux*

<b>Tableau I.1 :</b> <i>Exemples de la variété des transitions de phase dans la nature.</i>	13
<b>Tableau I.2 :</b> <i>Définitions des exposants critiques les plus couramment utilisés pour un système magnétique.</i>	21
<b>Tableau I.3 :</b> <i>Susceptibilité dans le diamagnétisme de quelque composante.</i>	31
<b>Tableau I.4 :</b> <i>susceptibilité dans le cas paramagnétisme pour quelque composante</i>	32
<b>Tableau I.5 :</b> <i>Propriétés de quelques ferromagnétiques ordinaires.</i>	34
<b>Tableau I.6 :</b> <i>Propriétés de quelques antiferromagnétiques usuels.</i>	35
<b>Tableau I.7 :</b> <i>Propriétés de certains ferrimagnétiques habituels.</i>	37

INTRODUCTION  
GENERALE

# Introduction Générale

**L**a physique statistique peut être considérée comme ayant son origine au milieu du XIXe siècle à partir de l'hypothèse atomique. Surtout qu'il est à la base de nombreux développements actuels et à la pointe de la science des matériaux, un domaine où l'approche macroscopique classique n'est pas appropriée. Les problèmes de physique statistique concernent des systèmes avec un plus grand nombre de degrés de liberté que nous ne pouvons suivre de manière explicite en expérience, théorie ou simulation. De plus, il peut être formulé pour permettre le calcul de l'énergie libre. Dans cette science, nous savons que la structure de la matière est constituée d'atomes. Fondée sur la compréhension des propriétés microscopiques des atomes, la physique statistique part du niveau microscopique, et peut traiter non seulement des états d'équilibre thermique, mais aussi des états de non-équilibre. Les petites différences d'équilibre thermique sont étudiées par la théorie de la réponse linéaire, tout comme les effets tels que la conductivité électrique ou thermique. Cependant, la physique statistique des états de non-équilibre n'est pas encore bien établie. Il s'agit d'une discipline de la physique qui fait encore l'objet de recherches actives aujourd'hui [1].

Non seulement cette dernière possibilité permet l'étude de la transition de phase et leurs propriétés. Bien entendu, la notion de phase est le point de départ. En thermodynamique classique, les phases sont des entités homogènes d'une même matière, qui sont en équilibre et qui se caractérisent par des critères thermodynamiques convenablement choisis ; Il agit des valeurs spécifiques de quelques grandeurs thermodynamiques telles que le volume, l'aimantation, la polarisation électrique, etc. Au point où la nature connaît, dans le cadre de conditions particulières, des transitions de phase pour un certain nombre de systèmes, que nous appelons les transformations, par exemple, d'un gaz à un liquide ou un solide, et d'un paramagnétique à des états magnétiques ordonnés ; la transition d'un métal normal à une phase supraconductrice, la transition normale vers l'hélium superfluide, etc. [2].



Ces remarquables phénomènes se manifestent en conséquence des corrélations entre particules. Leur description se fait à l'aide de la thermodynamique et de la physique statistique. Autrement dit, les transitions de phase sont caractérisées par l'émergence de certaines propriétés nouvelles de la matière, par exemple le passage du ferromagnétique au paramagnétique, ainsi que le passage de la conductivité à la supraconductivité., ont aussi été constatées ; de telles phases ou de nouveaux états dont les propriétés peuvent avoir des applications intéressantes, surviennent en dehors 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. En générale, une transition se traduit par une suite d'événements physiques associés [3]. En admettant une classification des transitions de phases autant qu'évident Ehrenfest (1933) a présenté une classe des transitions de phase sur la base des sauts des dérivées de la fonction d'énergie libre. Cette classification a été immédiatement appliquée par A.J. Rutgers dans la recherche de la transition de l'état normal à l'état supraconducteur dans les métaux. De même que on adopte de plus en plus une classification binaire radicalement simplifiée des transitions de phase en transitions de "premier ordre" sachant que la discontinuité de dérivé première des grandeurs thermodynamique et transitions "continues", une autre classe. Bien que la transition de deuxième ordre signifie la continuité de dérivé premiers de ces grandeurs impliqués [4].

A l'image de ce contexte, le traitement des phénomènes critiques d'autant plus que les phénomènes de transition de phase continues sont généralement considérés comme des phénomènes critiques. En d'autres termes, des phénomènes inhabituels qui apparaissent autour du point critique de sorte que l'un des objectifs importants de la théorie des phénomènes critiques est de développer une méthode systématique de calcul des valeurs des exposants critiques. [2]; il s'agit d'exprimer les transitions dans les systèmes magnétiques pour comprendre les propriétés magnétiques des matériaux dans cette branche de physique. Les systèmes informatiques, des ordinateurs personnels aux gros ordinateurs, servent de matériaux magnétiques pour stocker des informations sur des bandes, des disquettes et des disques durs, bien que les matériaux magnétiques concernent de multiples autres aspects de notre vie. Chaque automobile comporte des dizaines de moteurs, actionneurs, capteurs, inducteurs et autres composants électromagnétiques et magnéto mécaniques utilisant des matériaux magnétiques durs. Finalement, les matériaux magnétiques sont la colonne vertébrale de secteurs en expansion : la protection électronique des articles, la protection des biens et le contrôle d'accès.

De minuscules bandes ou films de matériaux magnétiques spécialement conçus pour stocker un ou plusieurs bits d'informations sur un article ou sur un objet [5].

En général, le fonctionnement magnétique des éléments constitutifs d'un solide est déterminé par les directions des dipôles magnétiques. Chaque site chacun de moments magnétiques, est constitué de spins électroniques, de voies orbitales électroniques et de moments magnétiques nucléaires. En raison du fait que le moment magnétique nucléaire est tellement plus petit que le moment magnétique électronique, il n'est pas possible d'orienter les dipôles, quand on examine le magnétisme macroscopique des solides, le moment magnétique nucléaire peut être considéré comme un indicateur de l'état de la matière. En fait, lorsqu'on étudie le magnétisme macroscopique dans les solides, on peut négliger le moment nucléaire et ne considérer que les moments ionique et électronique. En ce qui concerne les métaux de transition, le moment orbital est toujours éteint, de sorte que le moment réel est principalement fourni par le spin électronique. Le magnétisme dans les solides, selon sa magnitude et son signe, inclut principalement cinq types : Le diamagnétisme, le paramagnétisme, le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme. Les deux premiers types ne représentent que les propriétés de l'ensemble des moments indépendamment, alors que les trois derniers types reflètent les phénomènes coopératifs d'un grand nombre de moments [6].

Ces dernières décennies, le fonctionnement des spins dans différentes structures de réseau a constitué une manifestation magnétique. Elle est caractérisée par le phénomène des spins mixtes qui sont bien définis dans l'approche des modèles d'Ising [7]. Conformément, où ce dernier est le plus étudié des modèles de la théorie statistique des champs, y compris la théorie des phénomènes critiques et la théorie des particules ; En réalité, le modèle d'Ising est une sorte de grande famille de modèles, dont les différents membres sont déterminés par notre choix de la dimensionnalité [8]. À travers lui, il rend compte à ce dernier du modèle Ashkin Teller, l'un des modèles les plus importants de la physique statistique. Et chaque année, une douzaine de travaux lui sont consacrés [9]. Il représente une généralisation non triviale du modèle d'Ising largement exploité et présente un diagramme de phase complexe [10].

Cette thèse est un travail de recherche en physique théorique et computationnelle. La présente thèse aborde les aspects théorique et numérique de spin isotrope mélangés ( $S=1$ ,  $\sigma=3/2$ ) du modèle d'Ashkin-Teller c'est l'un des modèles les plus importants qui dépendent du modèle Ising. Dans une première partie, tout d'abord, nous avons étudié ce modèle dans l'état fondamental ( $T = 0$ ) en utilisant la méthode directe pour vérifier les phases stables qu'ils minimisent l'énergie et le type de ligne de transition de phase séparant ces phases. Puis, nous avons simulé ce modèle à une température assez élevée en utilisant la méthode de Monte Carlo, et à ce stade nous avons abordé le calcul analytique des équations de différence d'énergie selon les variables des spins concernés en fonction de partir de l'hamiltonienne de système étudié, par conséquent dans ce travail, le but est d'obtenir des diagrammes des phases à partir de traçage des courbes d'aimantation et la susceptibilité aussi la vérification des nouvelles phases avec la détermination du type de lignes des transitions de phase entre elles. Puis ; Quant à la deuxième partie, nous avons étudié le même modèle après avoir changé les valeurs de spin à nous avons utilisé le cas de spin mélangés ( $S=1/2$ ,  $\sigma=3/2$ ), Expérimentalement, nous avons fait la même chose que la première partie. Mais Les résultats obtenus ne sont pas identiques aux précédents. Sa structure est organisée comme suit :

- ❖ Après une introduction et une généralisation en mécanique statistique contenant quelques concepts, ainsi que la structuration de notre thèse, après avoir décrit l'objectif et le problématique de notre travaille.
- ❖ Le premier chapitre traite donc quelques concepts. Dans un premier temps, l'aspect de la théorie des transitions de phase et leurs propriétés comprenant les phénomènes critiques sont en prise en compte ; Ainsi, dans un deuxième temps les caractéristiques des matériaux magnétiques (le diamagnétisme, le paramagnétisme, le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme) sont définies avec quelques exemples présenter.
- ❖ Le chapitre 2 traite de certains aspects des modèles de rotation dans les systèmes de type Ising qui sont bien connus en mécanique statistique (les modèles classiques sont également des modèles de rotation continue). D'autre part, nous avons pu définir la simulation puis décrire la méthode Monte Carlo, qui est notre outil de recherche, en nous appuyant sur l'algorithme de Métropolis.

- ❖ Le troisième chapitre est consacré à estimer les résultats de nos travaux à partir de l'état fondamental du modèle d'Ashkin-Taller et de leurs diagrammes de phases, puis d'étudier le modèle d'Ashkin-Taller avec spin mélangés dans les deux états de spins et de déterminer la phase spécifique diagrammes de température et déterminer l'ordre des différentes transitions de phase qui sont apparues dans ce modèle comme discuté dans nos résultats.
- ❖ Nous terminons notre travail par une conclusion générale et perspective.

## Références

- [1] YOSHIOKA, Daijiro. *Statistical physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [2] NISHIMORI, Hidetoshi et ORTIZ, Gerardo. *Elements of phase transitions and critical phenomena*. OUP Oxford, 2010.
- [3] P. Papon, J. Leblond and PHE Meijer, *The Physics of Phase Transitions; Concepts and Applications*, Springer-Verlag, Berlin and Heidelberg, 2002, xviii+ 398p., 24× 16cm, \12,590 (Advanced Texts in Physics) 2003, vol. 58, no 6, p. 446.
- [4] Jaeger, G. The Ehrenfest *Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution*. Arch Hist Exact Sc. **53**, 51–81 (1998).
- [5] O’HANDLEY, Robert C. *Modern magnetic Materials: principles and applications*. Wiley, 2000.
- [6] FENG, Duan et JIN, Guojun. *Introduction to Condensed Matter Physics, Volume 1*. World Scientific Publishing Company, 2005.
- [7] AHMED, S. Sidi, BAHMAD, L., BENYOUSSEF, A., et al. *Mixed spin-1 and spin-1/2 Blume-Emery-Griffiths model on the Bethe lattice: Monte Carlo simulation. Superlattices and Microstructures*, 2017, vol. 109, p. 841-851.
- [8] MCCOMB, W. David. *Study notes for Statistical Physics: A concise, unified overview of the subject-eBooks and text books from book boon. com*. 2015.
- [9] WOJTKOWIAK, Z. et MUSIAŁ, G. *Verifying of nonuniversal behavior in the 3D Ashkin-Teller model*.
- [10] WOJTKOWIAK, Z. et MUSIAŁ, G. *Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model. Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 2019, vol. 513, p. 104-111.

# Chapitre I

THEORIE DE LA MECANIQUE STATISTIQUE  
DES TRANSITIONS DE PHASE ET DES  
PROPRIETES MAGNETIQUES.

## 1. Principe de la physique statistique

La mécanique statistique est un instrument essentiel pour étudier les caractéristiques physiques de la matière en générale sur la base du fonctionnement dynamique de ses composantes « microscopique ». Basé sur des principes statistiques mathématique bien établis d'une part et de la mécanique hamiltonienne d'autre part, le mécanisme de la mécanique statistique s'est avéré d'une immense valeur pour la physique depuis des années. Compte tenu de l'universalité de son intérêt une connaissance de fond de cette matière est considéré comme indispensable pour toute étudier en physique, quel que soit le ou les domaines dans lesquels on envisage de se spécialiser [1].

Par ailleurs, la gamme de ce formalisme est presque aussi vaste que la portée même des phénomènes naturels, car il est en théorie applicable à la substance dans n'importe quel état, de plus il a été appliqué à l'étude de la matière à l'état solide, liquide et gazeux, ainsi que de la matière constituée de diverses phases et de nombreuses composantes. Également dans des conditions extrêmes de densité et de température, et aussi sur l'étude de la matière en équilibre avec le rayonnement [1].

En revanche, la science de la mécanique statistique a pour de fournir des méthodes raisonnables pour aborder le comportement des systèmes mécaniques dans des circonstances telles que notre connaissance de l'état du système est inférieure à la connaissance maximale qui serait théoriquement possible. Les règles de la mécanique ordinaire peuvent être considérées comme nous permettant de faire des prévisions exactes quant à l'état futur d'un système mécanique à partir d'une connaissance précise de son état initial. D'autre part, les principes de la mécanique statistique doivent être considérés comme permettant de faire des prédictions satisfaisantes sur l'état futur d'un système, dont on peut s'attendre à ce qu'il se maintienne en moyenne, à partir d'une connaissance imparfaite de son état initial. Comme nos contacts réels avec le monde physique sont tels que nous n'avons jamais la connaissance maximale des systèmes sont considérés comme théoriquement acceptables [2].

Notamment, le but de la physique statistique est d'étudier le comportement des particules qui composent les corps physiques par rapport aux quantités qui sont observées à l'échelle humaine. D'autre part, on peut calculer, par exemple, le nombre de particules d'une taille donnée à un moment donné, ou le nombre de particules à une vitesse donnée : c'est donc une bonne approche statistique qui repose sur l'étude des probabilités [3].

### 1.1. Théorie de la mécanique statistique

À partir de la fonction de partition canonique :

$$\mathcal{Z}(\mathbf{T}, \mathbf{H}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-\beta E_{\mathbf{r}}} \quad 1.1$$

Où la somme est sur tous les états  $\mathbf{r}$  avec l'énergie  $E_{\mathbf{r}}$  et :

$$\beta = 1/kT \quad 1.2$$

Avec  $k$  constante de Boltzmann, concernant les termes magnétiques et il convient donc de prendre en considération un ensemble dans lequel  $Z$  dépend de la température et du champ  $H$ . Les statistiques de Maxwell-Boltzmann sont appropriées car les systèmes magnétiques que nous envisageons seront constitués de spins localisés, et donc distinguables, et les systèmes fluides seront en mode conventionnel [4].

L'énergie libre est proportionnelle au logarithme de la fonction de partition :

$$\mathcal{F}(\mathbf{T}, \mathbf{H}) = -kT \ln \mathcal{Z}(\mathbf{T}, \mathbf{H}) \quad 1.3$$

Toutes les propriétés thermodynamiques macroscopiques découlent de la différenciation de l'énergie libre. Les formules pertinentes sont énumérées dans les équations 1.1 et 1.3 pour les systèmes magnétiques et fluides respectivement. Les lecteurs qui ne les maîtrisent pas devraient consulter un texte sur la mécanique statistique. Ceux qui sont un peu rouillés pourront trouver utile d'essayer les problèmes 1.1 et 1.3.

Souvent, notre objectif sera de calculer l'énergie libre. Cependant, parfois, en particulier dans le travail numérique, il est plus simple d'extraire directement des propriétés telles que l'aimantation ou l'énergie [4].

### 1.2. États macroscopiques et microscopiques

On considère un système physique comprenant  $N$  particules identiques détenu dans un volume  $V$ , dans un cas typique,  $N$  serait un nombre extrêmement grand en général, de l'ordre de  $10^{23}$ . Au vu de cela il est usuel de réaliser des analyses dans la limite dite thermodynamique, c'est-à-dire  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$ . Dans cette limite, les propriétés étendues du système deviennent proportionnelles à la taille du système (c'est-à-dire proportionnelles à  $N$  ou à  $V$ ), alors que les propriétés intensives en sont indépendantes, la densité des particules demeure, bien entendu, un paramètre important pour toutes les propriétés physiques du système. Ensuite, nous prenons en compte l'énergie totale  $E$  du système. Si les particules composant le système pouvaient être considérées comme non interactives, l'énergie totale  $E$  serait égale à la somme des énergies  $\epsilon_i$  des particules individuelles [5].



$$E = \sum_i n_i \varepsilon_i \quad 1.4$$

Où  $n_i$  indique le nombre de particules ayant chacune une énergie  $\varepsilon_i$ . Il est clair que,

$$N = \sum_i n_i \quad 1.5$$

Conformément à la mécanique quantique, les énergies de chaque particule  $\varepsilon_i$  sont discrètes et leurs valeurs dépendent de manière cruciale du volume  $V$ . Par ailleurs, les valeurs possibles de l'énergie totale  $E$  sont également discrètes. Cependant, pour  $V$  grand, l'écart entre les différentes valeurs d'énergie est si faible par rapport à l'énergie totale du système que le paramètre  $E$  peut être considéré comme une variable continue. Cela serait vrai même si les particules étaient en interaction mutuelle ; bien sûr, dans ce cas, l'énergie totale  $E$  ne peut pas être écrite sous la forme de l'équation 1.4 [5].

## 2. Transitions de phase

### 2.1. Qu'est-ce qu'une transition de phase ?

D'abord, une phase est un état de la matière dans le cadre duquel les caractéristiques physiques macroscopique homogène sur l'échelle macroscopique. C'est-à-dire une phase est définie par une fonction de quelques éléments macroscopiques des paramètres tels que la température et la pression. Par exemple, la glace, l'eau liquide et la vapeur d'eau, dont chacune est une phase de l'eau comme un ensemble de nombres macroscopiques de molécules d' $\text{H}_2\text{O}$ . Par conséquent, la phase d'une substance macroscopique est déterminée par les valeurs de ces paramètres [6].

Une transition de phase est un changement brusque dans un système qui se produit sur une petite zone sous un contrôle variable, pour les transitions de phase de type thermodynamique, les variables de contrôle habituelles sont les variables" de température, de pression ou de champ magnétique [7]. En fait, les transitions de phase sont des phénomènes physiques connus depuis très longtemps. On les retrouve dans la nature, ils sont aussi utilisés dans de nombreux systèmes techniques. Des transitions de phase également mené sur de nouvelles propriétés du matériau, par exemple le ferromagnétisme et la supraconductivité [8].

En outre, les systèmes physiques compris comme les fluides simples et les mélanges de fluides, les matériaux magnétiques, les alliages métalliques, les matériaux ferroélectriques, les superfluides et supraconducteurs, les cristaux liquides qui sont associés aux transitions de phase depuis le début du XXe siècle, grâce à une théorie phénoménologique mise en avant par Pierre Curie, et élaborée par Pierre Weiss, qui est intimement liée à la théorie de van der Waals.

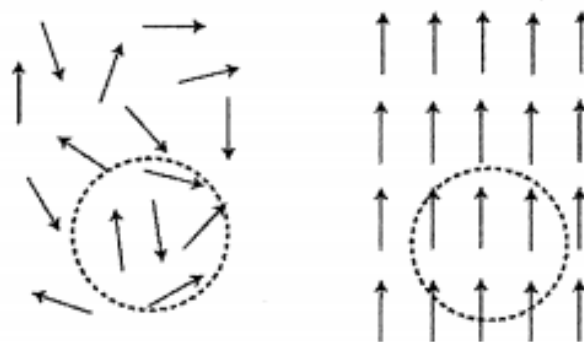
Ces théories classiques des transitions de phase sont toujours utilisées pour définir les caractéristiques qualitatives des transitions de phase dans toutes sortes de systèmes [9].

## 2.2. Paramètre d'ordre

Le paramètre d'ordre est une quantité physique spécifique pour déterminer l'état du système. Ce dernier est nécessaire pour distinguer les différentes phases dans les systèmes magnétiques, avec le champ magnétique et la température comme paramètres du système, l'aimantation ( $m$ ) joue le rôle du paramètre d'ordre, dans ce cas ce paramètre qui différencie la phase magnétique ( $m \neq 0$ ) de la phase non magnétique ( $m = 0$ ) [10].

En outre, au cours d'une transition de phase, un système évolue d'un état moins "ordonné" à un état plus ordonné, ou vice versa. La désignation exacte du terme "ordre" dépend du système. Supposons la transition ferromagnétique, par exemple. Les directions des moments magnétiques atomiques passent d'une orientation aléatoire à un alignement tel que le montre la figure 1, nous pouvons définir l'ordre par le moment magnétique moyen  $\Phi(x)$ , que l'on peut atteindre en faisant la moyenne des vecteurs de moment dans un petit quartier autour du point  $x$ . Lorsque les orientations sont aléatoires, on obtient  $\Phi(x) \neq 0$ . Ceci est le prototype d'un paramètre d'ordre [11].

Sachant que  $x$  désigné par le cercle en pointillé ainsi qu'il est un prototype du paramètre d'ordre. Le cercle en pointillés doit comporter un très grand nombre d'atomes [11].



**Figure I.1 :** L'aimantation locale moyenne, résultant de la moyenne des moments magnétiques atomiques au voisinage de  $x$

Le tableau I.1 présente une liste des exemples de transitions de phase dont les fluides et les ferromagnétiques. Nous décrivons deux cas plus en détail pour illustrer la richesse et la complexité des diagrammes de phase que l'on trouve dans la nature [4].

**Tableau I.1 :** Exemples de la variété des transitions de phase dans la nature

<i>Transition</i>	<i>Exemple</i>	<i>Paramètre d'ordre</i>
<i>Ferromagnétique</i>	<i>Fe</i>	<i>Aimantation</i>
<i>Antiferromagnétique</i>	<i>MnO</i>	<i>Aimantation du sous-réseau</i>
<i>Ferrimagnétique</i>	<i>Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub></i>	<i>Aimantation du sous-réseau</i>
<i>Ferroélectrique</i>	<i>SrTiO<sub>3</sub></i>	<i>Déplacements atomiques</i>
<i>Structurel</i>	<i>BaTiO<sub>3</sub></i>	<i>Polarisation électrique</i>
<i>Ordre-désordre</i>	<i>CuZn</i>	<i>Concentration atomique du sous-réseau</i>
<i>Séparation des phases</i>	<i>CCl<sub>4</sub>+C<sub>7</sub>F<sub>16</sub></i>	<i>Différence de concentration</i>
<i>Super fluide</i>	<i>He liquide</i>	<i>Comportement de l'onde de la condensation</i>
<i>Supraconducteurs</i>	<i>Al, Nb<sub>3</sub>Sn</i>	<i>Fonction d'onde</i>
<i>Cristallin liquide</i>	<i>Molécules de tige</i>	<i>Divers</i>

#### 2.4. Propriétés des transitions de phase

Les transitions de phase sont généralement le résultat de changements de composition ou de la température pendant le processus de traitement ou de stockage. La compréhension des températures de transition est très importante pour connaître les procédés tels que l'évaporation, la fonction de l'état physique des divers matériaux qui dépend de la température peut être définie à l'aide de diagrammes de phase. Les variations qui sont constatées aux températures de transition peuvent être exploitées pour la description de l'effet de la transition sur les propriétés physiques [12].

### 2.4.1. Diagrammes des phases

Un diagramme de phase est un graphe, dont les axes sont les paramètres thermodynamiques, dans lequel la phase est indiquée pour chacun des points. Un exemple de diagramme de phase est présenté dans la figure 2 [8].

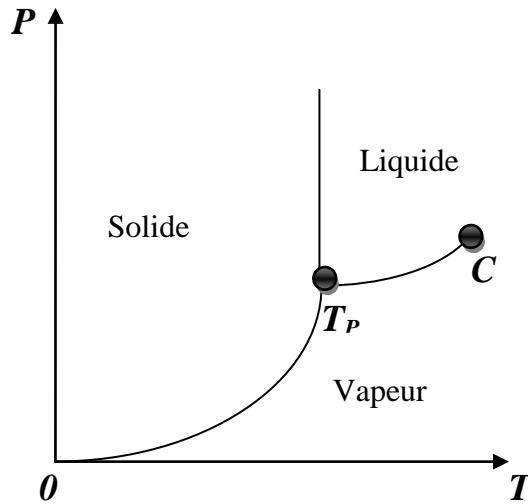


Figure I.2 : Diagramme de phase caractéristique

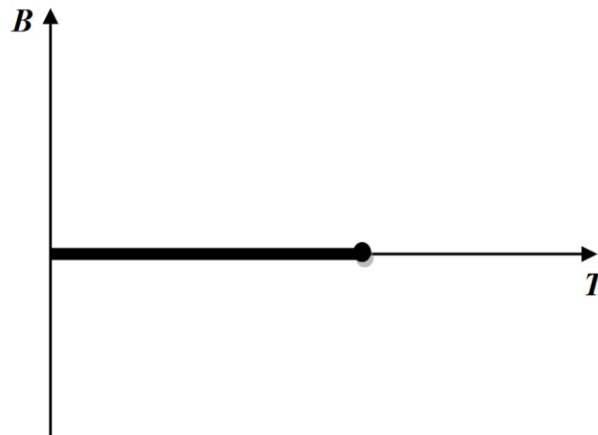
Ce diagramme présente la phase d'une substance est déterminé par les valeurs des différents paramètres de contrôle tels que la température  $T$  et la pression  $p$ ,  $C$  désigne le point critique et  $T_P$  : le point triple. Notez que les limites de phase sont utilisées pour séparer les différentes phases ; La modification des paramètres tels que la température de chaque côté de la phase provoque un changement brusque de la phase du matériau. Par conséquent, dans un solide la phase se change en une phase liquide à la température de fusion. Il y a une transition de phase [8].

Également, nous considérons l'exemple simple d'un ferromagnétique uniaxial de type classique. Il est représenté par le modèle Ising (1925). Dont l'hamiltonien est [13] :

$$\mathcal{H}[\sigma] = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J(i,j) \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \quad 1.6$$

Dans laquelle  $B$  est le champ magnétique extérieur, et le couplage  $J$  diminue avec la distance et est positif pour assurer le ferromagnétisme. L'interaction est supposée être de faible portée aussi  $i, j$  distingue les voisins les plus proches telle que la variable de spin  $\sigma_i$  localisée au site  $i$  adopte les valeurs  $\pm 1$ , nous envisageons un réseau avec  $N$  sites, nous pouvons varier à la fois la

température  $T$  et le champ magnétique externe  $B$ . Le diagramme de phase est assez simple [12] :



**Figure I.3 :** Diagramme de phase caractéristique d'un ferromagnétique

#### 2.4.2. Classification de transition des phases

En 1933 Ehrenfest a effectué une classification des transitions de phase comme les transitions de premier ordre, deuxième ordre et d'ordre plus élevée, par conséquent, elle a été établie sur la base de la continuité ou de la discontinuité dans les états des fonctions à température. En effet cette répartition est une étape essentielle dans la définition des principes généraux qui déterminent les impacts des transitions de phase au niveau des propriétés des matériaux [12]. Thermodynamiquement, On peut affirmer qu'il existe deux types de transitions de phase, les transitions avec chaleur latente d'une part, et les transitions sans chaleur latente d'autre part [14].

Par ailleurs, la mise en évidence et le traitement des transitions de phase nécessitent l'utilisation de la thermodynamique et de la physique statistique. Chaque état d'un système est défini en thermodynamique par une énergie spécifique. Lorsque l'état du système est défini par sa température  $T$  et sa pression  $P$  ou son volume  $V$ , cette énergie est appelée énergie libre. Une certaine partie de cette énergie est l'énergie  $E$  du système à température zéro, alors que l'autre partie dépend de la température et de l'entropie  $S$  du système, Si les variables indépendantes correspondent à la température et à la pression, tandis que la potentielle thermodynamique pertinente est l'énergie libre de Gibbs  $G$  [15] :

$$G = E - TS + PV \quad 1.7$$

Tandis que si les variables d'états sont la température  $T$  et le volume  $V$ , c'est l'énergie libre de Helmholtz

$$F = E - TS \quad 1.8$$

Les différentiels de ces énergies libres pour un système simple sont :

$$dG = -SdT + VdP \quad 1.9$$

$$dF = -SdT - PdV \quad 1.10$$

Dans le cas où le système a un moment magnétique, il y a un autre terme  $-MdH$ , dans les expressions susmentionnées, et si le nombre  $N$  de particules est variable, nous devons ajouter le terme  $\mu dN$  dans lequel  $\mu$  est le potentiel chimique. Ensuite, les premières dérivées de l'énergie libre nous donnent les valeurs des propriétés physiques du système telles que le volume spécifique

$$\frac{V}{N} = \left[ \frac{1}{N} \right] \frac{\partial G}{\partial P} \quad 1.11$$

L'Entropie :

$$S = - \frac{\partial G}{\partial T} \quad 1.12$$

Et le moment magnétique :

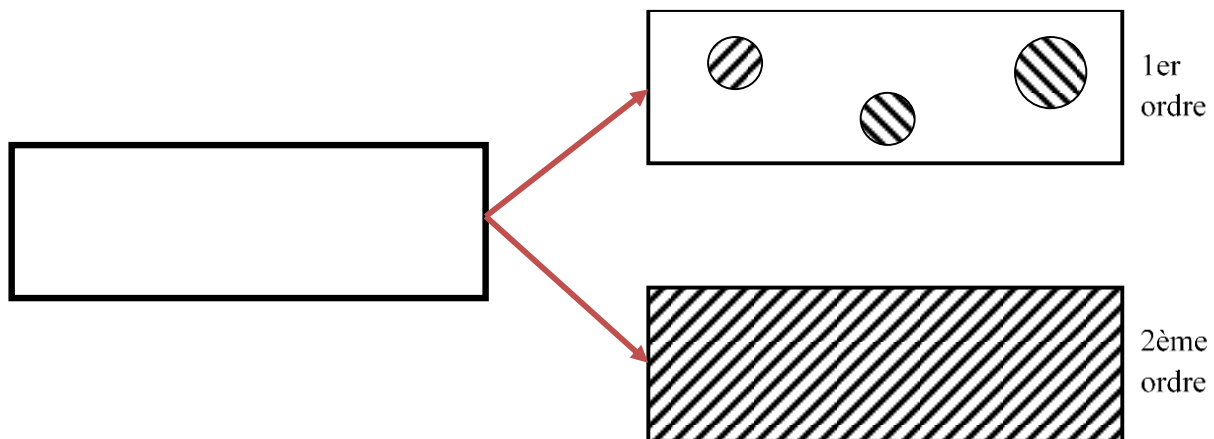
$$M = - \frac{\partial G}{\partial H} \quad 1.13$$

Alors que ses seconds dérivés partiels confèrent des propriétés telles que la chaleur spécifique :

$$C_P = T \frac{\partial S}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \quad 1.14$$

Ainsi que la compressibilité et la susceptibilité magnétique du système. Voyons ensuite l'effet sur l'énergie libre  $G$  de la variation d'un paramètre externe. Un changement de ce type ne peut pas introduire un changement soudain dans l'énergie du système, en raison de la conservation de l'énergie. Par conséquent, si l'on considère l'énergie libre par unité de volume,  $g$ , d'un système avec un nombre fixe de particules et écrire  $G = gV$ , l n'y a que deux possibilités. Soit le changement  $\delta G$  en  $G$  résulte d'une modification de la densité d'énergie libre  $g$ ,  $\delta G = V \delta g$

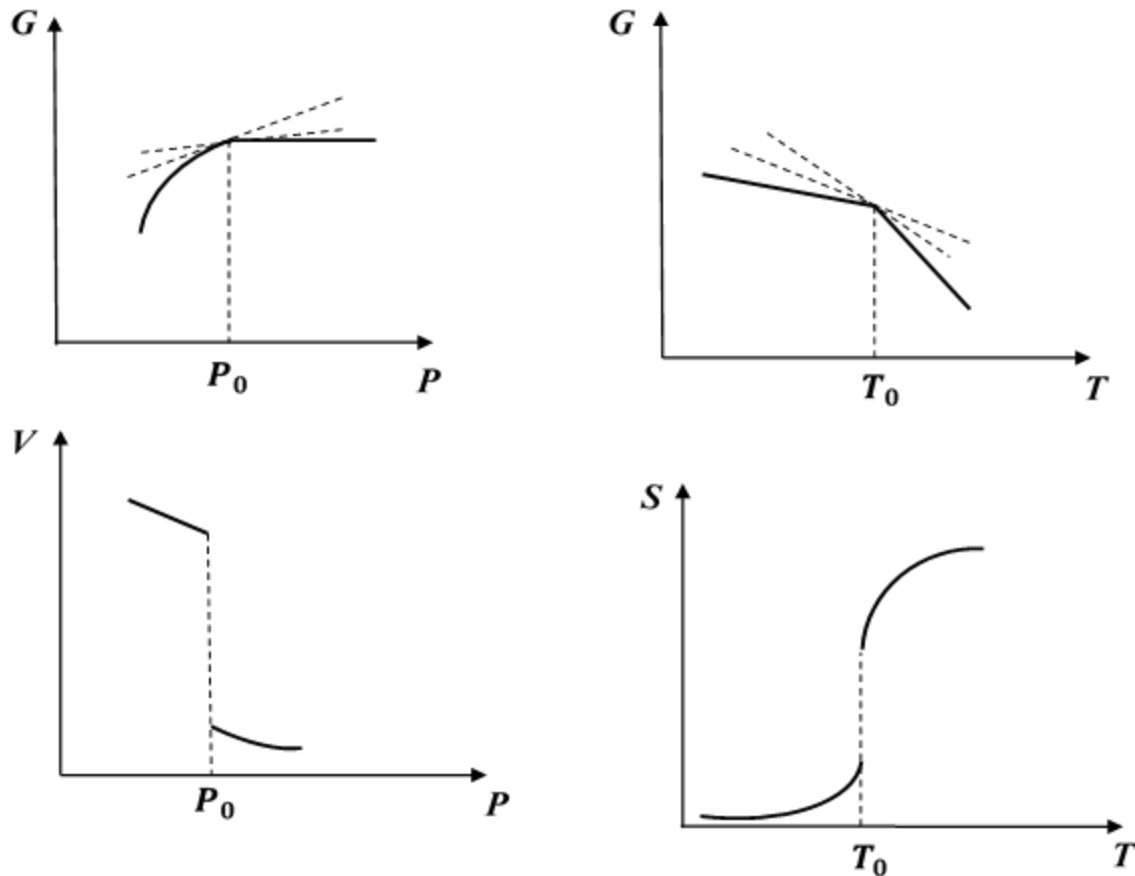
ou elle provient d'un changement dans le volume  $V$ ,  $\delta G = g\delta V$ . Quand les propriétés d'un système changent à la suite d'une transition de phase elles peuvent faire l'objet d'une petite modification  $\delta g$  dans tout le système à la fois ou initialement uniquement dans certaines parties  $\delta V$  de ce dernier. Comme illustré à la figure I.4. Quant à la nouvelle phase se présente sous la forme  $\delta G = g\delta V$  de sorte qu'elle n'apparaît que dans des parties  $\delta V$  du système, elle exige la formation de noyaux stables, à savoir de régions de la nouvelle phase assez grandes pour qu'elles puissent croître plutôt que de se contracter. Comme l'énergie consiste en un terme de volume négatif et une surface positive, laquelle, pour un noyau sphérique de rayon  $r$  sont proportionnels à  $r^3$  et  $r^2$  respectivement, la taille critique  $r_c$  est que pour lequel le volume est égal à la surface, de sorte que pour  $r > r_c$  la croissance du noyau conduit à une diminution de son énergie. En raison de la nécessité de nucléation, la première phase peut coexister avec la seconde dans un état métastable même au-delà de la température critique pour la transition de phase. Il s'agit d'une transition de phase de premier ordre. Les principales manifestations de cette transition sont la surchauffe et le refroidissement [15].



**Figure I.4 :** Deux possibilités de changement  $\delta G$  de l'énergie libre associées aux transitions de phase du 1er et du 2ème ordre.

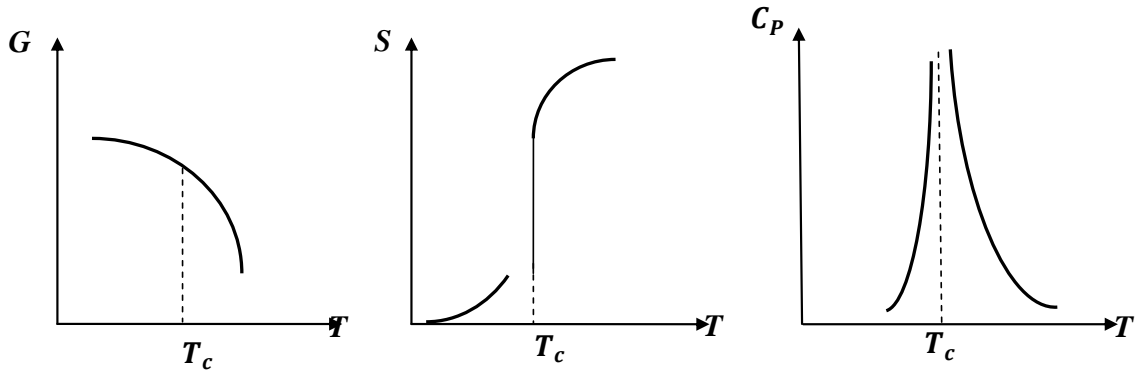
Dans l'autre cas, lorsque la transition de phase se produit de manière simultanée dans tout le système  $\delta G = V \delta g$ . Même si la différence  $\delta g$  entre les propriétés de ces phases est faible l'ancienne phase qui occupait tout le volume ne peut pas exister, même en état métastable de part et d'autre du point critique, et elle y est alors remplacée par une nouvelle phase. Ces deux phases sont associées à des symétries différentes. Par ailleurs, à l'état paramagnétique d'un système magnétique, il n'y a pas de direction préférentielle, alors qu'à l'état ferromagnétique, il

Il y a une direction préférentielle, celle du moment magnétique total. Dans ce cas, le point critique est le point final des deux phases, et il doit donc se produire un changement soudain c'est-à-dire une certaine discontinuité dans ses propriétés. Ceci est un exemple d'une transition de phase de second ordre [15].



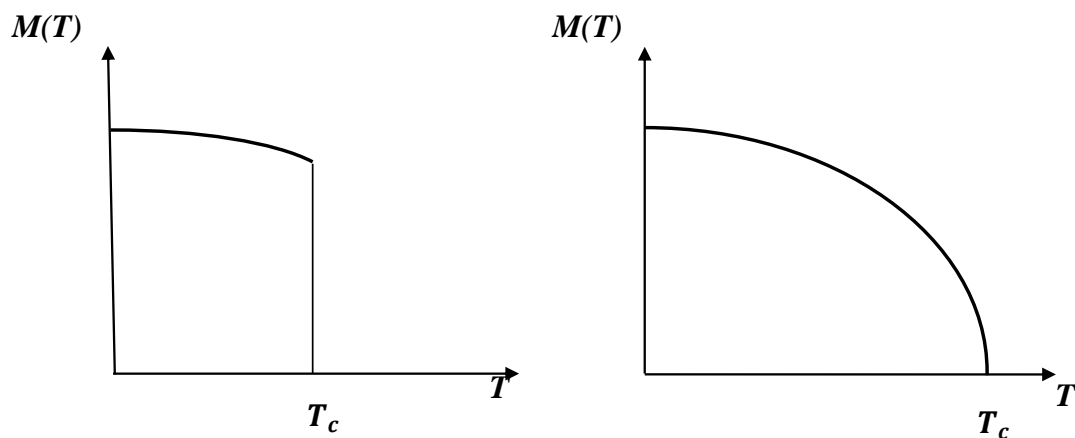
**Figure I.5 :** Transitions du premier ordre. Les potentiels comme  $G$  sont continus à la transition, mais les dérivées premières et les grandeurs associées ( $V$  et  $S$ ) sont discontinues





**Figure I.6 :** *Transitions du deuxième ordre : les dérivées premières de  $G$  sont continues, mais certaines dérivées secondes divergent :  $C_p$ , par exemple, tend vers l'infini.*

En effet, selon la classification de Landau, une transition de phase du premier ordre est réalisée par un saut du paramètre d'ordre (discontinuité), tandis que les transitions d'ordre supérieur (également appelées continues) correspondent à la discontinuité des dérivées des fonctions thermodynamiques. Dans ce dernier cas, elle peut être du second degré si la dérivée seconde est déconnectée, du troisième degré si c'est la dérivée du troisième ordre, etc. Ces transitions de phase ont été identifiées comme des transitions continues ou des phénomènes critiques. De surcroît, On dit que la symétrie de transition a été brisée : en dessous de la température de Curie, le matériau n'est invariable que par rotation autour d'un axe dirigé dans la direction de la magnétisation [16].



**Figure I.7 :** *transition de phase du 1<sup>er</sup> et 2<sup>ème</sup> ordre selon Landau*

### 2.4.3. Exposants critiques

Les points critiques se retrouvent dans une grande variété de systèmes. La valeur de la température  $T$  est fonction des détails des interactions atomiques ou moléculaires du système et donc varie largement d'un système à l'autre. Toutefois, il y a un degré considérable de similarité dans la façon dont les systèmes approchent un point critique : des variables macroscopiques comme la chaleur spécifique ou la susceptibilité magnétique divergent ou tendent vers zéro quand  $T \rightarrow T_c$ . Nous pouvons caractériser ce comportement par l'introduction d'exposants critiques. Nous pourrions représenter toute variable macroscopique par  $F(T)$  et introduire la température réduite  $\theta_c$  par [17] :

$$\theta_c = \frac{T - T_c}{T_c} \quad 1.15$$

On peut alors définir un exposant critique  $s$  pour  $\theta_c \approx 0$  c'est-à-dire  $T \approx T_c$  comme :

$$F(\theta_c) = A\theta_c^{-s} \quad 1.16$$

Pour laquelle  $A$  est une constante. Nous notons qu'il y a deux grands cas comme suit, qui dépendent uniquement du signe de l'exposant critique :

- L'exposant critique  $s$  est positif,  $F(\theta_c)$  diverge quand  $T \rightarrow T_c$
- L'exposant critique  $s$  est négatif,  $F(\theta_c) \rightarrow 0$  quand  $T \rightarrow T_c$

En effet, on peut s'attendre à ce que  $F$  se comporte analytiquement loin du point fixe. En ayant cela à l'esprit, nous pouvons l'écrire avec une plus grande portée de validité en tant que :

$$F(\theta_c) = A\theta_c^{-s}(1 + B\theta_c^y + \dots) \quad 1.17$$

Où  $y > 0$  pour le comportement analytique au sens large et  $B$  est une constante.

Plus précisément, les exposants critiques de  $F(\theta_c)$  sont définis comme suit :

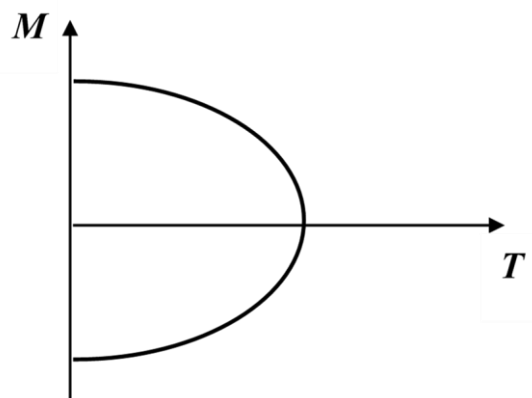
$$s = - \lim_{\theta_c \rightarrow 0} \frac{\ln F(\theta_c)}{\ln \theta_c} \quad 1.18$$

À partir du tableau d'accompagnement, nous pouvons montrer quelques relations liées à des exposants critiques dans les systèmes magnétiques [18] :

**Tableau I.2:** Définitions des exposants critiques les plus couramment utilisés pour un système magnétique

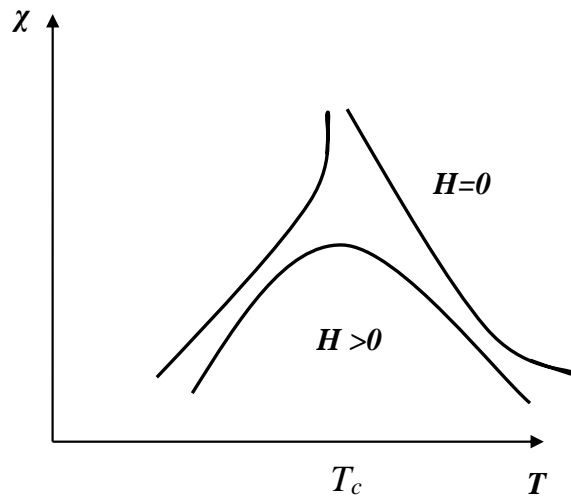
Chaleur spécifique à champ zéro	$C_H \sim  t ^{-\alpha}$
Aimantation sous champ nul	$M \sim (-t)^\beta$
Susceptibilité isotherme à champ nul	$\chi_T \sim  t ^{-\nu}$
Isotherme critique ( $t=0$ )	$H \sim  M ^\delta$
Longueur de la corrélation	$\xi \sim  t ^{-\nu}$
Fonction de corrélation des paires à $T_c$	$G(\vec{r}) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

Pour pouvoir vérifier que c'est une façon raisonnable de décrire le comportement des particularités dans les fonctions thermodynamiques considérées la magnétisation de champ zéro d'un ferromagnétique, comme le montre la figure suivante :

**Figure I.8 :** aimantation à champ nul d'un ferromagnétique. En dessous de la température critique, il existe une magnétisation spontanée.

Proche de  $T_c$ , une approximation raisonnable de la description de la courbe se fera par la formule précédemment mentionnée dans le tableau 2 pour une aimantation sous champ nul en raison de la ressemblance avec une parabole.

De même, pour la susceptibilité au champ zéro diverge à  $T_c$ . Comme le montre la figure I.9:



**Figure I.9 :** Dépendance de la susceptibilité à la température.

Bref, Les exposants critiques sont des grandeurs de base pour la caractérisation des phénomènes critiques ; ainsi qu'il y a des relations simples entre les exposants qui permettent de définir un exposant en fonction des valeurs des autres exposants. À titre d'exemple, la loi d'échelle de Rush Brooke :  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$  [19].

Finalement, il convient de citer à ce point l'idée d'universalité. Les exposants critiques sont dans une large mesure universelle, ne dépendant que de la symétrie de l'hamiltonien et de sa dimension, à condition que les forces interatomiques soient de courte portée [17].

#### 2.4.4. Universalité

Il a été constaté expérimentalement que l'on peut former une contrepartie à la table de Mendeleïev si l'on divise tous les systèmes critiques en « classes universelles ». Cadano a clairement introduit pour la première fois le concept de catégories universelles de comportement critique lors de l'université d'été Enrico Fermi en 1970 [20].

L'universalité des transitions de phases est peut-être le meilleur outil que nous avons pour appréhender les comportements critiques. Comme on l'a vu, les transitions de phase sont caractérisées par des exposants critiques. En fait, si nous nous intéressons qu'aux exposants critiques, nous pouvons observer que leur physique équivaut aux facteurs constants qui expliquent des détails microscopiques non significatifs. Par ailleurs, les transitions de phase, qu'elles soient classiques ou quantiques, peuvent être classées en une série des classes

d'universalité. Les systèmes en transition de phase qui font partie d'une même classe d'universalité se comportent de la même manière. Cela constitue un outil puissant pour la compréhension de la grande diversité des phases et des transitions entre elles [21].

Notamment ; dans la transition de phase ferromagnétique-paramagnétique, relève de la même classe d'universalité que la transition de phase liquide-gaz tandis qu'un modèle XY possède la même physique que celle de la transition superfluide-normale. Par conséquent, en examinant la transition de phase ferromagnétique d'Ising, on apprend sur la transition de la phase liquide à la phase gazeuse. Cela pour comprendre la classe d'universalité [21].

#### 2.4.5. Transition ferromagnétique-paramagnétique

Lorsqu'un matériau ferromagnétique est placé dans un champ magnétique  $B$ , une aimantation moyenne  $M$  est provoquée dans le matériau qui est proportionnelle à  $B$ . Ensuite, en prenant un axe de coordonnées le long de  $B$ , nous pouvons travailler avec les scalaires  $B$  et  $M$  (supposés être dans la même direction !) [17].

La relation entre le champ magnétique appliqué et l'aimantation résultante est déterminée par la susceptibilité isotherme, définie par la formule :

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial B} \right)_T \quad 1.19$$

Veillez noter qu'il existe un exemple de fonction de réponse. Pour un fluide, la fonction de réponse analogique serait la compressibilité isotherme.

Si un matériau magnétique se constitue de  $N$  spins sur un réseau et que chacun a un moment magnétique  $\mu_0$  correspond au spin  $S_i$  au site du réseau marqué par  $i$  en tenant compte de ses valeurs autorisées de  $S = \pm 1$ . Par conséquent, l'état instantané à un site du réseau est donné par [17] :

$$\mu = \pm \mu_0 \quad 1.20$$

On peut ainsi définir la magnétisation  $M$  :

$$M = N\bar{\mu} \quad 1.21$$

Où  $\bar{\mu}$  désigne la valeur moyenne du moment magnétique à un site du réseau.

Il est intéressant de prendre en compte deux cas extrêmes, comme suit :

- Si tous les spins sont orientés aléatoirement, alors  $\bar{\mu} = 0$  et donc  $M = 0$ , et donc il n'y a pas d'aimantation propre.
- Si tous les spins sont alignés, alors  $\bar{\mu} = \mu_0$  et donc l'aimantation finale est  $M_\infty = N\mu_0$ , qui est la plus grande valeur possible et est souvent appelée valeur de saturation [17].

#### 2.4.6. Transition conducteur-supraconducteur

On utilise de bons conducteurs comme le cuivre pour faire des fils électriques en raison de leur faible résistance aux courants électriques à température ambiante. Au fur et à mesure que la température est diminuée, la résistance électrique diminue progressivement, puisque les collisions entre les électrons et les vibrations du cristal métallique sont de plus en plus faibles. En 1911, Kammerling Onnes a constaté que la résistance électrique d'un échantillon de mercure diminuait soudainement jusqu'à zéro lorsque la température passait par  $T$  à zéro lorsque la température passe par  $T_c \approx 4,2 \text{ K}$  (0 K étant le zéro absolu de l'échelle de Kelvin). Ce passage d'un conducteur normal à un supraconducteur (résistance nulle) est une vraie transition de phase. Température à  $T_c$  suffit à changer la résistance de quatre ou cinq ordres de grandeur [22].

### 3. Théorie de Landau

Dans cette partie où nous considérons une transition de phase de deuxième ordre ; nous envisageons le cas où le paramètre d'ordre  $\Psi$  est un réel scalaire. Chacun des états microscopiques qui se concrétisent dans ce système a une certaine valeur pour ce  $\Psi$  ; chaque état microscopique est atteint avec une probabilité qui est donnée par la distribution canonique la valeur du paramètre d'ordre qui est réalisée à une température donnée est la valeur la plus probabiliste du paramètre d'ordre à cette température [23].

Pour calculer la distribution de probabilité du paramètre d'ordre, nous déterminons la densité des états  $\Omega(E, \Psi)$  pour une valeur donnée du paramètre d'ordre  $\Psi$ . À savoir :

$$\Omega(E, \Psi) dE d\Psi \tag{1.22}$$

Landau prévoyait qu'à proximité du point de transition de phase ; le paramètre d'ordre  $\Psi$  devrait être faible ; et que la  $F_L$  l'énergie libre de Landau pourrait donc être élargie en tant que série de puissance de  $\Psi$  ; Il ne faudrait pas que les termes qui contiennent des puissances impaires de  $\Psi$

car nous examinons un système dans lequel les états avec les paramètres d'ordre  $+\Psi$  et  $-\Psi$  sont également probables à haute température bien que cette symétrie soit spontanément brisée en dessous de  $T_c$ . [21] :

$$F_L(T, V, N, \Psi) = F_0(T, V, N) + a\Psi^2 + b\Psi^4 \dots \quad 1.23$$

La valeur certainement réalisée, du paramètre d'ordre à  $(T, V, N)$  est déterminée par le minimum de cette énergie libre. Comme  $\Psi$  est petit près du point de transition, on peut sans doute négliger les termes d'ordre supérieur à  $\Psi^4$  dans l'expansion qui définit en la formule de l'équation 1.23.

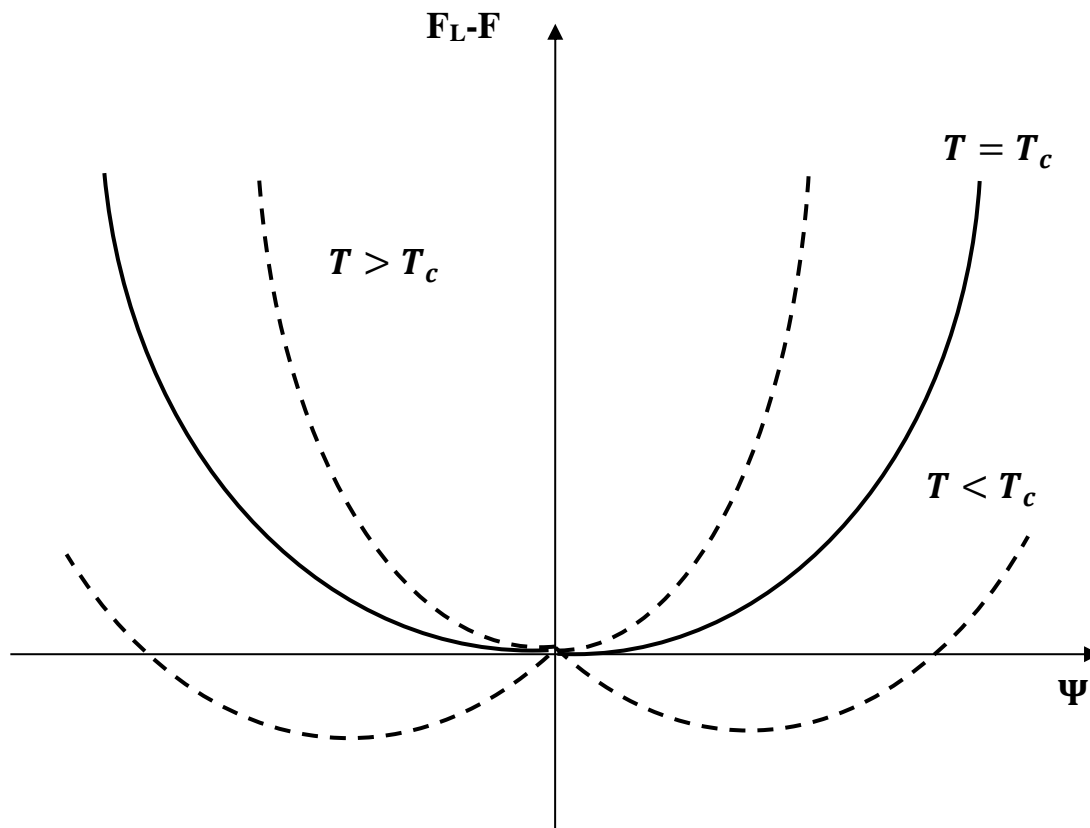
Cette énergie libre de Landau a un minimum à  $\Psi = 0$  si les coefficients  $a$  et  $b$  sont positifs. Par contre,  $a > 0$  et  $b > 0$  décrivent la phase au-dessus de la température critique. En outre, si  $a < 0$  et  $b > 0$ , les minimums se produisent à :

$$\Psi = \pm \sqrt{-\frac{a}{2b}} \quad 1.24$$

Par conséquent, cette situation désigne la phase ordonnée en dessous de la température critique, et un des deux seuls choix possibles du paramètre d'ordre est effectué. Il est évident de supposer que le coefficient  $a$  a la relation de dépendance  $T$  suivante à proximité de la température critique  $T_c$  :

$$a(t) = a_0(T - T_c) \quad 1.25$$

Le paramètre d'ordre  $a$  alors dépendance de la température :



**Figure I.10 :** Relation entre  $F_L(T, V, N, \Psi) - F_0(T, V, N)$  et  $\Psi$

#### 4. Introduction au magnétisme

Les effets magnétiques sont connus et utilisés depuis de longs siècles. Les premières expériences sur le magnétisme ont porté sur la magnétite, après sa propriété de pouvoir s'aligner dans certaines orientations si on lui permet de tourner librement, pouvant donc indiquer les positions de nord et sud, [24]. Dans le cadre de laquelle l'objectif était d'expliquer l'origine et les mécanismes fondamentaux du magnétisme : une recherche appliquée très active a été mise au point pour optimiser les performances des matériaux magnétiques pour les applications industrielles et de lui.

La recherche technologique se développe pour inclure de nouveaux concepts, de nouvelles applications ainsi que de nouvelles méthodes de travail ; par exemple, les simulations numériques sont de plus en plus utilisées pour optimiser les dispositifs ou les paramètres électriques et magnétiques, ainsi que les paramètres mécaniques et thermiques. [25].



En particulier, dans le secteur du stockage de données magnétiques, l'aimantation à fait l'objet d'une grande importance. Car l'entrée et la sortie des données impliquent la commutation de l'aimantation des cellules de stockage magnétique qui sont des éléments importants des ordinateurs modernes en comptant sur le sujet de dynamique de spin dans l'espace de magnétisme. De la sorte, l'aimantation rapide La transition est d'une grande importance pour le développement futur de l'industrie de l'information à haut débit [26].

## 5. Caractéristiques magnétiques

### 5.1. Aimantation et susceptibilité

L'aimantation d'un matériau en général dépend du champ magnétique qui agit sur lui. Pour de nombreux matériaux,  $M$  est proportionnel à  $H$  (au moins lorsque  $H$  n'est pas trop grand) et on peut écrire [24] :

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \quad 1.25$$

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

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad 1.26$$

Où  $\mu$  est une constante de proportionnalité appelée *perméabilité magnétique*. L'unité d'induction magnétique est le *tesla* (T). Le champ magnétique  $H$ , qui est en général créé par la circulation d'un courant électrique dans un solénoïde, s'exprime en ampère par mètre ( $A m^{-1}$ ) et la perméabilité magnétique en henry par mètre ( $H m^{-1}$ ) [27].

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

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) \quad 1.27$$

Où  $\mu_0$  est la perméabilité magnétique du vide ( $\mu_0 = 4 \pi 10^{-7} H m^{-1}$ ).

Où, la susceptibilité magnétique, est une propriété du matériau. Comme  $M$  et  $H$  ont les mêmes dimensions,  $\chi$  est sans dimension. Nous pouvons associer l'équation (1.25) avec l'équation (1.27), pour obtenir [24] :

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} (1 + \chi) \quad 1.28$$

Ainsi,  $1 + \chi$  exprime la proportionnalité de la catégorie  $H$ . Nous déterminons :

$$\mu = 1 + \chi \quad 1.29$$

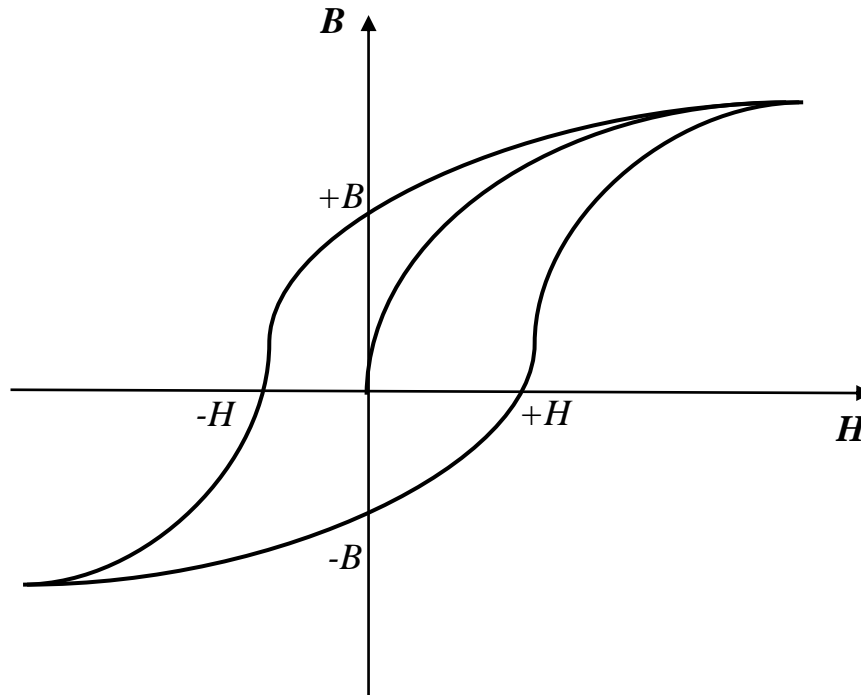
Dans laquelle  $\mu$  est la perméabilité magnétique. Les équations (1.26) et (1.27) indiquent que

$$\mathbf{B} = \mu\mu_0\mathbf{H} \quad 1.30$$

On peut utiliser soit  $\mu$  soit  $\chi$  pour caractériser un matériau, de leur côté, les ingénieurs sont généralement intéressés par les matériaux ayant de grandes valeurs de  $\chi$  et de  $\mu$ . Pour les ingénieurs, il est plus intéressant de connaître l'induction magnétique produite par un matériau que sa magnétisation. Les matériaux présentant un intérêt pratique sont donc généralement marqués par leur perméabilité [24].

### 5.2. Boucle d'hystérésis

Pris en considération hystérésis définir comme un certain nombre de propriétés magnétiques du matériau. Nous avons vu que la réduction du champ à zéro ne réduit pas l'aimantation d'un ferromagnétique à zéro. En fait, les ferromagnétiques et les ferrimagnétiques continuent à avoir un fonctionnement intéressant lorsque le champ est réduit à zéro et qu'il est inversé dans sa direction. Le diagramme de  $B$  (ou l'aimantation  $M$ ) en fonction de  $H$  qui est tracé et appelé une boucle d'hystérésis. La figure suivante montre le schéma d'une boucle d'hystérésis générique - cette fois-ci, nous avons tracé  $B$  en fonction de  $H$ . Bien que, la pertinence des matériaux ferrimagnétiques et ferromagnétiques pour des utilisations spécifiques est déterminée en majeure partie par les caractéristiques de leurs boucles d'hystérésis [28].



**Figure I.11** : Boucle d'hystérésis pour un Ferro- ou ferrimagnétique.

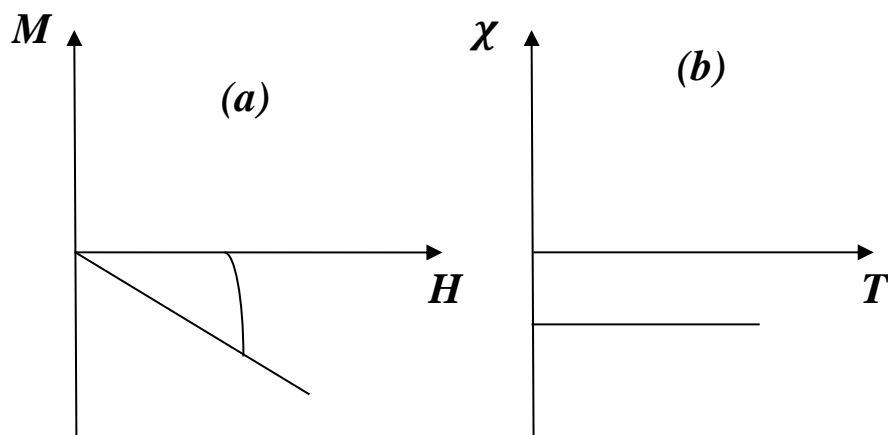
## 6. Classifications du magnétisme

Le contenu magnétique des matières solides est en principe associé à l'orientation des dipôles magnétiques. Chacun de ces dipôles, ou moments magnétiques, est composé de spins électroniques, d'orbites électroniques et de moments magnétiques nucléaires. De même, dans les composés magnétiques des métaux de transition, le moment orbital est toujours éteint, de sorte que le moment réel est fourni principalement par le spin électronique. Le magnétisme dans les solides, selon sa magnitude et son signe, comporte généralement cinq types : Le diamagnétisme, le paramagnétisme, le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme [29].

### 6.1. Diamagnétisme

Les effets d'un champ magnétique exercé sur le déplacement des électrons dans toutes les formes de matière produisent du diamagnétisme ; en d'autres termes, la susceptibilité totale est toujours négative, de même que la susceptibilité diamagnétique dépend du contenu en électrons d'un atome et des régions des orbites occupées [30], c'est-à-dire la théorie estime que l'effet d'un champ appliqué sur une orbite d'un seul électron est de réduire le courant effectif de l'orbite, et ainsi de produire un moment magnétique opposé au champ appliqué. Cet effet est additionné sur tous les électrons de l'atome, et chaque atome est réputé agir indépendamment des autres.

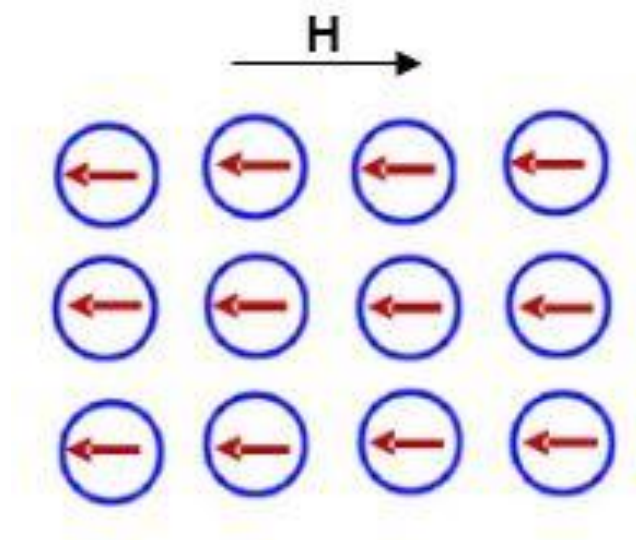
Les valeurs de la susceptibilité diamagnétique ainsi calculées sont généralement en accord avec les valeurs expérimentales à un facteur supérieur à 10 [31]. Et aussi la susceptibilité, pratiquement indépendante du champ et de la température et qui est généralement de l'ordre de  $10^{-5}$  comme le montre la courbe I.12 [32], ce qui indique que le modèle est au moins qualitativement correct. Aucun élément du modèle ne semble indiquer une forte dépendance de la susceptibilité à la température, ce qui est également en accord avec l'expérience [31]. C'est ce que la substance diamagnétique lorsqu'elle est placée dans un champ magnétique externe, est faiblement magnétisée dans une direction opposée au champ magnétique.



**Figure I.12:** (a) Dépendance sur le champ de l'aimantation et variation thermique de la susceptibilité magnétique ; (b) pour des substances diamagnétique

**Tableau I.3:** Susceptibilité dans le diamagnétisme de quelque composante.

Matière	Susceptibilité
Si	$- 1,2 * 10^{-6}$
Cu	$- 1,08 * 10^{-6}$
Zn	$- 1,9 * 10^{-6}$
Ge	$- 1,5 * 10^{-6}$



**Figure I.13 :** Alignement des électrons à l'opposé du champ magnétique ( $H$ )

### 6.2. Paramagnétisme

De nombreux éléments solides, notamment  $Na$ ,  $Al$ ,  $V$ ,  $Pd$ , ont un paramagnétisme. Dans la figure suivante ; les moments magnétiques sont dirigés de manière aléatoire. Sous l'application d'un champ appliqué  $H$ , le nombre de moments augmente dans le sens  $+H$  mais diminue dans le sens  $-H$ . Ce conduit à une petite aimantation  $M$ , qui dépend linéairement du champ appliqué ; de plus, une fois le champ appliqué supprimé, l'aimantation disparaît instantanément. Il est facile de montrer que la relation entre la susceptibilité et la température est  $\chi \propto T^{-1}$  [29]. Néanmoins, une certaine connaissance de leurs propriétés est nécessaire car elle nous aidera à discuter du ferromagnétisme [24]. Par ailleurs ; en appliquant un champ magnétique, la direction moyenne des mouvements est modifiée et une aimantation induite est parallèle au champ. Cette aimantation est inférieure à la hauteur, la susceptibilité au champ est positive, devient infinie à 0, cette susceptibilité est généralement de l'ordre  $10^{-3}$  à  $10^{-5}$  à température ambiante [34].

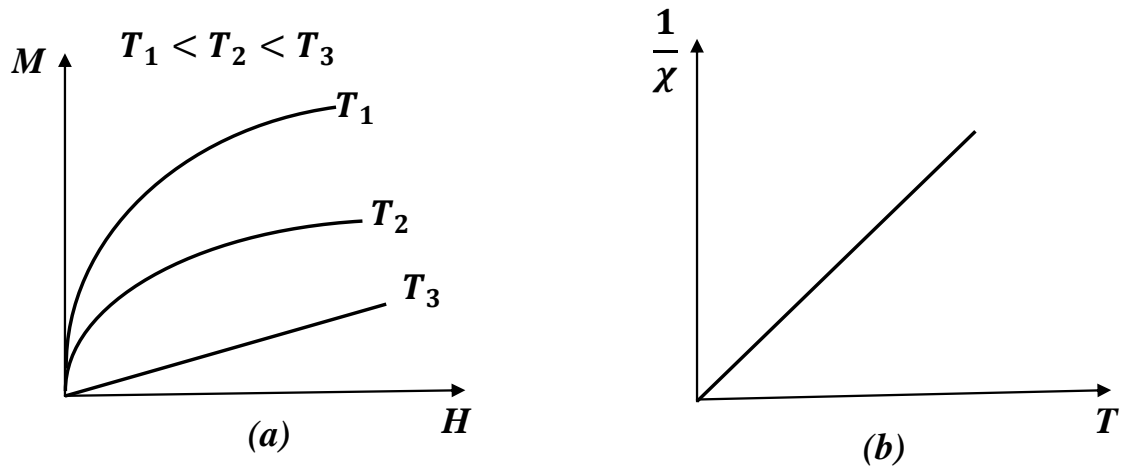


Figure I.14 : comportement paramagnétique présente (a) : la magnétisation en fonction de champ magnétique. (b) : Inverse de susceptibilité en fonction de la température.

Tableau I.4 : susceptibilité dans le cas paramagnétisme pour quelque composante

Matière	Susceptibilité
Na	$8,6 * 10^{-6}$
Al	$7,7 * 10^{-6}$
Mn	$1,2 * 10^{-4}$
Ta	$1,1 * 10^{-4}$

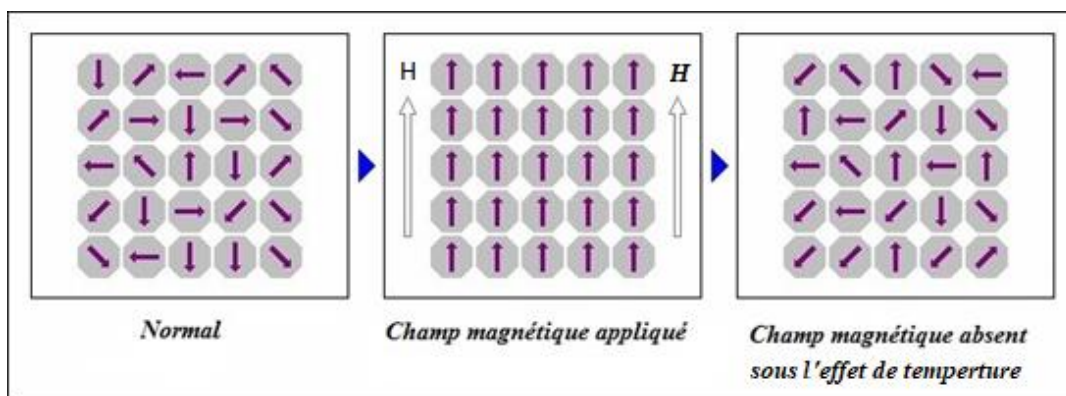
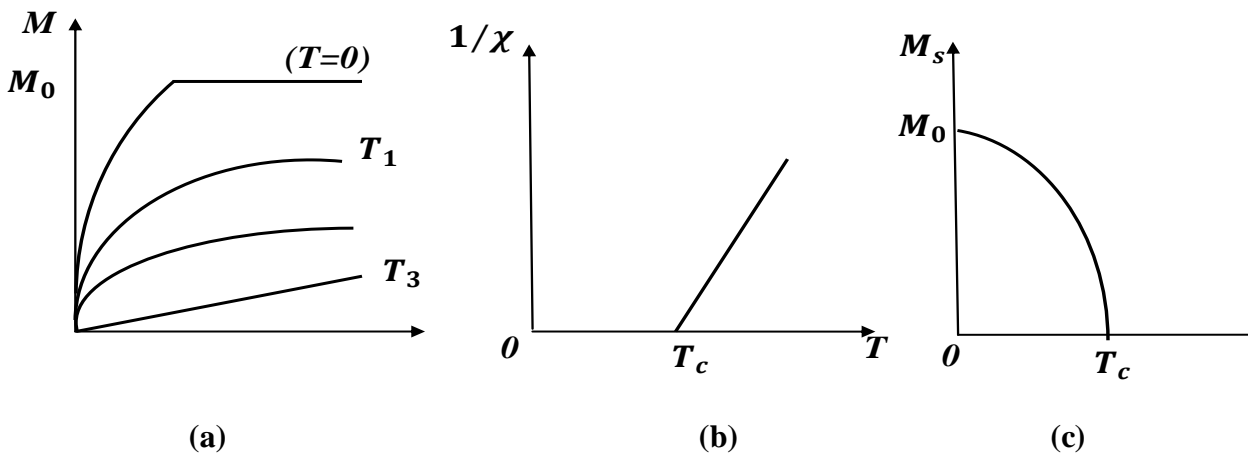


Figure I.15: Les matériaux paramagnétiques.

### 6.3. Ferromagnétisme

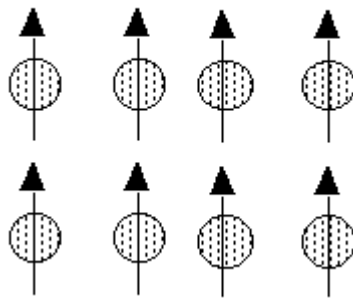
Les matériaux ferromagnétiques se distinguent par un classement à long terme de leurs moments atomiques, même en l'absence d'un champ extérieur. Spontanément, on observe que l'aimantation à longue distance d'un ferromagnétique disparaît au-dessus d'un en ordonnant la température appelée température de Curie  $T_C$  [35]. En contrepartie ; les interactions d'échange dites positives favorisent, dans les substances ferromagnétiques, un arrangement parallèle des moments magnétiques dans les atomes voisins (fig. I.16-a). L'effet est alors le même que celui d'un champ magnétique, dit champ moléculaire ou d'échange, qui alignerait les moments [36]. Les substances ferromagnétiques classiques sont *Fe*, *Co*, *Ni*. Comme le montre la figure 13. La relation entre la susceptibilité et la température satisfait à la loi de Curie-Weiss  $\chi \propto \frac{1}{(T-T_C)}$  [29].



**Figure I.16 :** a) Dépendance du champ de magnétisation ( $T_1 < T_C < T_2 < T_3$ ), b) Dépendance de la température de  $1/\chi$ , c) Dépendance de la température de la magnétisation spontanée.

**Tableau I.5 :** Propriétés de quelques ferromagnétiques ordinaires [37].

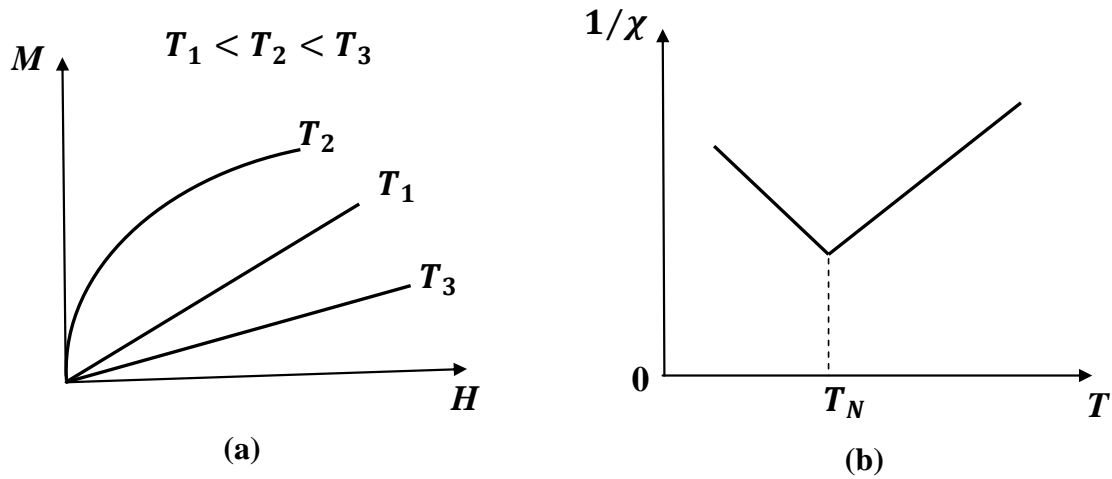
Matériau	$T_C(K)$	Moment magnétique $\mu_B$
<i>Fe</i>	1043	2.22
<i>Co</i>	1394	1.715
<i>Ni</i>	631	0.605
<i>Gd</i>	289	7.5
<i>MnSb</i>	587	3.5
<i>EuO</i>	10	6.9
<i>EuS</i>	16.5	6.9

**Figure I.17 :** Matériaux ferromagnétiques montrent un alignement parallèle des moments.

#### 6.4. Antiferromagnétisme

Les matériaux antiferromagnétiques typiques sont le *Cr* et le *Mn*, ainsi que des oxydes comme le *MnO*, le *CrO*, le *CoO* [29]. À la base, on considérait les matériaux antiferromagnétiques comme une classe de paramagnétiques irréguliers, car ils possèdent de petites susceptibilités positives d'une magnitude semblable à celle de nombreux matériaux de cette dernière classe [36]. Au-dessus d'une température critique de la température de Néel, les spins se répartissent de manière aléatoire et adoptent un comportement paramagnétique une partie des spins est antiparallèle à l'autre partie l'aimantation qui en résulte est donc nulle. Au-dessus de  $T_N$ .

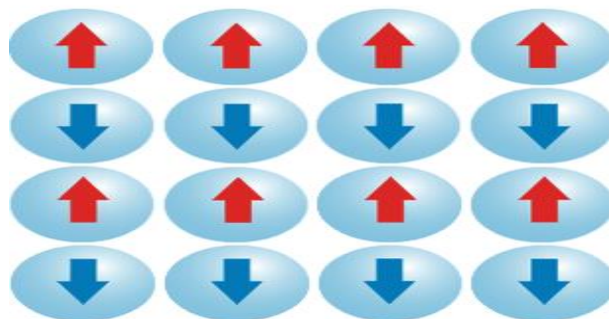




**Figure I.18 :** a) dépendance d'aimantation en fonction de champ magnétique b) inverse de susceptibilité en fonction de température

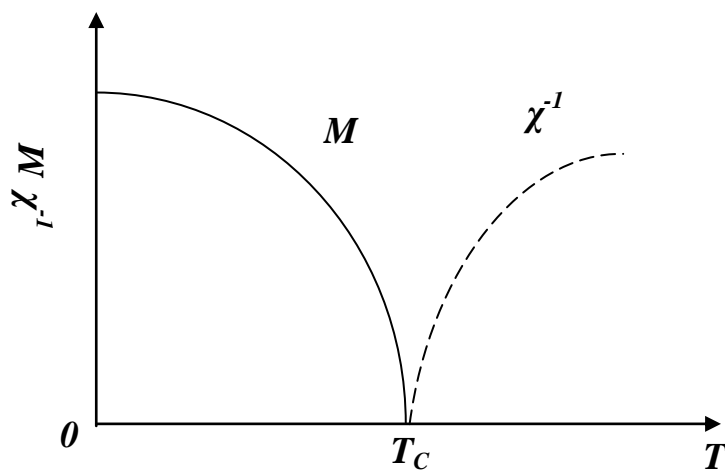
**Tableau I.6 :** Propriétés de quelques antiferromagnétiques usuels.

Matériau	$T_N$ (K)	$\Theta$ (K)	$J$
$MnF_2$	67	-80	5/2
$MnO$	116	-510	5/2
$CoO$	292	-330	3/2
$FeO$	116	-610	2
$Cr_2O_3$	307	-485	3/2
$\alpha\text{-Fe}_2O_3$	950	-2000	5/2

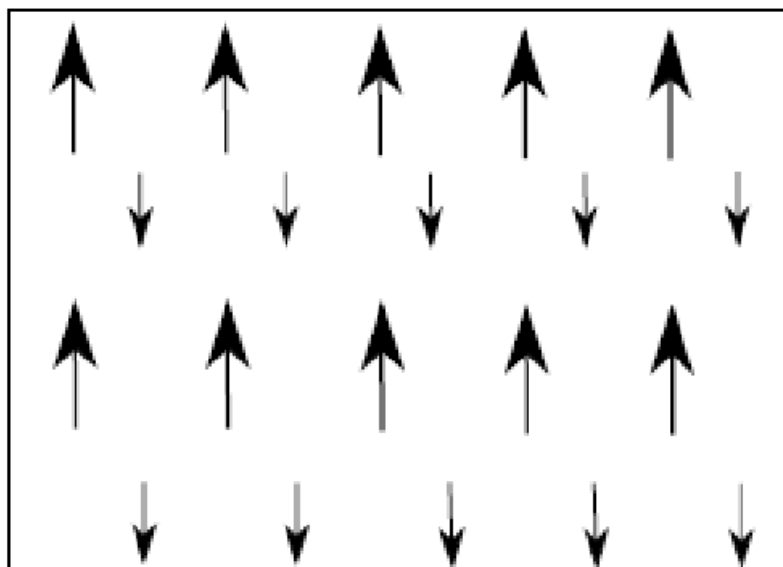


**Figure I.19 :** Arrangement antiferromagnétique des spins atomiques.

Dans les substances ferrimagnétiques les spins sont alignés de manière aléatoire et c'est au-dessus de  $T_C$  mais en dessous de  $T_C$ , ils sont organisés de manière antiparallèle. Mais il est différent d'un antiferromagnétique, les moments magnétiques ne sont pas égaux sur les différents sous-réseaux. Ce type de phénomène est comparable à celui d'un ferromagnétique, mais les ferromagnétiques sont généralement des métaux et les ferrimagnétiques des non-métaux. Cependant une autre distinction importante par rapport aux ferromagnétiques est que, pour la majeure partie des ferrimagnétiques, leur relation susceptibilité-température ne suit pas la loi de Curie-Weiss dans une large gamme de température au-dessus de  $T_C$  [37].



**Figure I.20 :** Deux grandeurs présente le comportement ferrimagnétique.



**Figure I.21 :** comportement ferrimagnétique.

**Tableau I.8 :** Propriétés de certains ferrimagnétiques habituels.

Matériau	$T_N(K)$	Moment magnétique $\mu_B$
$Fe_3O_4$	858	4.1
$CoFe_2O_4$	793	3.7
$NiFe_2O_4$	858	2.3
$CuFe_2O_4$	728	1.3
$Y_3Fe_5O_{12}$	560	5.0
$Gd_3Fe_5O_{12}$	564	16.0
$Dy_3Fe_5O_{12}$	563	18.2
$Ho_3Fe_5O_{12}$	567	15.2

**Conclusion :**

Plus fondamentalement, il a fallu dans un premier temps définir la notion même d'autorité d'une transition de phase, examiner les caractéristiques inhérentes à cette dernière et ne retenir que les plus pertinentes. Dans ce domaine, nous avons abordé la connaissance des caractéristiques de base qui nous expliquent la transition de phase en mécanique statistique et théorique, où nous nous sommes montrés avec le principe de ce module, et nous avons compris la relation entre la transition de phase et les phénomènes critiques. Afin de le comprendre, nous avons donné quelques exemples liés à la transition. Dans la deuxième étape, nous avons disposé les matériaux magnétiques. Bien entendu, nous avons fourni quelques matériaux à titre d'exemple. Sous prétexte que le phénomène des transitions de phase est un peu compliqué, nous pouvons examiner quelques modèles de cette branche de la physique qui relèvent du modèle de base du magnétisme. C'est pourquoi nous illustrons ces modèles dans le chapitre suivant.

## Références

- [1] De Paul D. Beale, *Statistical Mechanics*, Butterworth-Heinemann, 12 sept. 1996 - 576 pages
- [2] TOLMAN, Richard Chace. *The principles of statistical mechanics*. Courier Corporation, 1979.
- [3] VAUCLAIR, Sylvie. *Eléments de physique statistique*. 1993.
- [4] YEOMANS, Julia M. *Statistical mechanics of phase transitions*. Clarendon Press, 1992.
- [5] PATHRIA, R. K. et BEALE, Paul D. *Statistical Mechanics*. 2011. ISBN, vol. 123821894, p. 744.
- [6] FULTZ, Brent. *Phase transitions in materials*. Cambridge University Press, 2020.
- [7] NISHIMORI, Hidetoshi ET ORTIZ, Gerardo. *Elements of phase transitions and critical phenomena*. OUP Oxford, 2010.
- [8] PAPON, P., LEBLOND, J., ET MEIJER, P. H. E. *The Physics of Phase Transitions: Concepts and Applications*, 2006.
- [9] SALINAS, Silvio. *Introduction to statistical physics*. Springer Science & Business Media, 2001.
- [10] J. M. Thijssen, *Computational Physics*, page 162, 1999.
- [11] VOGEL, Manuel. *Introduction to Statistical Physics*, by Kerson Huang: Scope: textbook. Level: undergraduate students. 2010.
- [12] ROOS, Yrjo H. et DRUSCH, Stephan. *Phase transitions in foods*. Academic Press, 2015.
- [13] CHRISTE, Philippe et HENKEL, Malte. *Introduction to conformal invariance and its applications to critical phenomena*. Springer Science & Business Media, 2008.
- [14] PAPON, Pierre, LEBLOND, Jacques, et MEIJER, Paul HE. *Physique des transitions de phases : Concepts et applications*. Paris: Dunod, 1999.
- [15] GITTERMAN, Moshe ET HALPERN, Vivian Haim. *Phase Transitions: A brief account with modern applications*. World Scientific Publishing Company, 2004.
- [16] NGÔ, Christian et NGÔ, Hélène. *Physique statistique-3ème édition*. Dunod, 2008.
- [17] MCCOMB, W. David. *Study notes for Statistical Physics: A concise, unified overview of the subject-eBooks and textbooks from bookboon.com*. 2015.
- [18] YEOMANS, Julia M. *Statistical mechanics of phase transitions*. Clarendon Press, 1992.
- [19] NISHIMORI, Hidetoshi et ORTIZ, Gerardo. *Elements of phase transitions and critical phenomena*. OUP Oxford, 2010.
- [20] STANLEY, H. Eugene. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of modern physics*, 1999, vol. 71, no 2, p. S358.

- [21] PUEBLA, Ricardo. *Equilibrium and Nonequilibrium Aspects of Phase Transitions in Quantum Physics*. Springer, 2018.
- [22] MARTIN, Olivier C., MONASSON, Rémi, et ZECCHINA, Riccardo. Statistical mechanics methods and phase transitions in optimization problems. *Theoretical computer science*, 2001, vol. 265, no 1-2, p. 3-67.
- [23] YOSHIOKA, Daijiro. *Statistical physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [24] MORGAN, Gerry H. Magnetism and magnetic materials, JP Jakubovics (The Institute of Materials, London, 1994), 165 pages, (softback)(available from the Ashgate Publishing Company, Brookfield, VT). *Materials Characterization*, 1995, vol. 4, no 34, p. 287-288.
- [25] DU TRÉMOLET DE LACHEISSERIE, Etienne, GIGNOUX, D., SCHLENKER, Michel, *et al.* Magnetism/edited by Etienne du Trémolet de Lacheisserie, Damien Gignoux, Michel Schlenker. 2003.
- [26] LIU, J. Ping, FULLERTON, Eric, GUTFLEISCH, Oliver, *et al.* (ed.). *Nanoscale magnetic materials and applications*. Springer Science+ Business Media, LLC, 2009.
- [27] Mercier, Jean P., Gérald Zambelli, and Wilfried Kurz. *Introduction à la science des matériaux*. Vol. 1. PPUR presses polytechniques, 1999.
- [28] SPALDIN, Nicola A. *Magnetic materials: fundamentals and applications*. Cambridge university press, 2010.
- [29] FENG, Duan et JIN, Guojun. *Introduction To Condensed Matter Physics, Volume 1*. World Scientific Publishing Company, 2005.
- [30] MEYERS, H. P. et MYERS, H. P. *Introductory solid state physics*. CRC press, 1997.
- [31] CULLITY, Bernard Dennis et GRAHAM, Chad D. *Introduction to magnetic materials*. John Wiley & Sons, 2011.
- [32] DE LACHEISSERIE, Etienne du Tremolet, GIGNOUX, Damien, et SCHLENKER, Michel (ed.). *Magnetism*. Springer Science & Business Media, 2005.
- [33] LACHEISSERIE, EdTd, GIGNOUX, Damien, et SCHLENKER, Michel. *Magnetism: fundamentals*. 2005.
- [34] O'HANDLEY, Robert C. *Modern magnetic materials: principles and applications*. Wiley, 2000.
- [35] DE LACHEISSERIE, Etienne du Tremolet, GIGNOUX, Damien, et SCHLENKER, Michel (ed.). *Magnetism*. Springer Science & Business Media, 2005.
- [36] BLUNDELL, Stephen. *Magnetism in condensed matter*. 2003.

# C hapitre II

Les modèles de spins et  
la méthode de  
simulation

## 1. Généralité

La description théorique des transitions de phase est très compliquée. Seuls quelques modèles peuvent être traités dans le cadre de la mécanique statistique. L'un de ces modèles est celui de Lenz (1920) et a été traité en détail plus tard par son élève Ising (1925). Et est un de ces modèles simples de thermodynamique statistique qui jouent un rôle fondamental dans notre connaissance des transitions de phase et des phénomènes critique sa permis de développer des méthodes de mécanique statistique dans le domaine de la physique des transitions de phase [1].

Maintenant, nous présentons l'idée de manière plus structurée. Nous utilisons notamment le terme "Hamiltonien", bien que nous entendions toujours par-là l'énergie. Rappelons que pour les systèmes quantiques, l'hamiltonien est un opérateur et l'énergie est sa valeur propre .Nous pouvons établir les modèles théoriques qui devraient l'être :

- a) Physiquement représentant le système à un certain degré raisonnable d'approximation
- b) Soluble

En général, (b) est incompatible avec (a) et la tentative de conciliation des deux implique généralement une forme de théorie de la perturbation. Concrètement, on sacrifie un certain degré de "justesse physique" pour pouvoir résoudre le modèle. Invariablement, par "résoudre", nous entendons que nous pouvons obtenir une bonne approximation de la fonction de partition [2].

## 2. Notion de spin

Il est évident, d'après la physique atomique, que dans chaque couche de l'atome, les électrons sont spécifiés en fonction de leur moment angulaire orbital. De sorte que en se déplaçant, chaque électron emporte avec lui un demi quantum de l'appelé spin ou moment angulaire intrinsèque ainsi qu'un moment magnétique associé. Bien que est un nouvel degré de liberté caractériser la plupart des particules mécaniques quantiques, il apparaît que le spin doit être pensé comme un moment angulaire intrinsèque d'une particule. De surcroît, le spin est dissocié de tous les autres degrés de liberté d'une particule, de manière à ce que l'opérateur de spin commute avec toutes les autres quantités dynamiques [3]. Il ne possède que deux directions par rapport à une orientation déterminée, parallèle ou antiparallèle [4]. En ce qui nous concerne ; le comportement des spins dans différentes structures de réseau a constitué des phénomènes magnétiques. De surcroît, les caractéristiques des matériaux magnétiques et leurs applications

technologiques comme les supports d'enregistrement thermomagnétiques, les systèmes microélectromécaniques [5] ; sont caractérisées par le phénomène des spins mixtes qui sont bien définis dans l'approche des modèles d'Ising [6].

### 3. Introduction sur le modèle d'Ising

Après avoir vu la phénoménologie des transitions de phase dans le premier chapitre ; nous présentons maintenant le modèle d'Ising. Il s'agit du modèle statistique le plus simple qui présente une transition de phase. La nécessité d'étudier ce modèle vient de deux raisons différentes. La première est la simplification de la nature des spins afin d'obtenir un système assez simple pour être résolu exactement tandis que la deuxième raison concerne la définition d'un modèle suffisamment réaliste pour être comparé aux autres modèles. Cependant Depuis 1920, date à laquelle il a été introduit par Wilhelm Lenz, un grand nombre de scientifiques ont contribué à élucider les propriétés mathématiques du modèle d'Ising. Les premières découvertes théoriques sont dues à Ernst Ising, un étudiant en doctorat de Lenz à l'université de Hambourg, qui a présenté en 1925 un court article fondé sur ses études de doctorat dans lequel il montrait l'absence de transition de phase dans le cas unidimensionnel. Depuis lors, le modèle est désigné dans la littérature comme le modèle d'Ising [7].

Toutefois, en présentant leur modèle, Lenz et Ising avaient pour but de restituer les propriétés des solides paramagnétiques et ferromagnétiques en appliquant la mécanique statistique aux micro magnétiques [8].

On part du principe que le système physique peut être décrit comme un réseau de molécules régulier dans l'espace. Dans ce contexte, trois types de systèmes physiques nous intéressent :

- 1- Les magnétiques, dans lesquels chacune des particules possède un "spin" qui peut être orienté vers le haut ou vers le bas par rapport à l'autre par rapport à la direction d'un champ extérieur.
- 2- Les combinaisons de deux types de molécules.
- 3- Les compositions de molécules et de vides

Si on dit simplement que chaque nœud d'une structure ordinaire est un élément de la structure ; chaque nœud d'un réseau d'espaces régulier est associé à une variable à deux valeurs. Selon que variable a la valeur  $+1$  ou  $-1$ . Habituellement, la variable à deux valeurs est désignée par le spin  $\sigma_i$  qui est associé au nœud  $i$  du réseau, une configuration du réseau est un ensemble particulier de valeurs de tous les spins, si on compte  $N$  nœuds, il y aura  $2^N$  configurations



distinctes ; Nous présumons que les forces exercées par les molécules les unes sur les autres sont de courte durée; en fait, nous admettons que l'énergie d'interaction ne dépend que de la configuration des molécules ; dans les trois types de systèmes physiques mentionnés précédemment, une interaction de ce type peut entraîner conduire à une magnétisation spontanée, avec tous les spins dans la même direction même en l'absence d'un champ externe( $I$ ), et pour le deuxième type nous disons que la scission de phase, les molécules de même type se rassemblant[9].

En corollaire, ce modèle a perdu de son intérêt, alors que d'autres pistes de recherche étaient ouvertes, comme le modèle entièrement mécanique quantique d'Heisenberg et les théories des électrons itinérants de Bloch. Car il était généralement admis que le modèle semi-classique de Lenz était incapable de rendre compte des lois connues du ferromagnétisme, y compris la transition de phase à la température de Curie [10].

Nous créons alors ce que l'on a appelé l'hamiltonien du système ; Dans le domaine de la physique mathématique, le Hamiltonien est l'énergie totale d'un système, et il détermine la dynamique. Pour le modèle d'Ising, l'hamiltonien est défini après avoir fait une hypothèse idéale et apparemment très sévère : nous présumons que seulement les interactions à courte portée, les interactions "plus proches du voisin" et les interactions des sites du réseau avec un "champ extérieur" contribuent au niveau d'énergie du système, pour chaque configuration  $\sigma = \sigma_1 \dots \sigma_N$ , nous disposons de :

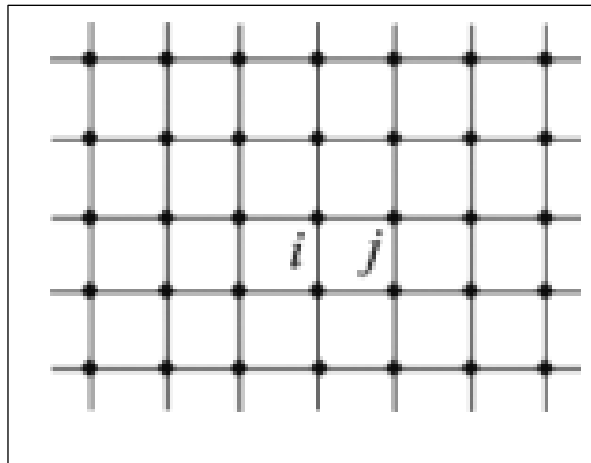
$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j - \sum_i H \sigma_i \quad 2.1$$

La suggestion est faite en prenant en compte les spins  $\sigma_i$  comme des quantités scalaires de valeurs  $\pm 1$  ou des quantités vectorielles

Où la première somme est sur toutes les paires de voisins les plus proches dans le réseau et la seconde présente tous les sites du réseau, en plus que les paramètres  $J$  et  $H$  sont respectivement les "énergies" associées aux interactions entre voisins les plus proches et aux interactions avec le champ externe dans le cas d'un ferromagnétique,  $E$  est positif, de sorte qu'une configuration "magnétisée" sachant que la majorité des paires de plus proches voisins ayant des moments parallèles,  $\sigma_i = \sigma_j$  à un niveau d'énergie plus faible qu'une configuration non magnétisée. Ensuite le caractère  $J$  traduit la présence d'un « champ magnétique externe » qui tend à orienter les moments magnétiques dans la direction du champ cependant que l'agitation thermique

aléatoire réduit à néant une grande partie de l'effet du champ magnétique. Détruit une grande partie de l'effet du champ [11].

On donne l'exemple sur la figure suivante qui représente ce modèle qui montre une paire de spins voisins est illustrée sur le réseau carré. Le coefficient  $J$  est toujours la constante de couplage ou bien d'interaction, pour  $J=0$  indique une interaction ferromagnétique et l'autre cas ( $J \neq 0$ ) et l'antiferromagnétique [12].



**Figure II.1 :** Réseau carré et une paire de sites voisins les plus proches  $ij$

Néanmoins, en raison de sa simplicité, en 1944, *Onsager* a publié la solution exacte du modèle en deux dimensions sur le treillis carré [13], dans laquelle il a trouvé les exposants critiques pour la transition de phase qui se produit dans le cas bidimensionnel ; effectivement, des calculs précis sur la chaîne d'Ising linéaire ont été réalisés avec des interactions qui comprennent plusieurs voisins. D'autre part, En deux dimensions, la limitation aux interactions entre voisins les plus proches s'est avérée essentielle si l'on souhaite effectuer des calculs exacts valables pour toutes les températures [14].

#### 4. Modèles de Potts

Les modèles de Potts sont des modèles mécaniques statistiques concernant les magnétismes qui s'avèrent être très proches de la perméabilité l'utilisation de ces modèles permis de faire analogue à la corrélation spin-spin [15]. Bien que le modèle ait été initialement examiné par Potts (1952), Il correspond à une généralisation d'un modèle simple de ferromagnétisme présenté par Ising en 1925. Dans ce contexte ; prenons un réseau par souci de précision, que nous prendrons pour être localement carré. Associer à chaque emplacement du réseau  $i$  une

variable ou spin  $S_i$  on peut considérer cette variable comme en quelque sorte représentant l'état microscopique local de quelque système physique ; Idéalement un certain, et en rejetant la possibilité que des cas admissibles se poursuivent à l'instant [16]. Donc Les modèles de Potts sont également pertinents en eux-mêmes. Ils ont en effet deux paramètres : un paramètre de température inverse, analogue au paramètre de densité  $p$  en percolation, et un paramètre supplémentaire  $q$ , correspondant au nombre des états possibles sur chaque site ; Comme le modèle  $q=1$  est équivalent à la percolation, et le modèle  $q=2$  est équivalent à celui de calcul de la magnétisation d'Ising, par rapport  $q=3,4$  Potts ont des transitions de second ordre dans deux dimension, pour ce qui est de  $q>5$  possèdent des transitions de premier ordre dans toutes les dimensions [17]. Et l'Hamiltonian indique :

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \quad 2.2$$

Qui est un modèle statistique où, à chaque site d'un réseau, il y a une variable  $\sigma_i$  qui prend  $q$  valeurs discrètes,  $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$ . Dans ce modèle, deux spins voisins ont une énergie d'interaction donnée par  $-J\delta(\sigma_i, \sigma_j)$  [17].

### 5. Modèle de Blume-Emery-Griffiths (BEG)

C'est parmi les modèles qui entrent dans l'espace des modèles d'Ising le modèle de BEG qui est considéré comme les mixtes de  $\text{He}^3$ - $\text{He}^4$  se compose d'un réseau discontinu et d'une variable de spin fictive  $S_i$ , prenant les valeurs 0 et  $\pm 1$ , associée à chaque site du réseau. Un atome de  $\text{He}^3$  au site  $i$  correspond à  $S_i = 0$  et un atome de  $\text{He}^4$  à  $S_i = \pm 1$ . Il y a un et il existe un seul atome sur chaque site et le modèle ne tient pas compte des vides. Le degré de liberté supplémentaire, le signe de  $S_i$ , associé à un atome de  $\text{He}^4$ , est introduit dans le simple but de fournir un "paramètre d'ordre", c'est-à-dire la moyenne thermique du spin total [18]. En dehors de son intérêt pratique à reproduire, au moins qualitativement, les principales caractéristiques du diagramme de phase pour les transitions de superfluide et de séparation de phase, le modèle de BEG présente un intérêt intrinsèque puisqu'il constitue la généralisation la plus simple du modèle d'Ising de spin-1, qui présente un diagramme de phase complexe avec des lignes de transition du premier et du second ordre et des points tricritiques. Nous considérons une variable de spin  $S_{ij}$  qui prend les valeurs citées, associée à chaque site d'un réseau carré [19]. La dynamique du BEG est décrite par l'hamiltonien :

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - K \sum_{ij} \sigma_i^2 \sigma_j^2 + \Delta \sum_i \sigma_i^2 \quad 2.3$$

Dans ce cas,  $J$  est un couplage ferromagnétique entre les spins voisins,  $\sigma_i$ , qui peut prendre trois valeurs possibles,  $\sigma_i = \pm 1, 0$ .  $\Delta$  est le couplage cristal-champ [20].

## 6. Modèle de Blume Capel (BC)

Dans les systèmes types Ising un autre modèle qui est distingué par Martin Blume [21] et Hans Willem Capel [22]. Se caractérise par un hamiltonien d'Ising de spin-1. Cependant Les scientifiques de la physique statistique et de la physique de la matière condensée portent un grand intérêt à ce modèle en raison des comportements multicritiques et de la richesse de son diagramme de phase qui est par ailleurs assez simple [23], donc est l'une des plus simples étendues qui permet de réaliser un point tricritique d'Ising où trois phases différentes ne peuvent être distinguées [24]. Nous allons nous concentrer sur le cas plus simple du modèle de BC, dans lequel  $K=0$  dans l'hamiltonienne de modèle de BEG qui décrit précédemment et par cela l'équation 3.2 devient :

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - \Delta \sum_i \sigma_i^2 \quad 2.4$$

## 7. Modèle de XY

Lorsque nous avons étudié les transitions de phase, nous avons mis l'accent sur l'importance des fluctuations dans les systèmes de faible dimension. En effet, les forces de restauration qui tendent à ramener le système vers l'équilibre diminuent quadratiquement avec la distance. De nombreuses fluctuations de grande longueur d'onde sont excitées car elles ne mettent en jeu qu'une énergie infinitésimale. Au sein d'un système de faible dimension, elles apportent des contributions dominantes aux quantités thermodynamiques et l'ordre à longue distance ne peut pas se développer. Si l'on considère uniquement les fluctuations gaussiennes, une transition de phase est indiquée par un zéro dans la susceptibilité magnétique inverse. Le modèle XY qui se définit par l'hamiltonien :

$$H = -J \sum_{i,j} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) - \mu \mu_0 H \sum_i S_i \quad 2.5$$

Ce qui peut être considéré comme la limite en  $J \rightarrow 0$  d'un hamiltonien de Heisenberg anisotrope. Alternativement, le hamiltonien XY peut également décrire des systèmes magnétiques à spin entier avec une importante anisotropie ionique planaire, dans lesquels les spins sont bloqués dans leurs états [25].

## 8. Modèle de Heisenberg

Le modèle d'Heisenberg a été introduit en 1928. Il permet une description raisonnable des propriétés de certains isolants magnétiques, tels qu'EuS, et fournit un hamiltonien microscopique décrivant l'interaction d'échange qui conduit au ferromagnétisme. Toutefois, il n'inclut pas la possibilité de spins non localisés et suppose une isotropie complète dans l'espace des spins. La différence théorique la plus fondamentale entre les modèles d'Heisenberg et d'Ising est que pour le premier, les opérateurs de spin ne sont pas commutés. Il est donc plus proche de la mécanique quantique que du modèle de spin classique, ce qui rend les approches analytiques ou numériques plus difficiles. Les modèles quantiques peuvent être transposés sur les systèmes de spin classiques dans une dimension supérieure et il existe des résultats exacts pour les modèles quantiques unidimensionnels, tout comme pour les modèles classiques bidimensionnels [26]. Ça peut être écrit :

$$H = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \vec{S}_j - H \sum_i \vec{S}_i \quad 2.6$$

Bien que l'anisotropie puisse être changée continuellement et que les transitions de phase qui en découlent peuvent être étudiées, les spins sont quantifiés. Il a été conjecturé, et il est généralement admis, que les modèles d'Heisenberg avec des spins intégraux et semi-intégraux se comportent très différemment. Il est donc particulièrement intéressant de concevoir des procédures qui permettent de connecter de manière continue des modèles avec différentes valeurs de spin [27].

## 9. Modèle d'Ashkin Teller (ATM)

### 9.1. Généralité

Le modèle d'Ashkin Teller [28] est un système bidimensionnel dans lequel deux couches de spins d'Ising interagissent entre elles par un système à quatre spins. Dans chacun des modèles, il existe une interaction à deux tours entre les voisins les plus proches, c'est-à-dire un couplage de deux modèles d'Ising qui sont caractérisés par les spins situés dans chaque site du réseau cubique avec un paramètre d'interaction à quatre spins [29] ; c'est-à-dire Le modèle Ashkin-Teller peut se formuler comme deux modèles d'Ising avec interactions respectives  $K1$  et  $K2$  couplées avec une interaction à 4 spins  $K3$ . Le modèle peut être représenté par un modèle à 8 sommets décalés en réalisant une transformation de dualité vers l'un des deux modèles d'Ising. Lorsque  $K3 = 0$ , les deux modèles d'Ising sont découplés et il y a deux transitions bien distinctes. Ce qui n'était pas clair, c'est ce qui se passe lorsque  $K3$  est activé. En rassemblant les

informations exactes connues à l'époque et en utilisant essentiellement un argument de continuité, Lin et Wu avons établi avec certitude qu'il existe deux transitions de phase dans le modèle d'Ashkin-Teller [30]. Dès lors Ashkin et Teller ont élaboré un modèle très intéressant dans ces systèmes d'Ising et ont donc simplifié l'étude de la mécanique statistique ; par conséquent, dans ce modèle, on pouvait introduire les phénomènes coopératifs des alliages quaternaires dans un réseau, qui est décrit par un hamiltonien sous une forme adaptée aux systèmes magnétiques [31]. Par conséquence on peut considérer le modèle Ashkin- Teller comme deux modèles d'Ising superposés, décrits par les variables de spin  $S_i$  et  $\sigma_i$  assis sur les sites d'un réseau. Dans chaque modèle d'Ising, il existe des interactions d'échange entre chaque spin variable et ses plus proches voisins avec un couplage  $J_{ij}$  et les différents modèles d'Ising sont couplés par interactions de quatre spins avec un couplage  $K_{ij}$  dans laquelle les sommes sont calculées sur les spins voisins les plus proches [32]. Telle que :

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i S_j + \sigma_i \sigma_j) - \sum_{\langle ij \rangle} K_{ij} (\sigma_i S_i \sigma_j S_j) \quad 2.7$$

Kramers-Wannier (1941) a observé les points critiques d'un cas particulier du modèle d'Ashkin-Teller dans lequel trois des quatre composantes sont dégradées [33]. Leurs hypothèses s'étendent au modèle d'Ashkin-Teller montré par Fan (1972) [34], et tendent à être celles de Wegner (1972) qui a généralement prouvé que l'argument n'existait pas au point critique. Prouvé que l'argument n'existait pas en un point critique. Il est donc intéressant d'étudier de près le problème de la transition dans ce modèle [35]. En plus de cela, Wagner a prouvé que le modèle d'Ashkin-Teller était l'équivalent au modèle alternatif à huit sommets, qui n'a pas été résolu de manière exacte. Une seule ligne critique dans le diagramme de phase du modèle isotrope d'Ashkin-Teller est aussi précise que possible grâce à la relation de dualité trouvée par Fan [34].

L'une des propriétés critiques les plus intéressantes de ce modèle est la non-universalité du comportement critique sur les lignes d'auto-doublement dans lesquelles les exposants critiques évoluent de manière continue constitue l'une des intéressantes propriétés critiques de ce modèle. En revanche, il a été démontré que le modèle tridimensionnel présente des diagrammes de phase beaucoup plus riches que le modèle ATM en deux dimensions. Il existe des transitions de phase du premier ordre et des transitions de phase continues. Même une transition de type XY et un point multicritique de type Heisenberg [36].

Notamment, le modèle AT standard tridimensionnel (3D) a été analysé par Ditzian et autres, ils ont vu que le diagramme de phase pour le système  $d=3$  est très différent de celui du groupe  $d=2$ . En effet, une nouvelle phase (non vue dans  $d=2$ ) est observée, celle dans laquelle le système brise spontanément sa symétrie naturelle entre ses deux types de spins d'Ising. Une variété de transitions continues sont observées et expliquées en termes d'une analyse qui s'accorde parfaitement avec les concepts du groupe de renormalisation [37]. Les résultats plus précis ont été réalisés par Arnold et Zhang telle qu'ils ont proposé des simulations numériques du modèle d'Ashkin-Teller pour servir de support à des techniques théoriques pour étudier les transitions de phase de premier ordre très faibles en trois dimensions. À cette limite, il y a des quantités caractérisant la transition de premier ordre qui sont universelles. Ils ont été mesurés à l'aide d'une méthode de mesure la discontinuité relative de la chaleur spécifique, la longueur de corrélation et la susceptibilité à travers la transition par simulation de Monte Carlo [38]. Ainsi que Zbigniew Wojtkowiak et autres ils ont étudié une méthode de Monte Carlo en grappe adaptée aux transitions de phase de premier et de second ordre dans le modèle 3D Ashkin-Teller (AT) ils ont constaté qu'il n'y avait pas d'effet mesurable du ralentissement critique, ni de la présence d'états métastables ou instables sur les valeurs des quantités thermodynamiques étaient déterminées à l'aide de l'algorithme de Metropolis ils ont également vérifié que leur algorithme de cluster est adapté aux transitions de phase continues et de premier ordre dans le modèle AT 3D [39].

De surcroît, Badehdah et en collaboration avec Bekhechi et autre ils ont étudié le modèle AT anisotrope de spin-1/2 par la méthode de la matrice de transfert, leurs résultats obtenus par cette méthode numérique exacte, confirment l'existence d'autres phases partiellement ordonnées. De plus, à partir de calculs d'exposants, ils ont montré que toutes les transitions sont dans l'universalité d'Ising, à l'exception du point multicritique  $B^4$  souligné sur le diagramme de phase qui est non-universel [40]. Même quand ils ont fait une étude approfondie du modèle Ashkin-Teller à spin-1 pour autre travaille. Ses résultats obtenus avec les deux méthodes numériques dans l'espace des paramètres  $(K_4/K_2, D/K_2, T/K_2)$ , les diagrammes de phase présentent de riches variétés de transitions de phase avec des surfaces de première et de second ordre, Apparaissent également, pour certaines valeurs du couplage quadruple  $K_4/K_2$  et de l'anisotropie  $D/K_2$ , deux phases partiellement ordonnées  $PO_1$  et  $PO_2$ . En ce qui concerne l'exposant critique ils présentent une ligne de points critiques qui appartiennent au modèle de Potts à quatre états pour une gamme de valeurs de l'anisotropie. Dans l'ATM de spin-1/2. Lorsque  $D/K_2$  est plus faible, le modèle tombe dans la classe d'universalité tricritique d'Ising [41].

## 9.2. Applications du modèle Ashkin-Teller

Le modèle Ashkin-Teller a été développé par l'absorption du composé de sélénium sur la surface du Ni telle qu'ils ont étudié par diffraction électronique les sous-monocouches de s'adsorbées sur Ni (100) ; des phases  $p(2 \times 2)$ ,  $c(2 \times 2)$ , et des phases désordonnées ont été observées et les frontières entre elles localisées. Des arguments de symétrie indiquent que le diagramme de phase appartient à la classe d'universalité du modèle Ashkin-Teller et ils permettent de prédire le comportement critique près des frontières de phase et au point multicritique où elles se rencontrent [42]. Il est également représenté dans le diagramme de phase obtenu à partir de la réponse élastique de l'ADN avec que l'interaction de la pile principale a été décrite de manière simple et standardisée. Un diagramme de phase ADN a été obtenu, et en particulier, le passage de l'état du modèle B à l'état S induit par étirement et torsion. La réponse élastique de l'ADN est également présentée dans une morphologie standardisée [43].

En outre, ce modèle exige également l'étude des propriétés thermodynamiques des capsules supraconductrices (puces de  $\text{CuO}_2$ ) après qu'ils adoptés la simulation de Monte Carlo à grande échelle a été réalisée sur un modèle 2D Ashkin Teller généralisé pour calculer les propriétés thermodynamiques dans la région critique près de ses transitions. Le modèle Ashkin-Teller contient une paire de cycles d'Ising sur chaque site, qui interagissent avec ceux adjacents par le biais d'interactions à deux et quatre tours. Le modèle décrit les interactions entre les boucles de courant orbitales dans les plaquettes de  $\text{CuO}_2$  fini  $T_C$ , qui sont disposées avec une aimantation modulée dans chaque cellule unitaire dans la région non anesthésiée du premier graphique de phase. Sous température  $T$ , dépendante du dopage. Cependant, il est significatif qu'il n'y ait aucune divergence dans la chaleur spécifique. Ceci permet de mettre les propriétés du modèle en accord avec les résultats expérimentaux dans les cuprates sous-dosés [44].

En plus, l'estimation de l'oxygène peut également être adaptée dans  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_z$  au modèle bidimensionnel d'Ashkin-Teller et c'est à travers les différentes configurations stables ont été déterminées par la théorie de Landau - Lifshitz et la simulation de Monte Carlo. Une analyse hamiltonienne de Landau-Ginzburg-Wilson appropriée montre que le comportement critique est cohérent avec l'ordre de classement. Démontre que le comportement critique est conforme à la classe d'universalité du modèle Ashkin Teller [45].



### 9.3. Différentes méthodes théoriques et numériques appliquées à l'ATM

Les propriétés critiques ainsi que les propriétés magnétiques de model Ashkin Teller ont été abondamment étudiées dans la documentation, bien que le modèle Ashkin Teller, en raison de la disponibilité de points tricritiques et de transitions de phase faiblement de premier ordre, présente un diagramme de phase compliqué et intéressant. Les propriétés du modèle Ashkin Teller ont été étudiées par diverses méthodes théoriques et numériques ont été appliquées, notamment la simulation de Monte Carlo ce qui concerne pour le sujet de la thèse c'est dans l'application dans le chapitre suivant et ils seront expliqués dans le prochain titre, l'approximation du champ moyen [46], la théorie du champ effectif [47], la méthode de champ transfert de matrice [48] et la théorie du groupe de renormalisation [49].

## 10. Qu'est-ce que la simulation ?

### 10.1. Définition

La simulation est définie par Naylor et al. Comme une technique numérique pour mener des expériences sur un ordinateur numérique : qui implique certains types de modèles mathématiques et logiques qui décrit le comportement de systèmes économiques ou commerciaux (ou de certains de leurs composants) sur une période prolongée en temps réel. La suivante liste de situations typiques devrait donner au lecteur une idée des cas où la simulation serait un outil approprié telle que [50] :

- ❖ Le diagramme peut être si complexe qu'une formule basée sur une équation mathématique simple peut ne pas être réalisable. La plupart des économies entrent dans cette catégorie. Le diagramme peut être si complexe qu'une formule basée sur une équation mathématique simple peut être irréalisable. La plupart des économies entrent dans cette catégorie.
- ❖ Il est possible de formuler un modèle mathématique qui rend compte du comportement d'un système donné, il n'est pas toujours évident d'obtenir une solution au problème posé par le modèle à l'aide de techniques analytiques simples.
- ❖ Les simulations peuvent être utilisées comme un outil pédagogique pour enseigner aux étudiants et aux professionnels des compétences avancées en analyse de systèmes, en statistiques et en gestion de l'information. Et les praticiens des techniques d'analyse des systèmes de base. C'est l'un des domaines où la simulation a été utilisée avec succès à cette fin.

- ❖ La conception d'un modèle de simulation informatique est un exercice officiel qui peut être plus utile que la simulation proprement dite. Les connaissances obtenues lors de la création d'une étude de simulation servent à cristalliser la réflexion de l'analyste et proposent souvent des modifications du système simulé. Les conséquences de ces changements peuvent ensuite être testées par simulation avant de les mettre en place dans le système réel.
- ❖ La simulation peut apporter de nombreuses informations sur le processus d'identification des variables importantes et de celles qui ont des effets négligeables sur le système.
- ❖ Des simulations peuvent être utilisées pour expérimenter de tels scénarios afin de mieux comprendre le comportement du système dans de nouvelles conditions. Il fournit un laboratoire dans le laboratoire, ce qui permet à l'analyste de découvrir une meilleure maîtrise du système étudié. Les systèmes dynamiques peuvent être étudiés dans des horizons en temps réel, des horizons temporels compressés ou élargis. L'introduction du caractère aléatoire dans le système peut aider à résoudre de nombreux problèmes d'optimisation [50].

## 10.2. Classification des modèles de simulation

### 10.2.1. Modèles statiques et dynamiques

Les changements statiques sont ceux qui ne sont pas évolués dans le temps. Ne représentent donc pas le passage du temps. En opposition, les modèles dynamiques représentent des systèmes qui peuvent évoluer dans le temps (par exemple, le fonctionnement des feux de signalisation).

### 10.2.2. Modèles déterministes et Stochastiques

Lorsqu'un modèle de simulation ne comporte que des éléments déterministes c'est-à-dire non aléatoires, il est appelé déterministe. Dans un modèle déterministe, tous les rapports mathématiques et logiques entre les composants (variables) sont déterminés à l'avance et ne sont pas soumis à l'incertitude. Un système compliqué et analytiquement insoluble d'équations dérivées standard qui décrivent, par exemple, une réaction chimique. En contraste, un modèle avec au minimum une variable d'entrée aléatoire est appelée un modèle stochastique. La plupart des systèmes de file d'attente et d'inventaire sont modélisés stochastiquement.

### ***10.2.3. Modèles de simulation continus et discrets***

Dans les modèles de simulation discrète, la variable d'état change de façon instantanée à des moments discrets, tandis que dans les modèles de simulation continue, l'état change de manière continue dans le temps. Un modèle mathématique visant à calculer une solution numérique pour un système d'équations différentielles est un exemple de simulation continue, tandis que les modèles de file d'attente sont des exemples de simulation discrète [50].

## ***11. Simulation de Monte Carlo (MCM)***

La simulation de Monte Carlo est essentiellement la génération d'objets ou de processus aléatoires au moyen d'un ordinateur. Ces éléments peuvent survenir "naturellement" dans le cadre de la modélisation d'un système de la vie réelle, tel qu'un réseau routier complexe, le transport de neutrons, ou l'évolution du marché boursier. Dans de nombreux cas, les objets aléatoires dans les techniques de Monte Carlo sont souvent introduits "artificiellement" afin de résoudre des problèmes strictement déterministes. Dans ce cas, la MCM implique simplement un échantillonnage aléatoire à partir de certaines distributions de probabilité [51].

Tandis que, les algorithmes de Monte Carlo ont généralement tendance à être simples, adaptables et extensibles. Lorsqu'elles sont appliquées aux systèmes physiques, ces techniques peuvent réduire des modèles complexes à un ensemble d'événements et d'interactions basiques, ce qui ouvre la possibilité d'encoder le comportement du modèle par un ensemble de règles qui peuvent être efficacement mises en place sur un ordinateur. Ceci permet de mettre en œuvre et d'étudier des modèles beaucoup plus complexes que ce qui est possible en utilisant des méthodes analytiques [51].

### ***11.1. Applications classiques de la Méthode de Monte Carlo***

#### ***11.1.1. Échantillonnage***

Ici, on cherche à rassembler des informations sur un objet aléatoire en observant de multiples réalisations de cet objet. Un exemple est la modélisation par simulation, dans laquelle un processus aléatoire reproduit le comportement d'un système réel, comme une chaîne de production ou un réseau de télécommunications. Un autre exemple se trouve dans les statistiques bayésiennes, où la méthode de Monte Carlo à chaîne de Markov est souvent utilisée pour échantillonner à partir d'une distribution postérieure [52].

### **11.1.2. Estimation**

Cette technique met l'accent sur l'estimation de certaines quantités numériques liées à un modèle de simulation. Un bon exemple dans le milieu naturel des techniques de Monte Carlo est l'estimation du débit attendu d'une chaîne de fabrication. Un autre exemple dans le domaine artificiel est l'évaluation d'intégrales multidimensionnelles via les techniques de Monte Carlo en écrivant l'intégrale comme l'espérance d'une variable aléatoire [52].

### **11.1.3. Optimisation**

Le Méthode de Monte Carlo est un instrument efficace pour optimiser des fonctions objectives complexes. Dans beaucoup d'applications, ces fonctions sont déterminées et le hasard est introduit de manière artificielle afin de rechercher plus efficacement le domaine de la fonction objectif. On utilise aussi les techniques de Monte Carlo pour optimiser des fonctions bruyantes, où la fonction elle-même est aléatoire - par exemple, le résultat d'une simulation de Monte Carlo [52].

Maintenant ; Dans les problèmes de mécanique statistique, nous essayons parfois d'échantillonner une région de l'espace des phases afin d'estimer certaines caractéristiques de l'espace des phases. Même si nous ne nous mouvons pas dans l'espace de phase selon le même chemin qu'une solution exacte à la dépendance temporelle du modèle donnerait. Rappelons que la mécanique statistique à l'équilibre a pour but de calculer moyennes thermiques des systèmes de particules nombreuses ; alors que les simulations de Monte Carlo peuvent le faire, en tenant compte des fluctuations statistiques et de leurs conséquences dans de tels systèmes. Un certain de ces modèles seront examinés plus en détail [52].

## **12. Guide d'échantillonnage de Monte Carlo**

### **12.1. Nombres aléatoires**

Le terme "méthode de Monte Carlo" provient du fait que cette dernière utilise des nombres aléatoires similaires à ceux provenant des jeux de roulette. Cependant, produire jusqu'à 1010 de ces nombres aléatoires de Monte Carlo de cette manière demanderait beaucoup de temps et d'argent ; On a donc recours aux ordinateurs à la place. Pour comprendre le principe des "générateurs de nombres aléatoires" mis en œuvre dans les logiciels des ordinateurs numériques, rappelons que chaque "mot" des mémoires des

ordinateurs est constitué de  $m$  bits pour un entier. L'un de ces bits indique le signe, les autres donnent la grandeur. Par ailleurs la répartition des nombres réels est à peu près homogène et approximativement aléatoire entre zéro et un [53].

En effet, le développement de la théorie des probabilités passe par la simulation du phénomène du hasard. À cette occasion, il nous faut une source fiable de nombres aléatoires. Quelques procédés dans la nature, comme la désintégration nucléaire et les autres événements quantiques en physique, sont supposés être vraiment aléatoires et pourraient être utilisés pour fournir des nombres aléatoires uniformément distribués. Toutefois, à des fins pratiques, cela serait pratique : on pourrait certes envisager de consacrer un disque dur à l'unique exclusivement au stockage de nombres vraiment aléatoires, la période serait tout de même assez limitée et il serait difficile d'obtenir des temps d'accès rapides. Il est plus pratique de s'appuyer sur des générateurs de nombres pseudo-aléatoires. L'objectif est de fournir des nombres  $x$  dans l'intervalle :  $0 \leq x < 1$  [54].

### 12.2. Échelle à taille finie

Souhaitent étudier les transitions de phase à l'aide de la méthode de Monte Carlo. Telles que la transition du modèle d'Ising d'un état paramagnétique avec une magnétisation nulle au-dessus de  $T_c$  à un état avec une magnétisation "spontanée" non nulle pour un champ appliqué nul  $H$  au-dessous de  $T_c$ . Il est cependant bien connu qu'une telle brisure de symétrie spontanée ne peut se produire que dans la limite thermodynamique :

$$\mathbf{M} = (\mathbf{1}/N) \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle = \mathbf{0} \quad 2.8$$

Pour toutes les températures et pour toute grandeur arbitraire finie  $N$  ; une aimantation spontanée est définie en prenant d'abord la limite thermodynamique  $N \rightarrow \infty$  et en laissant ensuite  $H$  tendre vers zéro. On pourrait essayer de faire approximativement cette double limite [53].

### 12.3. Évaluation de l'énergie libre et de l'entropie

La technique d'échantillonnage par importance permet d'obtenir des estimations pour quantités importantes qui constituent des moyennes des éléments observables du système, par exemple l'énergie  $U$ , l'aimantation  $M$ , la densité  $p$ , etc., mais elle ne fournit pas directement d'informations sur la fonction de partition  $Z$  proprement dite. Mais elle ne donne pas directement d'informations sur la fonction de partition  $Z$  elle-même. L'entropie donc :

$$S = (U - F)/T \quad 2.9$$

Ne sont pas non plus directement connues. Ce dernier problème a attiré une grande beaucoup d'attention dans la littérature, et plusieurs méthodes pour le résoudre ont été suggérées en utilisant à nouveau les magnétiques d'Ising comme exemple explicite [53].

#### 12.4. Conditions aux limites

La distraction provenant des frontières du système est généralement diminuée par l'emploi de conditions aux limites périodiques. Notez cependant que le choix de la dimension linéaire et de la condition aux limites appropriées doit être fait avec un peu de réflexion. Il est clair que la condition aux limites périodique doit avoir des effets perturbateurs dans les cas où le système veut développer un ordre à longue portée qui n'est pas proportionnel à la dimension linéaire de la boîte, ce qui se produit nécessairement dans un modèle présentant une transition de phase proportionnelle et improportionnelle, alors les plus proches voisins des sites  $i$  sont pris comme  $i=\pm 1, i\pm L; i\pm L^2$ , ce qui implique une condition aux limites périodique asymétrique [55].

### 13. Chaîne de Markov Monte Carlo (MCMC)

La méthode MCMC (Markov chain Monte Carlo) est une approche générique d'échantillonnage approché à partir d'une répartition arbitraire. La méthode consiste à générer une chaîne de Markov dont la distribution limite est égale à la distribution désirée. Dans ce dernier, nous allons décrire les algorithmes MCMC les plus importants [56] :

- L'algorithme de Metropolis-Hastings et notamment l'échantillonneur d'indépendance et l'échantillonneur de marche aléatoire ;
- L'échantillonneur de Gibbs, qui est particulièrement utile dans l'analyse bayésienne ;
- L'échantillonneur de type " hit-and-run ", communément appliqué dans les cadres bayésiens avec un espace de paramètres fortement contraint et pour les problèmes génériques de simulation d'événements rares ;
- L'algorithme shake-and-bake - une démarche concrète pour générer des points répartis uniformément sur la surface d'un objet distribués uniformément sur la surface d'un polytope ;
- Les hybrides Metropolis-Gibbs et la méthode Metropolis-Hastings à tentatives multiples, dans laquelle les idées de différents algorithmes MCMC sont associées ;
- Les échantillonneurs de variables annexes, tels que l'échantillonneur de tranches et l'algorithme de Swendsen- Wang ;

- L'échantillonneur à saut réversible, qui a des applications dans la sélection de modèles bayésiens [56].

Plutôt, une chaîne de Markov est un processus statistique d'un type particulier, qui traite de la caractérisation de séquences de variables aléatoires. Un intérêt particulier est porté aux comportements dynamique et limite de la suite. Un processus stochastique peut être défini comme un ensemble de quantités aléatoires [57]. Encore la partie théorique des Simulations MC est basée sur les statistiques et la partie analytique des résultats générés par les MC est de la statistique appliquée. Par ailleurs, l'analyse des données générées par les MC est une application de la statistique. De plus en plus, la puissance de calcul implique un changement de paradigme en ce qui a trait aux statistiques : Les techniques à forte intensité de calcul, mais relativement simples sur le plan conceptuel, sont au premier plan. Les simulations MC ne sont pas seulement utiles pour simuler des modèles intéressants, mais elles représentent également un outil précieux pour approcher les statistiques. Bien sur Le point de départ du traitement des simulations MC de chaînes de Markov est l'algorithme de Metropolis pour la simulation de la chaîne de Markov [58].

Notamment, dans le domaine de la physique statistique, le problème de la génération de configurations de l'ensemble canonique de Gibbs avec leurs poids de Boltzmann corrects également appelés poids de Gibbsa été résolu dans les travaux bien connus de Nicholas Metropolis, Arianna Rosenbluth, Marshall Rosenbluth, Augusta Teller et Edward Teller [59].

## 14. Algorithme de Métropolis

L'algorithme de Metropolis [Metropolis et al. (1953)] est souvent choisi. Il est possible de le mettre en œuvre Il peut être utilisé dès que l'on sait comment calculer l'énergie d'une configuration [59]. Une méthode de Monte-Carlo Monte Carlo (MCMC), est l'une des techniques les plus populaires utilisées aujourd'hui par les statisticiens. Il est principalement utilisé comme un moyen L'algorithme produit une chaîne de Markov dont la distribution limite des membres est la densité cible  $\pi(x)$  [60]. Elle porte ce nom car elle est basée sur l'utilisation de nombres aléatoires. Cette méthode permet d'estimer des moyennes de quantités physiques données par la formulation de Gibbs de la mécanique statistique sous la forme d'intégrales multidimensionnelles. La technique MC est en effet particulièrement adaptée au calcul d'intégrales de dimension supérieure à dix. Les premières simulations ont été réalisées dans l'ensemble canonique ( $N$ ,  $V$  et  $T$  constants), puis la technique a été étendue à d'autres ensembles statistiques. Nous générons une séquence aléatoire d'états accessibles (chaîne de Markov) dans

l'espace de configuration du système. On échantillonne en favorisant les régions où le facteur de Boltzmann. Par conséquent La méthode de MC est en général limitée au calcul des propriétés statiques puisque seule la partie configurationnelle de l'espace des phases est explorée et que le temps n'est pas une variable explicite. Les propriétés dynamiques sont inaccessibles et devront être obtenues par une autre technique [61]. L'algorithme de Metropolis sera utilisé dans le chapitre suivant telle que :

1. On choisit une configuration initiale, calcule de l'énergie initiale
2. On choisit un spin, au hasard
3. On envisage comme tentative de mouvement le retournement de ce spin.
4. On calcule la différence d'énergie  $\Delta E$  d'interaction des spins entre la nouvelle configuration avec un spin retourné et la configuration de départ.
5. Si  $\Delta E \leq 0$  c'est-à-dire que le retournement du spin diminue l'énergie, on accepte donc la nouvelle configuration.
6. Si  $\Delta E > 0$  : On tire un nombre aléatoire  $Z$ , au hasard, suivant une loi uniforme sur le segment  $[0,1]$ .
7. Si  $Z < \exp(-\Delta E/kBT)$ , on accepte la configuration avec spin retourné comme nouvelle configuration. Sinon on la rejette et la configuration à l'étape suivante est identique à la configuration précédente.
8. On calcule les grandeurs suivantes : aimantation par spin, susceptibilité par spin, coefficient de cumulant de Binder ...
9. Nous réitérons à l'étape (2) jusqu' à la convergence.

### 15. Analyse des erreurs

Le premier détail qui doit être résolu est le grand nombre d'étapes MC, qui, comme la taille du réseau, sont également limitées par la capacité de l'ordinateur. À une certaine étape MC, l'équilibre est atteint et les mesures peuvent donc être effectuées et les moyennes en considération peuvent être calculées à partir de cette étape jusqu'à la dernière étape MC. Par conséquent, l'étape MC qui définit le début de l'équilibre doit être déterminée avec soin pour éviter l'effet d'erreurs statistiques qui deviennent plus grandes près du point critique [62]. Dans la méthode de Monte Carlo on considère un nombre  $M$  d'étapes de Monte Carlo est subdivisé en  $p$  groupes dont chacun de groupe contient  $M_p$  étapes donc les moyennes sont calculées pour chaque groupe de configuration pour une grandeur physique  $A$  :



$$\langle A_S \rangle = \frac{1}{M_P} \sum A \quad 2.10$$

Alors on peut calculée la variance de ces valeurs comme ce suit :

$$V_{M_P} = \frac{M_p}{P-1} \sum_{S=1}^{S=P} (A_S - \langle A \rangle_S)^2 \quad 2.11$$

Avec cette estimation, on peut obtenir une idée de l'erreur produite par la méthode de Monte-Carlo. Du fait de la nature statistique de l'estimation.

### ***Conclusion***

Nous avons précédemment discuté de l'étude de la transition de phase, et nous avons également appris la difficulté des systèmes magnétiques. Bien que nous ayons décrit dans ce chapitre quelques modèles de rotation. Le plus important est le modèle Ising car tous les autres modèles sont construits dessus. Mais notre sujet parle de l'un de ces modèles, ou le modèle Ashkin-Teller, qui est la superposition de deux modèles d'Ising dont la position occupe l'un des quatre types d'atomes. Avec cela, nous pouvons simplifier la nature des transitions de phase. Et nous avons également parlé de la méthode de simulation appliquée dans ce travail, qui est la technique exacte de Monte Carlo développée par l'algorithme Metropolis.

## Références

- [1] BARGHATHI, Hatem, HRAHSHEH, Fawaz, HOYOS, José A., *et al.* Strong-randomness phenomena in quantum Ashkin–Teller models. *Physica Scripta*, 2015, vol. 2015, no T165, p. 014040.
- [2] MCCOMB, W. David. *Study notes for Statistical Physics: A concise, unified overview of the subject-eBooks and textbooks from bookboon. com.* 2015.
- [3] KUZEMSKY, Alexander Leonidovich. *Statistical mechanics and the physics of many-particle model systems.* 2017.
- [4] WACHTER, Armin et HOEBER, Henning. *Compendium of theoretical physics.* Springer Science & Business Media, 2006.
- [5] ZAHIR, H., BAHLAGUI, T., EL KENZ, A., *et al.* Monte Carlo Study of the Mixed-Spin (1/2, 2) Ferrimagnetic Ising System on a Honeycomb Lattice. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2019, vol. 32, no 4, p. 963-970.
- [6] AHMED, S. Sidi, BAHMAD, L., BENYOUSSEF, A., *et al.* Mixed spin-1 and spin-1/2 Blume-Emery-Griffiths model on the Bethe lattice: Monte Carlo simulation. *Superlattices and Microstructures*, 2017, vol. 109, p. 841-851.
- [7] MUSSARDO, Giuseppe. *Statistical field theory: an introduction to exactly solved models in statistical physics.* Oxford University Press, 2010.
- [8] Niss, M. History of the Lenz-Ising Model 1920–1950: *From Ferromagnetic to Cooperative Phenomena.* *Arch. Hist. Exact Sci.* **59**, 267–318 (2005).
- [9] BRUSH, Stephen G. History of the Lenz-Ising model. *Reviews of modern physics*, 1967, vol. 39, no 4, p. 883.
- [10] Mattis D.C. (1985) *The Ising Model.* In: *The Theory of Magnetism II.* Springer Series in Solid-State Sciences, vol 55. Springer, Berlin, Heidelberg.
- [11] CIPRA, Barry A. An introduction to the Ising model. *The American Mathematical Monthly*, 1987, vol. 94, no 10, p. 937-959.
- [12] NISHIMORI, Hidetoshi et ORTIZ, Gerardo. *Elements of phase transitions and critical phenomena.* OUP Oxford, 2010.
- [13] Lars Onsager. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Phys. Rev.*, 65 (3) :117-149, 1944.
- [14] MCCOY, Barry M. et WU, Tai Tsun. *The two-dimensional Ising model.* Courier Corporation, 2014.
- [15] HSU, Elton P. et VARADHAN, SR Srinivasa (ed.). *Probability theory and applications.* American Mathematical Soc., 1999.
- [16] MARTIN, Paul Purdon. *Potts models and related problems in statistical mechanics.* World Scientific, 1991.

- [17] MUSSARDO, Giuseppe. *Statistical field theory: an introduction to exactly solved models in statistical physics*. Oxford University Press, 2010.
- [18] BLUME, Martin, EMERY, Victor J., et GRIFFITHS, Robert B. *Ising model for the  $\lambda$  transition and phase separation in  $He^3$ - $He^4$  mixtures*. *Physical review A*, 1971, vol. 4, no 3, p. 1071.
- [19] ALCARAZ, F. C., DE FELÍCIO, JR Drugowich, KÖBERLE, R., et al. *Hamiltonian studies of the Blume-Emery-Griffiths model*. *Physical Review B*, 1985, vol. 32, no 11, p. 7469.
- [20] D.P. Landau S.P. Lewis H.-B. Schüttler, *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVIII*, Proceedings of the Eighteenth Workshop Athens, GA, USA, March 7–11, 2005
- [21] BLUME, M. *Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $UO_2$* . *Physical Review*, 1966, vol. 141, no 2, p. 517.
- [22] CAPEL, H. W. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, 1966, vol. 32, no 5, p. 966-988.
- [23] XIANG, Chunhuan, CHEN, Ai Min, SU, Yao Heng, et al. Physical observable for one-dimensional the spin-1 Blume–Capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2020, vol. 553, p. 124274.
- [24] AZHARI, Mouhcine et YU, Unjong. *Tricritical point in the mixed-spin Blume-Capel model on three-dimensional lattices: Metropolis and Wang-Landau sampling approaches*. *Physical Review E*, 2020, vol. 102, no 4, p. 042113.
- [25] LÉVY, Laurent-Patrick. *Magnetism and superconductivity*. Springer Science & Business Media, 2000.
- [26] YEOMANS, Julia M. *Statistical mechanics of phase transitions*. Clarendon Press, 1992.
- [27] JANSSEN, H. K. From Phase Transitions to Chaos—Topics in Modern Statistical Physics ed G Györgyi et al. 1992.
- [28] Ashkin J., Teller E., *Phys. Rev.*, 1943, 64, 178.
- [29] Bekhechi S., Benyoussef A., Ettaki B., Loulidi M., *Eur. Phys. J. B*, 2000, 18, 275–282.
- [30] WU, Fa Yueh. *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics-Selected Papers with Commentaries (1963–2008)*. World Scientific, 2009.
- [31] Bezerra C.G., Mariz A.M., de Araujo J.M., da Costa F.A., *Physica A*, 2001, 292, No. 1–4, 429–436.
- [32] FRANCISCO, R. M. et SANTOS, J. P. *Magnetic properties of the Ashkin–Teller model on a hexagonal nanotube*. *Physics Letters A*, 2019, vol. 383, no 11, p. 1092-1098.
- [33] Kramers H.A., Wannier G.H., *Phys. Rev.*, 1941, 60, No. 3, 252.
- [34] Fan C., *Phys. Rev. B*, 1972, 6, No. 3, 902
- [35] Kamieniarz G., Kozłowski P., Dekeyser R., *Phys. Rev. E*, 1997, 55, No. 3, 3724

- [36] AKINCI, Ümit. *Nonequilibrium phase transitions in isotropic Ashkin–Teller model*. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2017, vol. 469, p. 740-749.
- [37] DITZIAN, Ruth V., BANAVAR, Jayanth R., GREY, G. S., *et al.* *Phase diagram for the Ashkin-Teller model in three dimensions*. *Physical Review B*, 1980, vol. 22, no 5, p. 2542.
- [38] ARNOLD, Peter et ZHANG, Yan. Monte Carlo study of very weakly first-order transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model. *Nuclear Physics B*, 1997, vol. 501, no 3, p. 803-837.
- [39] WOJTKOWIAK, Zbigniew et MUSIAŁ, Grzegorz. Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin–Teller model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2020, vol. 500, p. 166365.
- [40] BADEHDAH, M., BEKHECHI, S., BENYOUSSEF, A., *et al.* *Finite-size-scaling study of the anisotropic spin-1/2 Ashkin–Teller model*. *Physica B : Condensed Matter*, 2000, vol. 291, no 3-4, p. 394-399.
- [41] BADEHDAH, M., BEKHECHI, S., BENYOUSSEF, A., *et al.* *Numerical study of the spin-1 Ashkin-Teller model*. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, no 9, p. 6250.
- [42] BAK, Per, KLEBAN, P., UNERTL, W. N., *et al.* *Phase diagram of selenium adsorbed on the Ni (100) surface: A physical realization of the Ashkin-Teller model*. *Physical review letters*, 1985, vol. 54, no 14, p. 1539.
- [43] ZHE, Chang, PING, Wang, et YING-HONG, Zheng. *Ashkin–Teller Formalism for Elastic Response of DNA Molecule to External Force and Torque*. *Communications in Theoretical Physics*, 2008, vol. 49, no 2, p. 525.
- [44] GRØNSLETH, M. S., NILSSEN, T. B., DAHL, E. K., *et al.* *Thermodynamic properties near the onset of loop-current order in high- $T_c$  superconducting cuprates*. *Physical Review B*, 2009, vol. 79, no 9, p. 094506.
- [45] WILLE, L. T. *Oxygen ordering and the tetragonalorthorhombic phase transition in  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$* . *Phase Transitions: A Multinational Journal*, 1990, vol. 22, no 1-4, p. 225-244.
- [46] SANTOS, Jander P. et BARRETO, FC Sá. New effective field theory for the Ashkin–Teller model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2015, vol. 421, p. 316-329.
- [47] SANTOS, J. P., ROSA, D. S., et BARRETO, FC Sá. New Baxter phase in the Ashkin–Teller model on a cubic lattice. *Physics Letters A*, 2018, vol. 382, no 5, p. 272-275.
- [48] BAHMAD, L., BENYOUSSEF, A., et EZ-ZAHRAOUY, H. Anisotropic Ashkin-Teller Model in a Transverse Field. *physica status solidi (b)*, 2001, vol. 226, no 2, p. 403-411.
- [49] DE OLIVEIRA, Paulo Murilo C. et BARRETO, FC Sá. Renormalization group studies of the Ashkin-Teller model. *Journal of Statistical Physics*, 1989, vol. 57, no 1-2, p. 53-63.
- [50] RUBINSTEIN, Reuven Y. et KROESE, Dirk P. *Simulation and the Monte Carlo method*. John Wiley & Sons, 2016.
- [51] KROESE, Dirk P., BRERETON, Tim, TAIMRE, Thomas, *et al.* *Why the Monte Carlo method is so important today*. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, 2014, vol. 6, no 6, p. 386-392.

- [52] LANDAU, David P. et BINDER, Kurt. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press, 2014.
- [53] BAUMGÄRTNER, Artur, BINDER, Kurt, HANSEN, J.-P., *et al.* *Applications of the Monte Carlo method in statistical physics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [54] BERG, B. A. et SIMULATIONS, Markov Chain Monte Carlo. Their Statistical Analysis with Web-Based Fortran Code, I. 2004.
- [55] BINDER, Kurt, HEERMANN, Dieter, ROELOFS, Lyle, *et al.* Monte Carlo simulation in statistical physics. *Computers in Physics*, 1993, vol. 7, no 2, p. 156-157.
- [56] KROESE, Dirk P., TAIMRE, Thomas, et BOTEV, Zdravko I. *Handbook of monte carlo methods*. John Wiley & Sons, 2013.
- [57] GAMERMAN, Dani et LOPES, Hedibert F. *Markov chain Monte Carlo: stochastic simulation for Bayesian inference*. CRC Press, 2006.
- [58] KENDALL, Wilfrid S., LIANG, Faming, et WANG, Jian-Sheng. *Markov chain Monte Carlo: innovations and applications*. World Scientific, 2005.
- [59] BERG, B. A. et SIMULATIONS, Markov Chain Monte Carlo. Their Statistical Analysis with Web-Based Fortran Code, I. 2004.
- [60] HITCHCOCK, David B. A history of the Metropolis–Hastings algorithm. *The American Statistician*, 2003, vol. 57, no 4, p. 254-257.
- [61] HAYOUN, Marc. La méthode de monte carlo metropolis. *École « Simulation Numérique en Matière Condensée » (Paris, 29-31 mai 2002)*, 2002.
- [62] SAHDANE, Taoufik. *Propriétés magnétiques de nanomatériaux : Etude par la méthode Monte Carlo*. 2017. Thèse de doctorat. Université Mohammed V Rabat (Maroc).

C hapitre III

Résultats Et  
Discussion

## Introduction

Lors d'études de matériaux magnétiques dans le cas de spins mélangées, il existe des études qui se concentrent sur le modèle d'Ising en présence du champ cristallin, et plus précisément, l'étude du modèle d'Ising des spins mélangées (1,3/2) présente des comportements qui ont été étudiés en utilisant la théorie des champs efficace car leurs résultats ont montré que le système de spins mélangées a des lignes de transition de premier ordre, ainsi que des points de tri critiques et des points triples. Ils ont également constaté que le système fait référence aux types de Néel [1]. Cependant, dans le contexte du spin mélangés (1,3/2), le modèle d'Ising de Blume-Capel a été réalisé où une ligne de transition du premier ordre a été trouvée séparant deux zones ferromagnétiques sur un réseau cubique carré [2]. Il a été récemment exploré en utilisant des simulations de Monte Carlo, les interactions du plus proche voisin du modèle d'Ising  $J_1, J_2, J_3$ , avec la frustration, que les principales barrières de la transmission changent avec l'augmentation de la température indiquant le comportement Ashkin-Teller aussi que cette étude estime les points de transition au point critique de Potts, et confirme le comportement de transition de premier ordre dans l'état de stabilisation de  $J_3$  antiferromagnétique [3]. En plus de cela, ils ont également mené des études sur la nature de la transition de phase thermique en quatre étapes dégradées dans la simulation de Monte Carlo et l'écaillage de la taille finale. D'autre part, les comportements du premier ordre sont notés sous les points critiques de Potts avec quatre états, et donc son travail indique que la transition à quatre états dans le modèle antimagnétique Ising représente une transition similaire. Dans ce contexte particulier de notre travail, nous nous intéressons au modèle d'Ashkin Teller [4] de ce système magnétique qui a été développé pour décrire ces propriétés et vu comme une généralisation de deux modèles d'Ising.

### ***Partie A : Model Ashkin Teller à spin mélangés ( $s=1, \sigma=3/2$ )***

#### ***1. Modèle et diagramme de phase de l'état fondamental***

Dans ce travail, nous considérons le modèle d'Ashkin-Teller dans le cas de spins  $\sigma=3/2$  et  $S=1$ . Nous analysons ce cas sous l'effet de différents champs cristallins. Ainsi, ce modèle est décrit par l'hamiltonien suivant :

$$H = -K_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i \sigma_j + S_i S_j) - K_4 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j S_i S_j - D_1 \sum_i S_i^2 - D_2 \sum_i \sigma_i^2 \quad 3.1$$

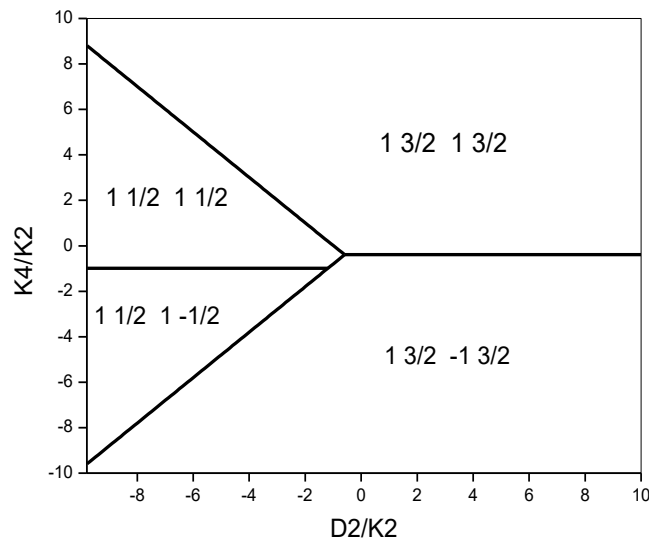
Où les variables  $\sigma_i$  et  $S_i$  prennent les valeurs  $(\pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2})$  et  $(\pm 1, 0)$  respectivement et sont situées sur les sites d'un réseau cubique simple.  $\langle i,j \rangle$  fait référence à une paire de spins voisins les plus proches.

Le premier terme de l'équation 1 se réfère aux interactions bilinéaires entre les spins situés sur les sites  $i$  et  $j$  en utilisant le paramètre de couplage  $K_2$ . De plus, le second terme se réfère à l'interaction des quatre spins avec la constante de couplage  $K_4$ . Le dernier terme fait référence à l'existence de deux champs cristallins ioniques  $D_1$  et  $D_2$ .

A partir de la contribution d'une paire de  $S_1, S_2, \sigma_1$  et  $\sigma_2$  l'hamiltonien est exprimé comme une somme des contributions des plus proches voisins, ou l'énergie de la paire s'écrit :

$$E_p = -K_2(\sigma_1\sigma_2 + S_1S_2) - K_4(\sigma_1\sigma_2S_1S_2) - \frac{D_1}{2}(S_1^2 + S_2^2) - \frac{D_2}{2}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \quad 3.2$$

Selon les valeurs contenant les variables  $S_i$  et  $\sigma_i$  nous extrayons  $144 = 3^2 \times 4^2$  configurations possibles pour l'état fondamental à  $T=0$ . En utilisant les configurations de symétrie, ce nombre se réduit à 24 configurations. Pour chaque ensemble de paramètres :  $K_2, K_4, D_1$  et  $D_2$  nous sélectionnent la configuration avec l'énergie minimale  $E_p$ . Ceci conduit aux diagrammes de phase dans l'état fondamental ( $T=0$ ). Les différentes phases seront données sous la forme  $(S_1, \sigma_1, S_2, \sigma_2)$ . Dans ce qui suit, nous considérons différentes situations en fixant un paramètre et en faisant varier les autres (les derniers seront normalisés par  $K_2$  sachant que  $K_2=1$  car le système est ferromagnétique). Sur la figure III.1, nous traçons le diagramme de phase en faisant varier le paramètre  $K_4/K_2$  en fonction de  $D_2/K_2$  (en admettant  $D_1=0$ ).



**Figure III.1** : Diagramme de phase de l'état fondamental dans le cas de  $D_1=0$



- Pour  $\frac{D_2}{K_2} < -1$  si  $\frac{K_4}{K_2} < -1$  et  $\frac{K_4}{K_2} > \frac{D_2}{K_2} + \frac{1}{4}$  on observe que les  $S_i$  sont parallèles tels qu'égal à 1 et que les spins sont antiparallèles.  $\sigma_i$  les spins sont antiparallèles. Par conséquent la phase stable obtenue est la phase antiferromagnétique. Pour  $\frac{K_4}{K_2} > -1$  et  $\frac{K_4}{K_2} > -\frac{D_2}{K_2} - 1$ . Nous pouvons distinguer que les spins  $S_i$  et  $\sigma_i$  sont tous deux alignés dans la même direction, donc  $\langle \sigma S \rangle = 1/2$  ; cela correspond à la phase ferromagnétique.
- Dans le cas :  $\frac{D_2}{K_2} > -1$ , si  $\frac{K_4}{K_2} < -\frac{4}{9}$ , on obtient une observation selon laquelle les  $\sigma_i$  sont parallèles de telle sorte que  $\langle \sigma \rangle = 3/2$  et que les spins sont antiparallèles.  $S_i$  les spins sont antiparallèles. Par conséquent la phase stable obtenue est la phase antiferromagnétique. Sinon si  $\frac{K_4}{K_2} > -1$  et  $\frac{K_4}{K_2} > -\frac{D_2}{K_2} - 1$ . Nous pouvons distinguer que les spins  $S_i$  et  $\sigma_i$  sont tous deux alignés dans la même direction, notamment  $\langle S \rangle = 1$  et  $\langle \sigma \rangle = 3/2$  donc  $\langle \sigma S \rangle = 3/2$  alors que nous avons la phase ferromagnétique  $3/2$ .

Dans la deuxième situation, nous obtenons la figure qui présente la variation de  $K_4/K_2$  en fonction de  $D_1/K_2$ . En outre dans le troisième cas, nous mettons  $D_1 = D_2 = D$  et nous dessinons le diagramme  $K_4/K_2$  en fonction de  $D/K_2$  (Figure III.3).

La figure III.2 montre un diagramme de phase dans l'état fondamental et la variation du paramètre  $K_4$  en fonction du champ cristallin  $D_1$  ( $D_2=0$ ).

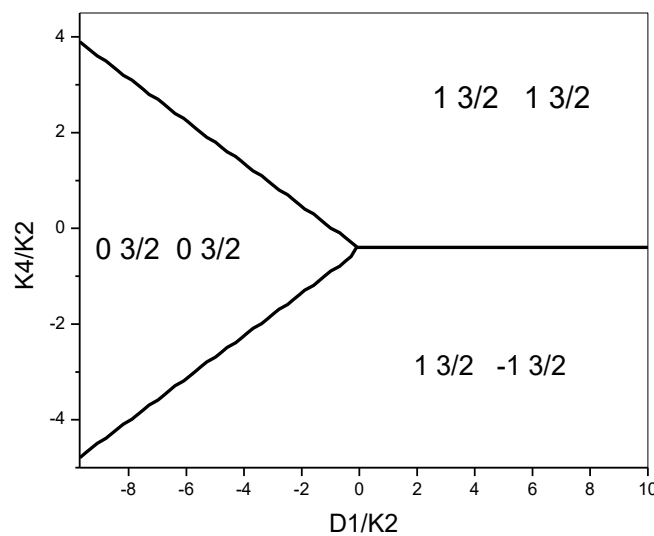


Figure III.2 : Diagramme de phase de l'état fondamental dans le cas de  $D_2=0$

- Pour  $D1/K2 < -0.1$  ou  $K4/K2 > 4/9 D1/K2 - 4/9$  et  $K4/K2 > -4/9 D1/K2 - 4/9$  : on a la phase stable appelée phase car on a les spins  $S_i$  sont égaux à zéro tels que  $\langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$  et  $\langle \sigma \rangle = -3/2$ .
- Pour  $D2/K2 > -0.1$  si  $K4/K2 > -4/9$  et  $K4/K2 > -D2/K2 - 1$  on observe que les  $S_i$  sont parallèles tels que  $\langle S \rangle = 1$  de sorte que les spins  $\sigma_i$  spins sont antiparallèles ou  $\langle \sigma \rangle = 3/2$ , par conséquent la phase stable obtenue est la phase antiferromagnétique. Sinon, si  $K4/K2 > -1$  et  $K4/K2 > -D2/K2 - 1$ . On peut distinguer que les spins  $S_i$  et  $\sigma_i$  sont tous deux alignés dans la même direction, notamment  $\langle S \rangle = 1$  et  $\langle \sigma \rangle = 3/2$  donc  $\langle \sigma S \rangle = 3/2$  alors que nous avons la phase ferromagnétique  $3/2$  la phase stable.

Le troisième cas a fait faire  $D1=D2=D$ , figure3, donc on dessine le diagramme  $K4$  selon le champ cristallin D tel que :

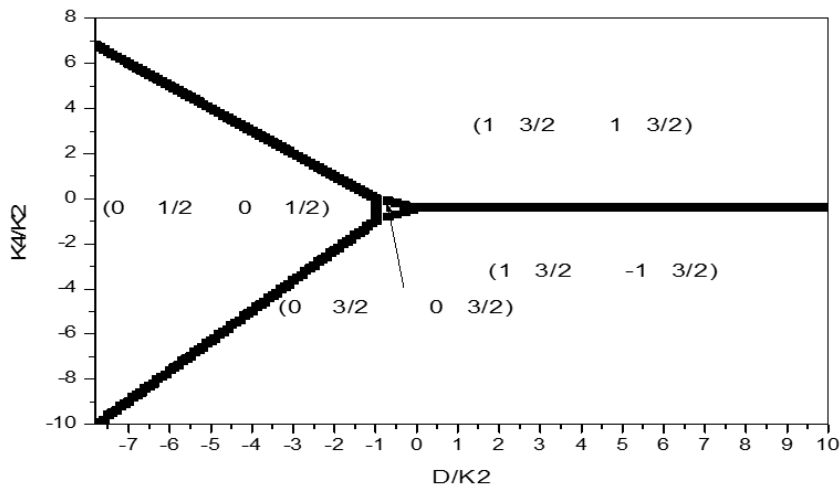


Figure III.3 : Diagramme de phase de l'état fondamental dans le cas  $D1 = D2 = D$

- Pour  $\frac{K_4}{K_2} > -\frac{12 D}{9 K_2} - \frac{12}{9} \text{ et } \frac{K_4}{K_2} > -0.4$ . Nous avons  $\langle \sigma \rangle = 3/2$ ,  $\langle S \rangle = 1$  et  $\langle \sigma S \rangle = 3/2$  donc  $\langle \sigma \rangle = \langle \sigma S \rangle$  tels que les spins  $\sigma_i$  et  $S_i$  sont tous deux parallèles, alors nous avons la phase de Baxter  $3/2$  appelée phase de Baxter ferromagnétique (la phase stable).
- Pour  $\frac{K_4}{K_2} < \frac{4 D}{9 K_2} - \frac{4}{9}$  et  $\frac{K_4}{K_2} < -0.4$ ; dans cette partie du diagramme, nous voyons que les spins  $\sigma_i$  sont parallèles, de sorte que les spins  $S_i$  sont antiparallèles, cela signifie que nous avons une phase de Baxter antiferromagnétique toujours la phase de Baxter ( $3/2$ ).
- Pour  $\frac{K_4}{K_2} < -\frac{12 D}{9 K_2} - \frac{12}{9}$  et  $\frac{K_4}{K_2} > \frac{12 D}{9 K_2} + \frac{4}{9}$  dans cette région, nous avons  $\langle \sigma \rangle = 1/2$  et  $\langle S \rangle = 0 = \langle \sigma S \rangle = 0$ , donc la phase ici est la phase symbolisée par car les spins  $S_i$  sont égaux à zéro et les spins  $\sigma_i$  parallèles désignent la phase  $1/2$ .

- Pour la zone que l'on remarque dans le diagramme de phase qui est spécifique par les équations :  $\frac{K_4}{K_2} > \frac{4}{9} \frac{D}{K_2} - \frac{4}{9}$  et  $\frac{K_4}{K_2} < -\frac{4}{9} \frac{D}{K_2} - \frac{4}{9}$  et si  $D = -I$  nous avons les spins  $\langle S \rangle = 0$  et  $\langle \sigma \rangle = 3/2$ , tels que  $S_i$  sont égaux à zéro  $\sigma_i$  sont parallèles, finalement nous obtenons la phase est la phase  $\sigma=3/2$  qu'ils n'existent ni dans le cas de spin-  $1/2$  mixte [5], ni dans le Ashkin-Teller pour le spin- $3/2$  [6].

## 2. Simulation de Monte Carlo

Dans notre travail, pour déterminer les propriétés magnétiques du modèle Ashkin-Teller pour des températures non nulles, nous utilisons des simulations de Monte Carlo mises en œuvre avec l'algorithme de Metropolis avec des conditions limites périodiques pour mettre à jour les configurations du réseau.

Nous considérons un réseau carré en deux dimension (2D) de taille  $L \times L$  qui contient  $N = L^2$  sites. Nous avons effectué les simulations pour une taille de système  $L=30$ . Nous avons effectué des simulations pour certaines valeurs des paramètres  $K_4$ ,  $D_1$  et  $D_2$  en utilisant  $P=100000$  pas de Monte Carlo après avoir écarté les 20000 premiers MCS pour l'équilibre thermique. D'abord les magnétisations du système sont données par la formule :

$$|M_\alpha| = \langle |M_\alpha| \rangle = \frac{1}{N_P} \sum_c \sum_i \alpha_i(c) \quad 3.3$$

Où  $i$  désigne les sites du réseau et  $c$  les configurations du système obtenues. Le réseau est mis à jour par un balayage des  $N$  spins (étape de Monte Carlo) après que le système ait atteint l'équilibre technique.

La relation de susceptibilité magnétique est donnée par :

$$\chi_\alpha = \frac{N}{K_B T} (\langle M_\alpha^2 \rangle - \langle |M_\alpha| \rangle^2) \quad 3.4$$

Avec  $\alpha = \sigma, S, \sigma S$

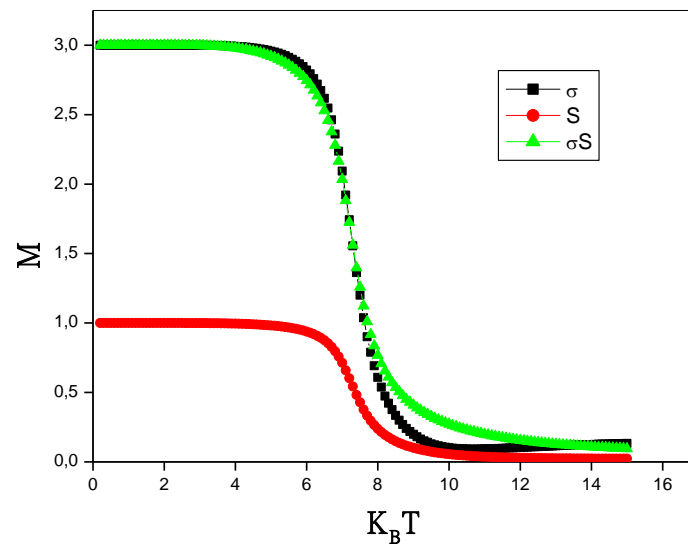
Et le cumulants du binder étant donné par :

$$U_\alpha = 1 - \frac{\langle M_\alpha^4 \rangle}{3 \langle M_\alpha^2 \rangle^2} \quad 3.5$$

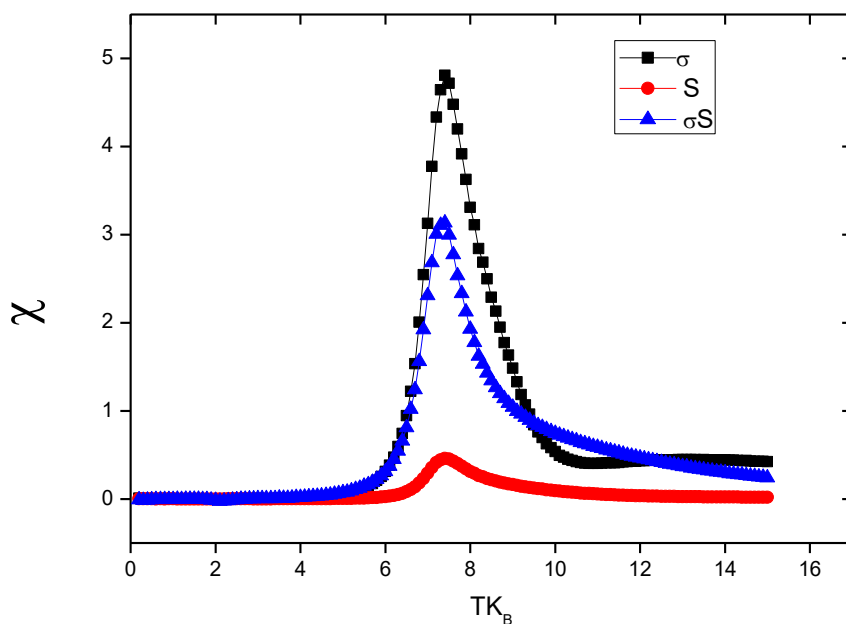
Les erreurs sont calculées à partir de la méthode de blocage.

### 3. Résultats et discussions

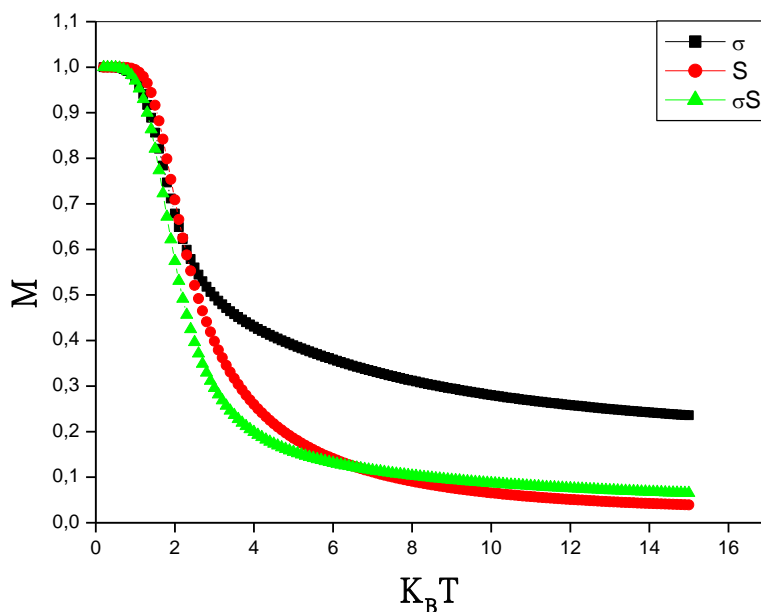
On obtient le comportement d'aimantation en fonction de la température ainsi que les sensibilités du système étudié pour les différentes valeurs des paramètres de couplage ; Nous avons tous les paramètres des axes (x) qui peuvent être pris comme diviseur de  $K_2$ .



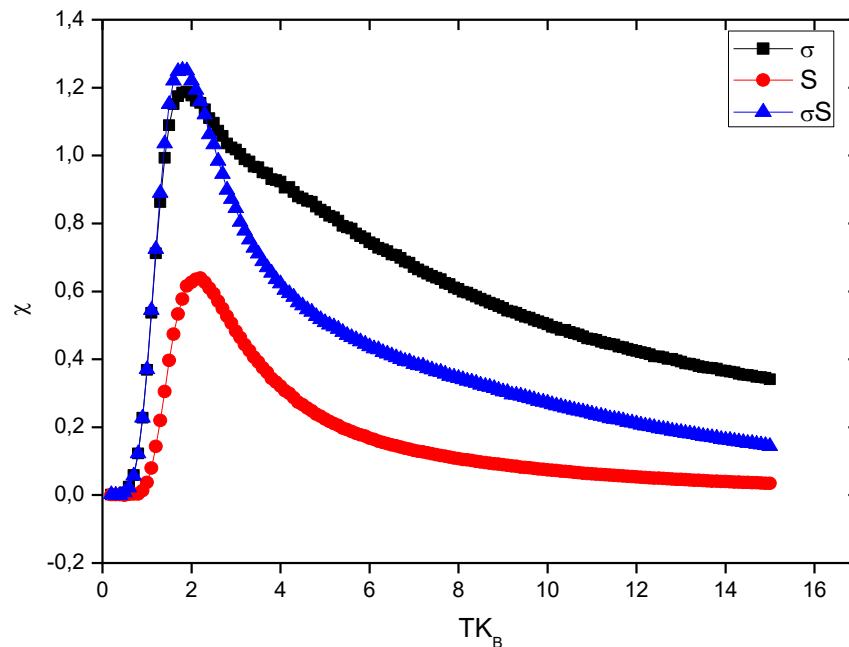
**Figure III.4 :** La magnétisation (les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec la taille  $L = 30$ , avec le champ cristallin  $D_1 = 0$  ; nous prenons  $K_4 = 1$  et pour  $D_2 = 6$ . Un comportement continu est observé signalant une transition de second ordre.



**Figure III.5 :** La susceptibilité (les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec la taille  $L = 30$ , avec le champ cristallin  $D1 = 0$  ; nous prenons  $K4 = 1$  et pour  $D2 = 6$  associé à la magnétisation de figure III.4.



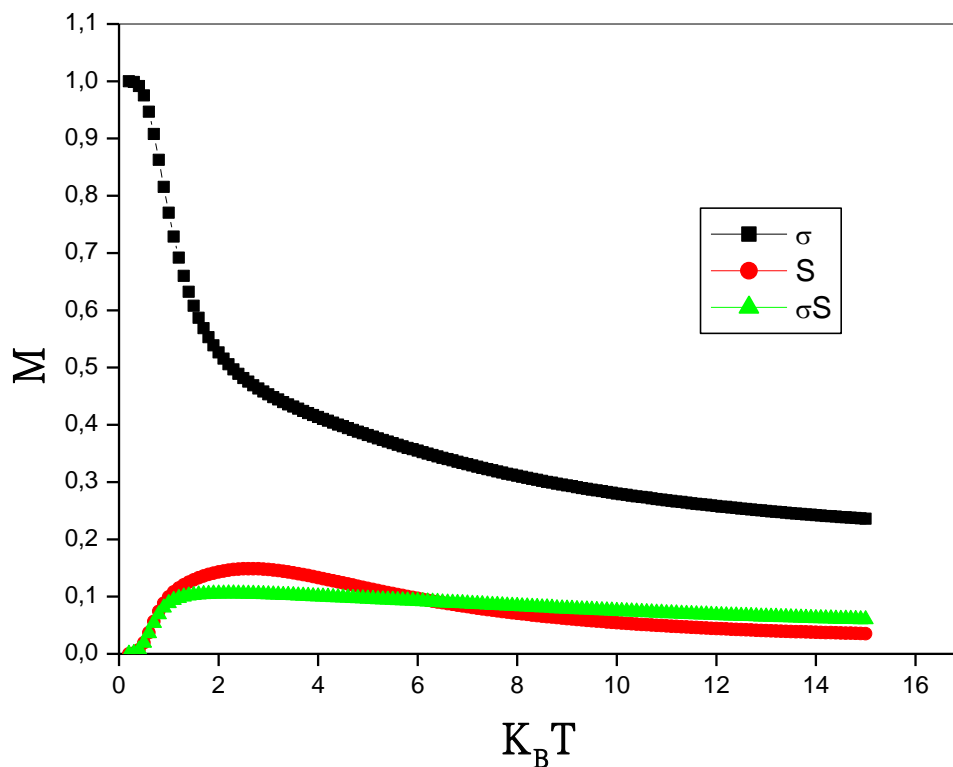
**Figure III.6 :** La magnétisation (les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec la taille  $L = 30$ , avec le champ cristallin  $D1 = 0$  ; nous prenons  $K4 = 1$  et pour  $D2 = -6$ . Un comportement continu est observé signalant une transition de second ordre.



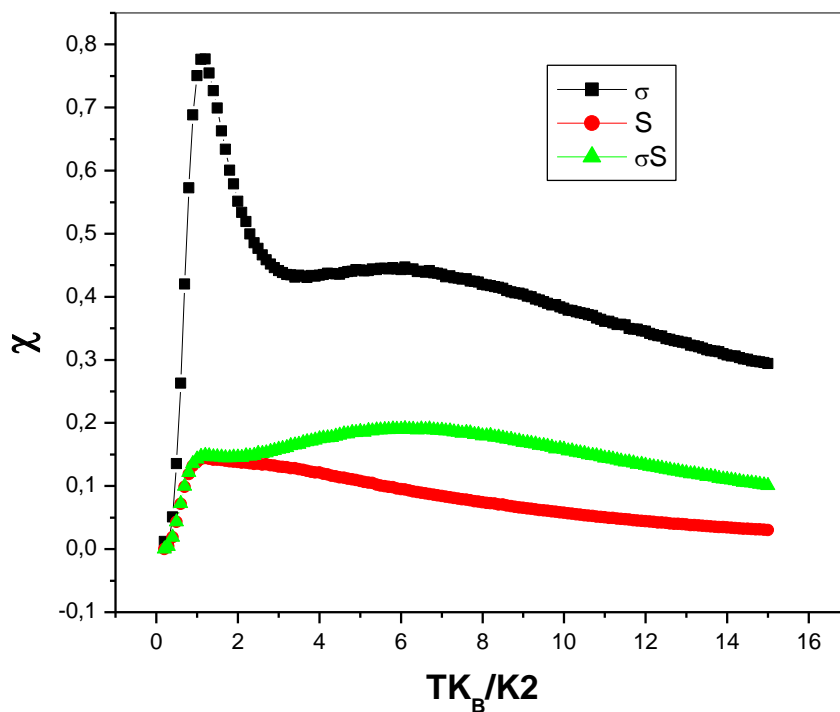
**Figure III.7 :** La susceptibilité (les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec la taille  $L = 30$ , avec le champ cristallin  $D1 = 0$  ; nous prenons  $K4 = 1$  et pour  $D2 = -6$

Comme le montre la figure III.4 et III.5 et nos résultats MC montrent à basse température une phase ferromagnétique de Baxter  $(S_1\sigma_1 S_2\sigma_2) = (1 \ 3/2 \ 1 \ 3/2)$  avec  $\langle \sigma S \rangle = 3/2$  et une phase ferromagnétique de Baxter  $(1 \ 1/2 \ 1 \ 1/2)$  avec  $\langle \sigma S \rangle = 1/2$  (Figure III.6 et III.7) comme attendu à partir du diagramme de phase à  $T=0$  (Figure III.1), où nous trouvons une nouvelle phase partiellement ordonnée  $\langle \sigma S \rangle$  identifiée par  $\langle \sigma \rangle = 0$ , et  $\langle \sigma S \rangle \neq 0$ . Pour des températures élevées dans les deux cas, le système devient désordonné. La température de transition critique est estimée à partir du maximum de la susceptibilité associée aux différentes aimantations.

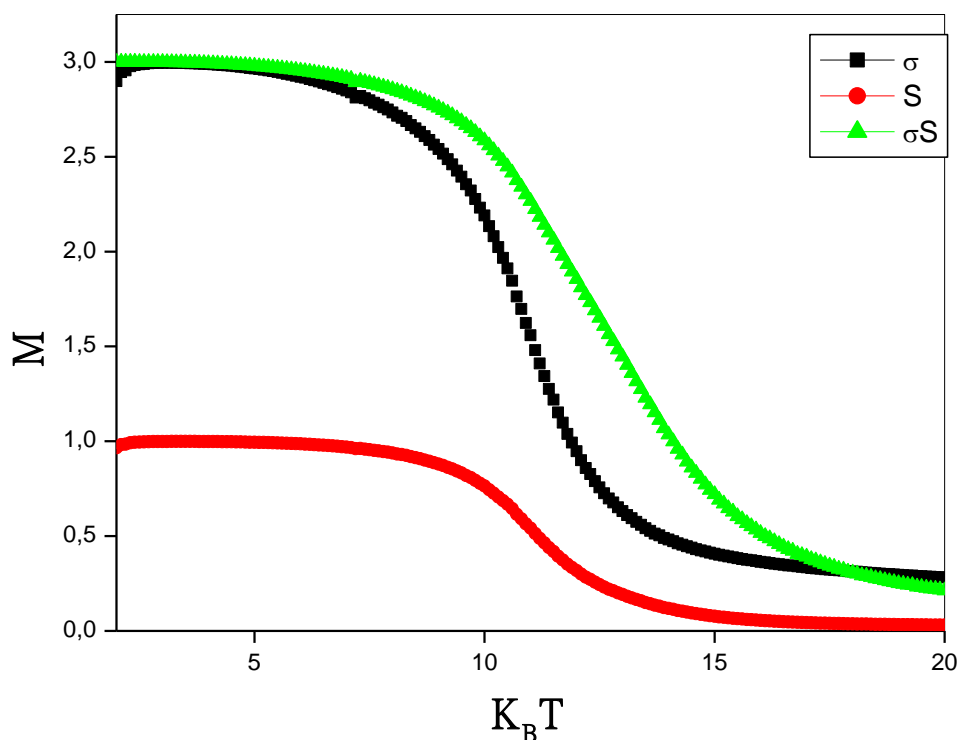
Nous avons trouvé pour à partir de figure III.5  $T_c = 7.39$  et pour le cas où la figure III.7  $T_c = 1.89$ . De plus, la transition entre les phases mentionnées est toujours de second ordre en raison de la continuité des paramètres d'ordre à travers la ligne de transition.



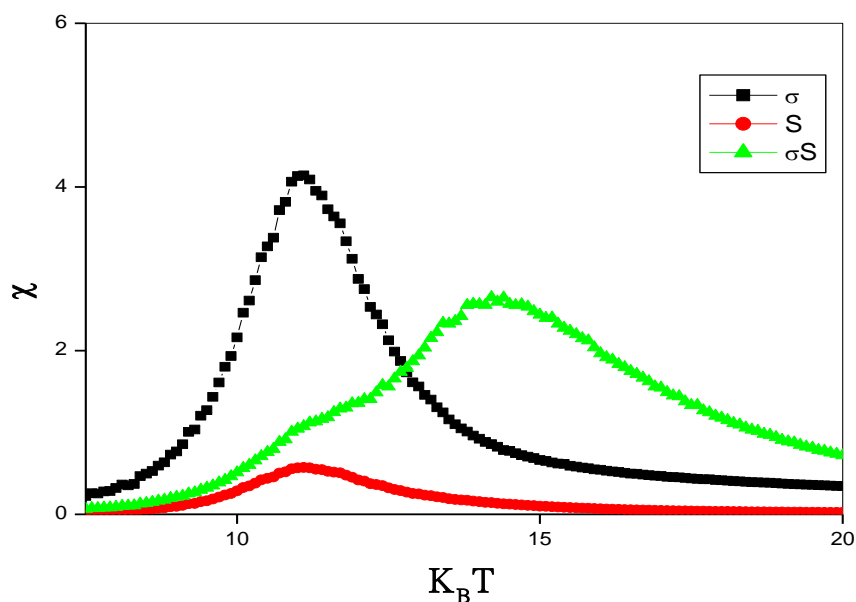
**Figure III.8 :** Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1 = D2 = D$ ,  $K4 = 1$ ,  $D = -6$



**Figure III.9 :** Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1=D2 = D$ ,  $K4 = 1$ ,  $D = -6$ .



**Figure III.10 :** Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1 = D2 = D$ ,  $K4 = 3$ ,  $D = -2$  un ordre partiel est observé à haute température.



**Figure III.11 :** Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ , avec un champ cristallin  $D1 = D2 = D$ ,  $K4 = 3$ ,  $D = -2$  un ordre partiel est observé à haute température.



Dans la figure III.8 et la figure III.9 à basse température nous avons  $\langle \sigma \rangle = 1/2$ ,  $\langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$  correspond à la phase  $(0 \ 1/2 \ 0 \ 1/2)$ . Mais à haute température le système subit une transition vers la phase paramagnétique.

Pour le deuxième cas telle que les figures III.10 et III.11 qui prennent  $D = -2$  et  $K4 = 3$ , l'état fondamental est la phase ferromagnétique de Baxter  $(1 \ 3/2 \ 1 \ 3/2)$ . Le tracé de susceptibilité (figure III.11) montre un pic correspondant à  $\langle \sigma \rangle$  et à la température critique  $T_{C1} = 11,09$  ; en revanche, la susceptibilité correspondant à  $\langle \sigma S \rangle$  montre un pic distinct à la température de transition  $T_{C2} = 14,19$ , définissant clairement une phase partiellement ordonnée  $\langle \sigma S \rangle$  à haute température séparant la phase désordonnée de la phase de Baxter.

Le diagramme de phase de la figure III.12 montre les phases stables à différentes températures dans le plan  $(D2/K2, T/K2)$  dans le cas  $D1 = 0$  pour le paramètre de couplage  $K4 = 1$ . Nous avons constaté que pour de faibles valeurs de  $D2/K2$ , deux phases sont séparées par une ligne de transition de premier ordre. Ceci est illustré dans la figure III.15. La vérification de la nature de la transition de phase est déterminée par la discontinuité ou la continuité des paramètres d'ordre [6]. Les deux phases sont : ferromagnétique Baxter  $1/2$  et ferromagnétique Baxter  $3/2$ . La première phase  $\langle \sigma \rangle = 1/2n$  n'a pas été trouvée pour ce modèle ATM avec un spin- $1/2$  [5] ni dans le modèle Ashkin Teller avec un spin- $3/2$  [6]. A haute température, une transition de second ordre vers la phase de désordre paramagnétique se produit. Le modèle ferromagnétique de Baxter- $3/2$  est stable pour de grandes valeurs de  $D2/K2$ .

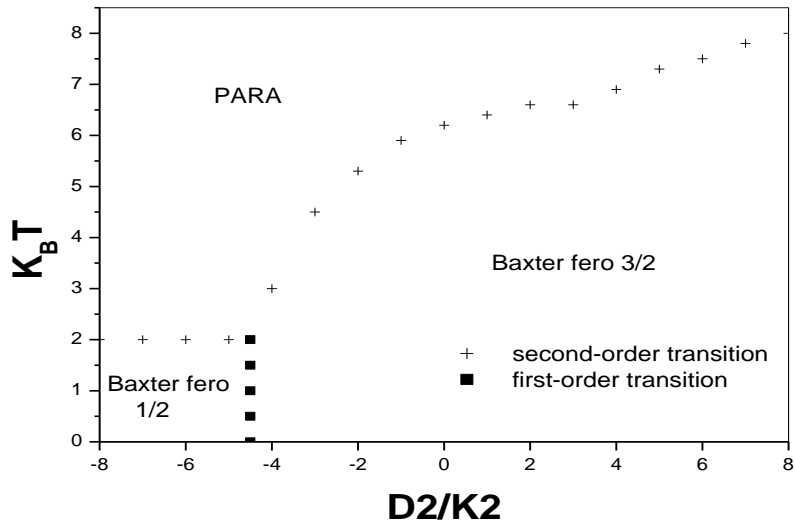


Figure III.12 : Diagramme de phase dans le plan " $D2/K2 ; T/K2$ " pour  $K4 = 1$  par simulation MC avec  $L = 30$ .

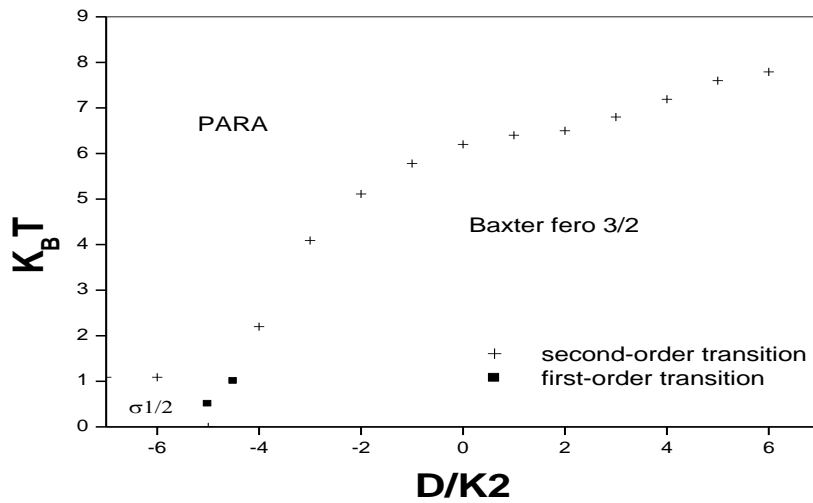
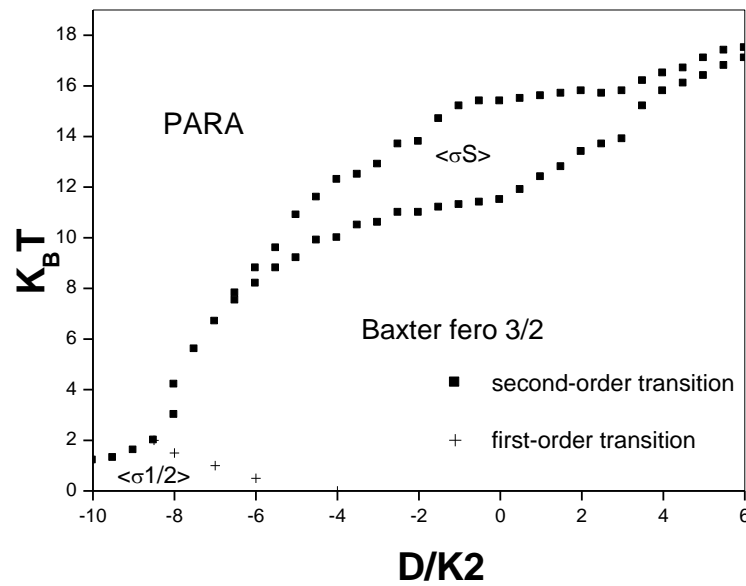


Figure III.13 : Diagramme de phase dans le plan " $D/K2 ; T/K2$ " pour  $K4 = 1$  par simulation MC avec  $L = 30$ .



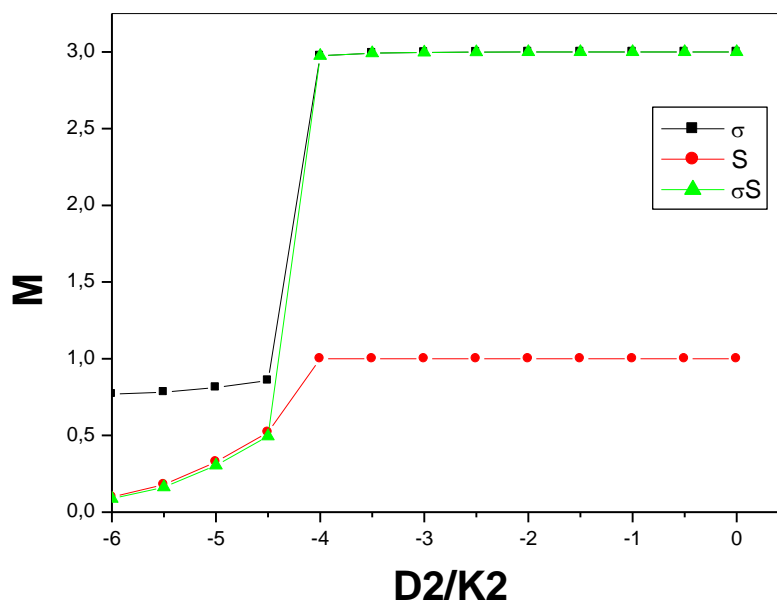
**Figure III.14 :** Diagramme de phase dans le plan " $D/K2 ; T/K2$ " pour  $K4 = 3$  par simulation MC avec  $L = 30$

Dans la Figure III.13 nous traçons le diagramme de phase dans le plan  $(T/K2, D/K2)$ . Nous avons trouvé la forme similaire du diagramme de phase comme dans la Figure III.12 sauf que la basse température et le bas  $D$  la phase est maintenant  $\langle \sigma \rangle = 1/2$  phase avec une première ligne de transition vers le ferromagnétique Baxter  $3/2$  pour des grandes valeurs de  $D$ . Nous notons également que la phase  $\sigma-1/2$  n'a pas été trouvée dans le modèle d'Ashkin-Teller pour le spin- $3/2$  [6].

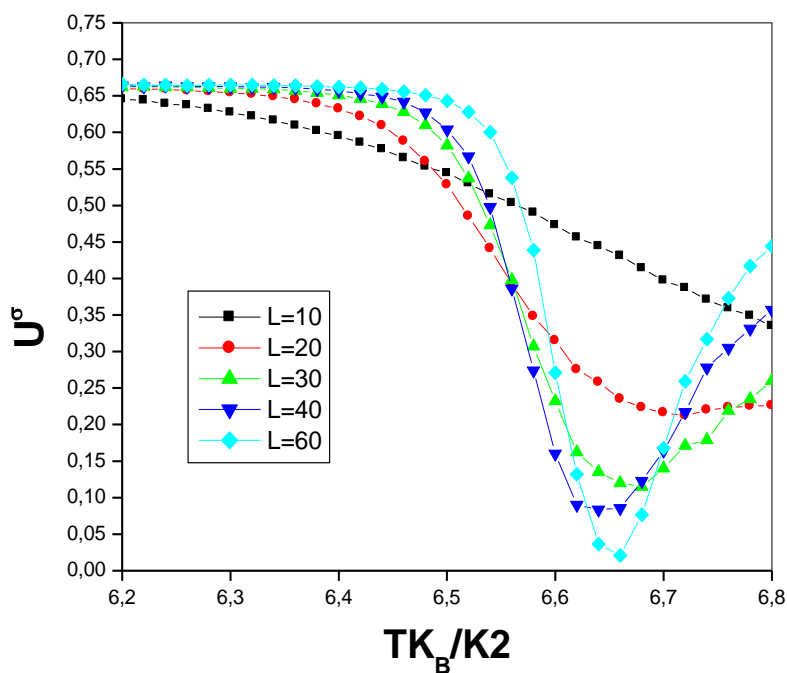
De plus, lorsque la valeur du paramètre de couplage de quatre composantes est augmentée  $K4=3$  pour le cas  $D1=D2=D$  avec l'augmentation des valeurs de  $D$ , dans la figure III.14 nous avons trouvé la phase partiellement ordonnée  $\langle \sigma S \rangle$ , Ceci est illustré aux figures.III.10 et III.11, entre la phase ordonnée de Baxter ferromagnétique  $3/2$  et la phase paramagnétique désordonnée à haute température. Ces phases ont été illustrées dans les cas précédents (Fig.III.12, Fig.III.13). Cette nouvelle phase  $\langle \sigma S \rangle$  a également été trouvée dans le modèle Ashkin-Teller mixte de spin- $1/2$  [5] mais pas dans l'Ashkin-Teller pour le spin- $3/2$  [6]. En diminuant le champ cristallin  $D$ , nous avons trouvé une transition du ferromagnétique de Baxter  $3/2$  à la phase paramagnétique

qui est de type premier ordre. Nous observons également que la même phase  $\langle \sigma^{1/2} \rangle$  que dans la Figure III.13 qui sépare la phase paramagnétique à haute température pour de faibles valeurs de  $D$  par une transition de second ordre, et est séparée avec une phase ferromagnétique de Baxter  $3/2$  par une transition de premier ordre.

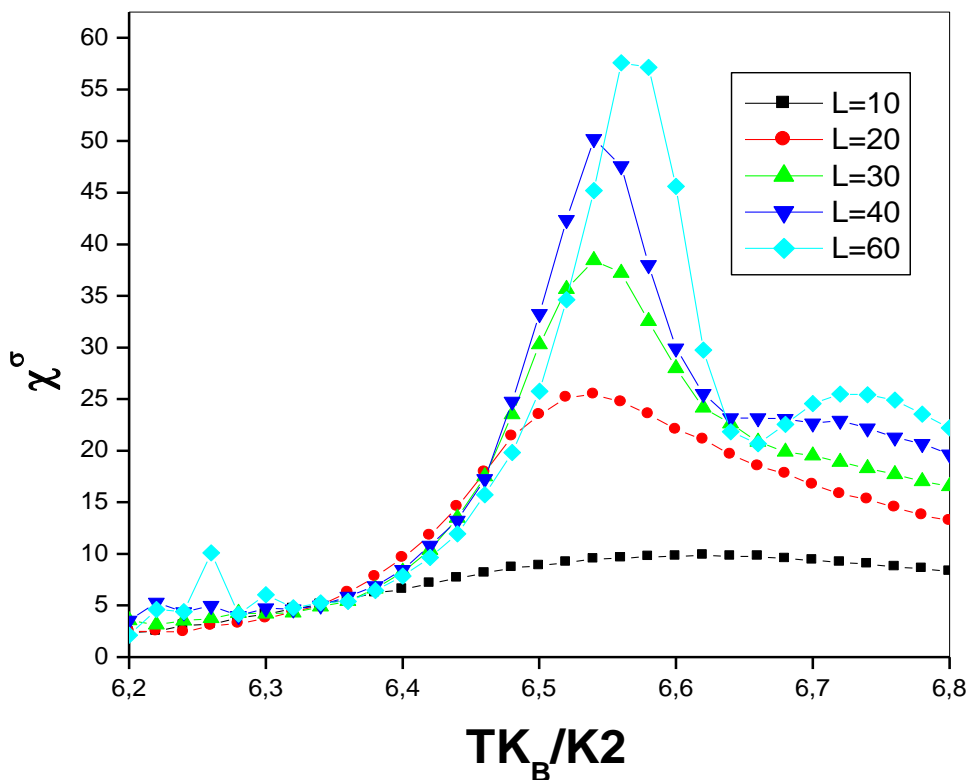
Les points de transition de phase en fonction de la température aux valeurs fixes du couplage  $K4/K2$  ainsi que du champ cristallin  $D2/K2$  ont été pré-localisés à partir des points d'intersection des courbes cumulant de Binder spécifiées par l'équation (3.5) [7]. Nous montrons ces cas pour  $D2/K2=3$  ( $D1=0$ ) pour différentes tailles  $L= (10, 20, 30, 40, 60)$  et les susceptibilités, les aimantations ainsi que les cumulant du Binder en fonction de la température sont tracés dans les figures III.16, III.17, III.18. On remarque que les pics lorsque  $L$  augmente montrent le point de transition, c'est-à-dire la température critique ou le changement de transition de phase. Néanmoins, les courbes de cumulant de Binder dont les figure III.16, III.17 et III.18 montres qu'il existe un point d'intersection définissant la température critique sachant que  $T_c=6.55$ . Second ordre est de type Ising, ce qui a également montré le modèle ferromagnétique isotrope Ashkin Teller.



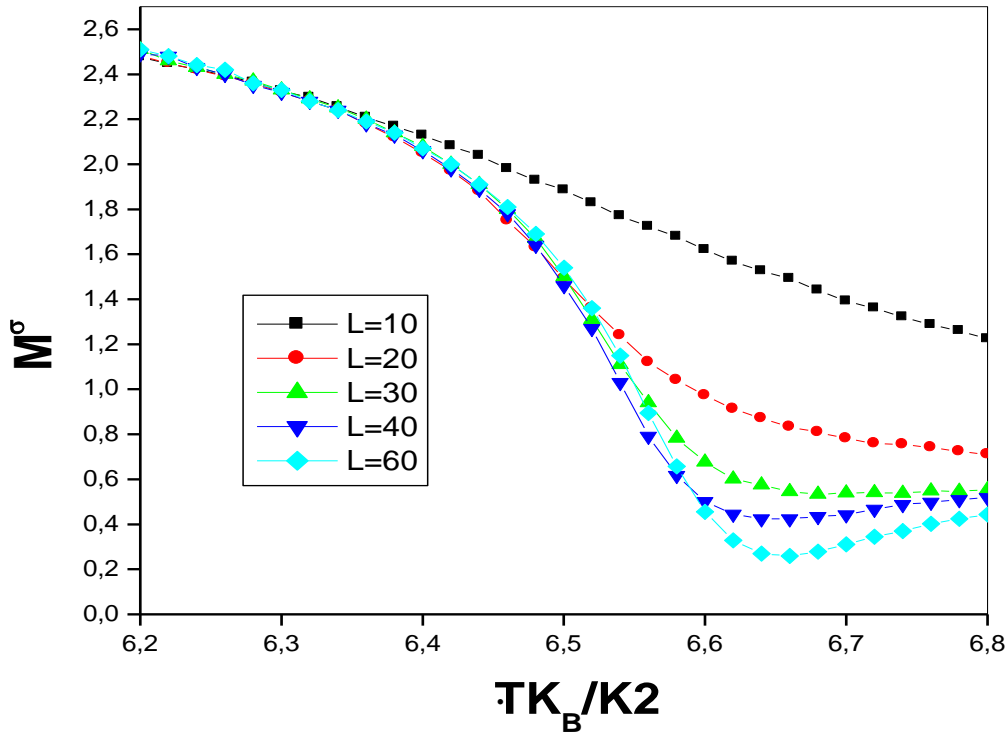
**Figure III.15 :** Aimantation (les paramètres  $\sigma$ ,  $S$ ,  $\sigma S$ ) en fonction de la température pour un système de taille  $L = 30$  avec  $T = 1$ .



**Figure III.16 :** Variation de cumulant de Binder pour différents choix de la taille  $L$  en fonction de la température dans le cas  $K4/K2 = 1$  et  $D2/K2=3$  " $D1 = 0$ " pour le paramètre d'ordre  $\sigma$ .



**Figure III.17 :** Variation de de la susceptibilité pour différents choix de la taille  $L$  en fonction de la température dans le cas  $K4/K2 = 1$  et  $D2/K2 = 3$  " $D1 = 0$ " pour le paramètre d'ordre  $\sigma$ .



**Figure III.18 :** Variation de l'aimantation pour différents choix de la taille  $L$  en fonction de la température dans le cas  $K_4/K_2 = 1$  et  $D_2/K_2 = 3$  " $D_1 = 0$ " pour le paramètre d'ordre  $\sigma$

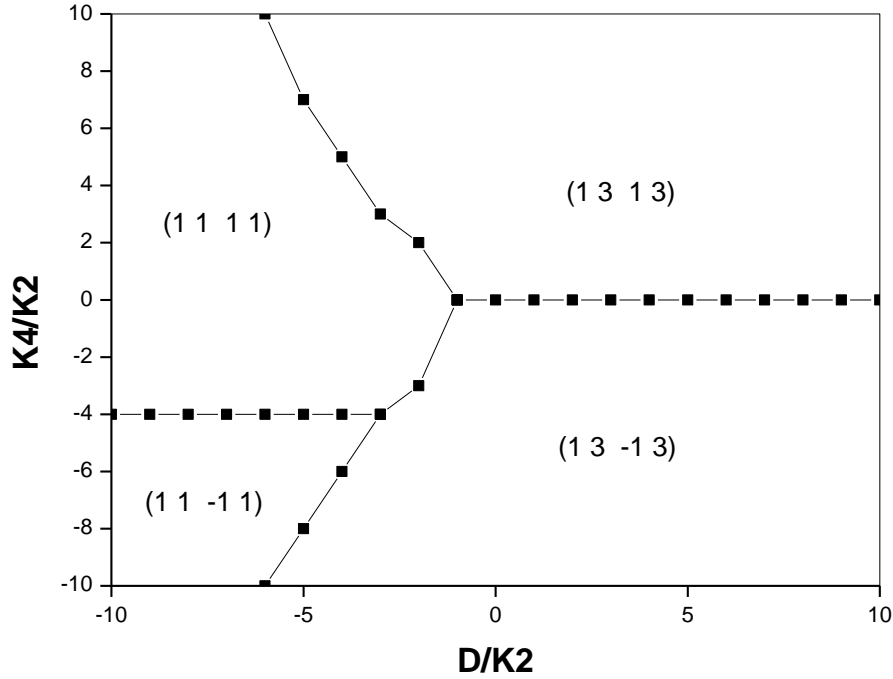
### Partie B : Modèle Ashkin Teller à spin mélangés ( $s=1/2$ , $\sigma=3/2$ )

#### 1. Diagramme de phase à l'état fondamental

Dans cette situation, nous examinons le modèle d'Ashkin-Teller dans le cas de spins mixtes  $\sigma=3/2$  et  $S=1/2$ . Nous étudions ce cas sous l'effet de différents champs cristallins. Ainsi, ce modèle est représenté par l'hamiltonien suivant :

$$H = -K_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i \sigma_j + S_i S_j) - K_4 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j S_i S_j - D \sum_i \sigma_i^2 \quad 3.6$$

Où les valeurs des variables  $\sigma_i$  et  $S_i$  sont respectivement  $(\pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2})$  et  $(\pm \frac{1}{2})$ , et sont localisées sur les sites d'un réseau cubique ;  $\langle i, j \rangle$  désigne une paire de spins voisins les plus proches. D'autres termes ont déjà été définis dans la partie 1 (1,3/2).



**Figure III.19** : Diagramme de phase de l'état fondamental

Selon les valeurs contenant les variables  $S_i$  et  $\sigma_i$ , nous extrayons 64 correspond à  $(2^2 \times 4^2)$  configurations possibles pour l'état fondamental à  $T=0$ . En utilisant les configurations de symétrie, ce nombre se réduit à 13 configurations. Pour chaque ensemble de paramètres :  $K_2$ ,  $K_4$  et  $D$ , nous sélectionnons la configuration dont l'énergie  $E_p$  est minimale.

$$E_p = -\frac{K_2}{4} (\sigma_1 \sigma_2 + S_1 S_2) - \frac{K_4}{16} (\sigma_1 \sigma_2 S_1 S_2) - \frac{D}{8} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \quad 3.7$$

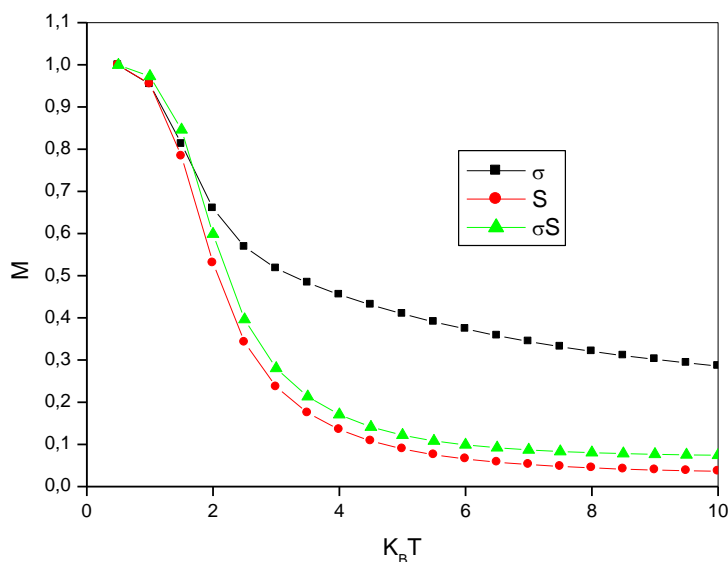
Cela conduit au diagramme de phase dans l'état fondamental ( $T = 0$ ). Les différentes phases seront données sous la forme  $(S_1 \sigma_1 ; S_2 \sigma_2)$ . Dans ce qui suit, nous considérons différentes situations en fixant un paramètre et en faisant varier les autres (les derniers seront normalisés par  $K_2$ ). Dans la figure III.19, nous traçons le diagramme de phase en faisant varier le paramètre  $K_4/K_2$  en fonction de  $D/K_2$ .

Ce diagramme est riche à 4 phase stable correspond à deux phases représente les phases ferromagnétiques car les spins  $S_i$  et  $\sigma_i$  sont parallèles et cela avec des valeurs plus élevées de  $K_4/K_2$  le premier pour  $\frac{K_4}{K_2} > -4$  telle que des valeurs négatives de  $D/K_2$  et l'autre dans la région où  $\frac{K_4}{K_2} > 0$  mais pour des valeurs positives de  $D/K_2$ , les autres phases sont situées à

l'inférieure des frontières cité respectivement bien que ces phases soient des phases antiferromagnétiques parce que les spins  $S_i$  sont antiparallèles.

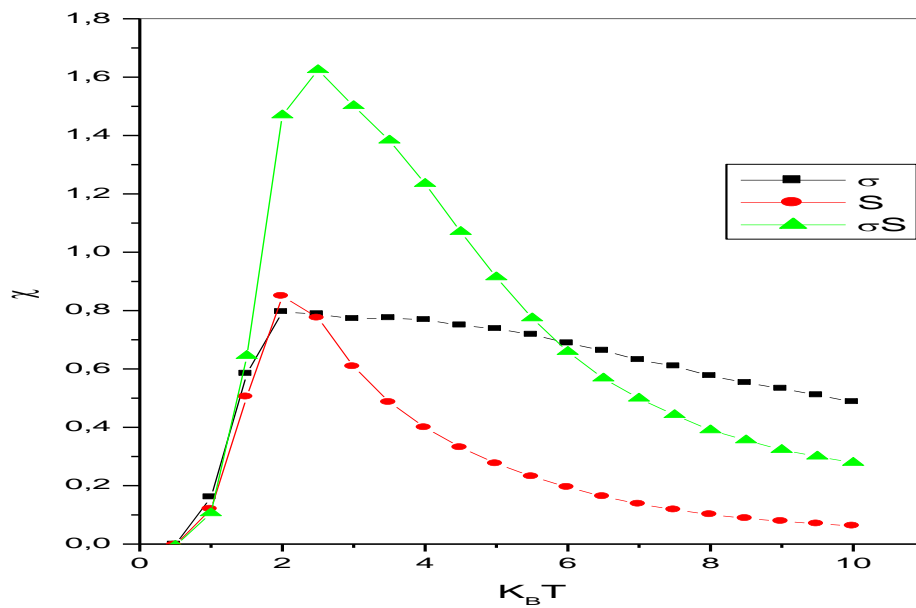
## 2. Simulation de Monte Carlo

Nous considérons maintenant comme précédemment un réseau carré en deux dimension (2D) de taille  $L \times L$  qui contient  $N = L^2$  sites. Nous avons effectué les simulations pour une taille de système  $L=30$ . Nous avons effectué des simulations pour certaines valeurs des paramètres  $K_4$ ,  $D$  en utilisant  $P=100000$  pas de Monte Carlo après avoir écarté les 20000 premiers MCS pour l'équilibre thermique et on va traiter les magnétisations et les susceptibilités.

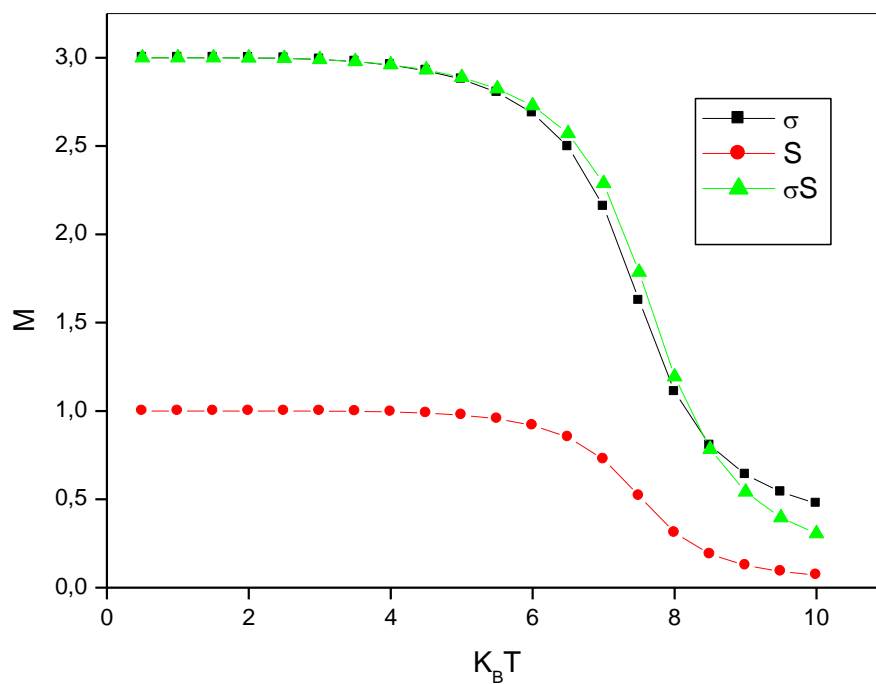


**Figure III.20 :** Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  ( $D=-9$  et  $K_4=3$ ).

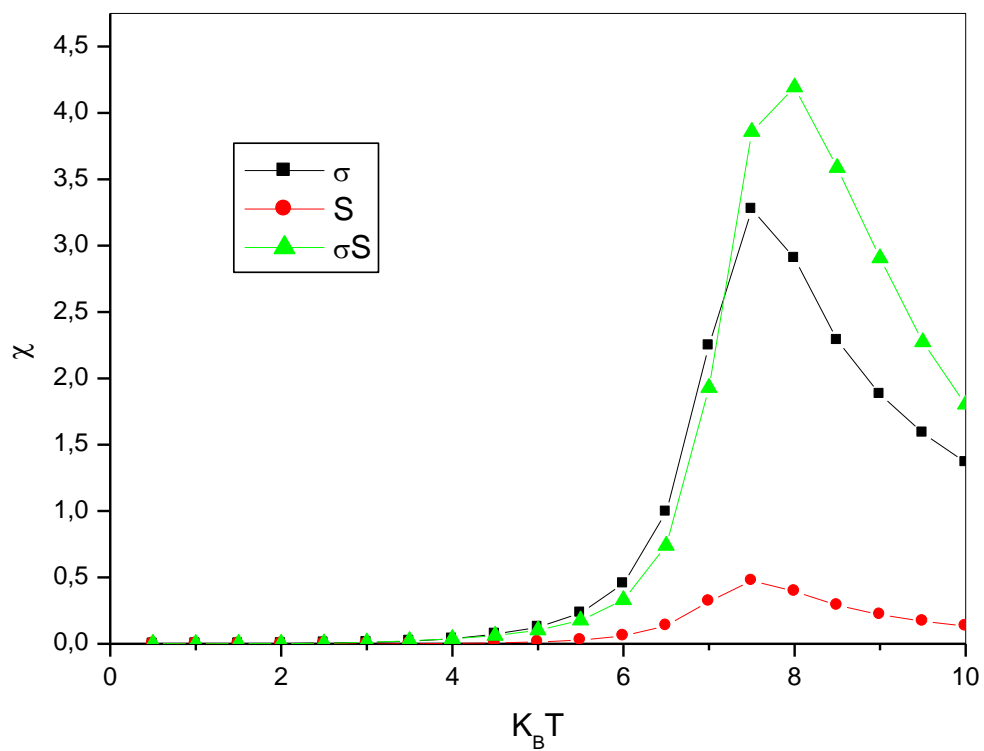




**Figure III.21 :** Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  associée à l'aimantation (figure 20) ( $D=-9$ ).



**Figure III.22 :** Aimantation (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  ( $D=4$  et  $K4=3$ ).



**Figure III.23 :** Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$ .

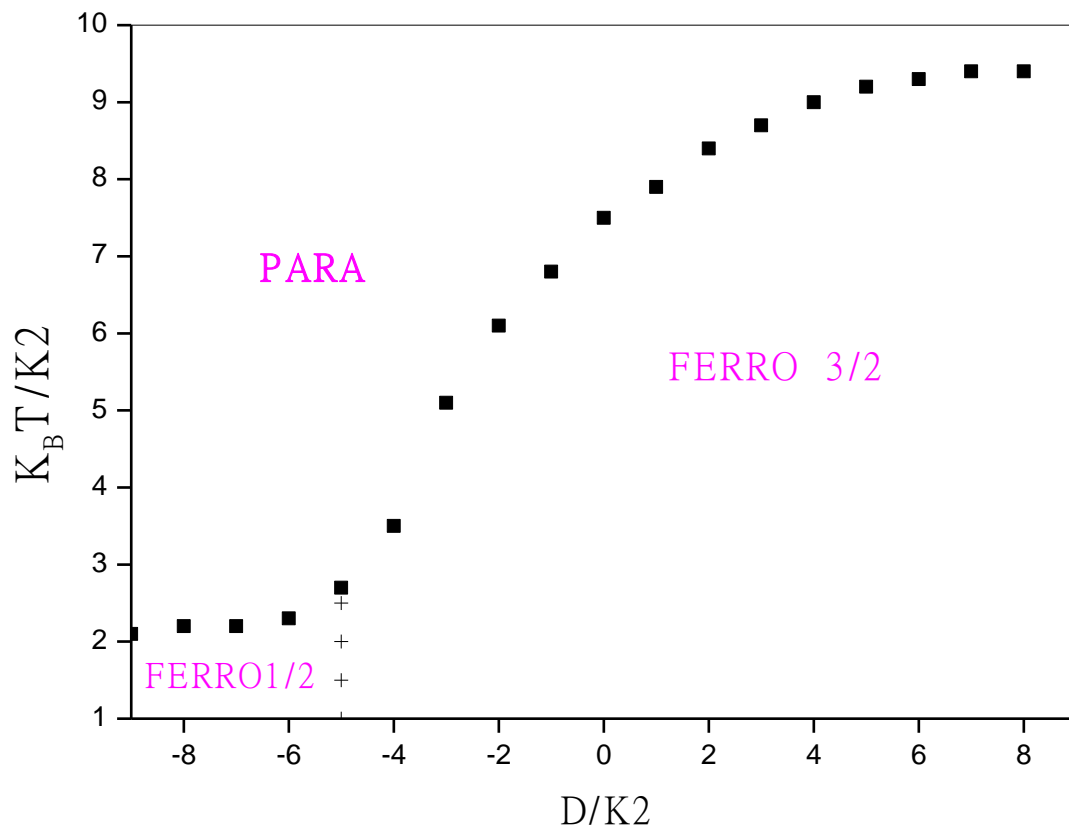


Figure III.24 : Diagramme de phase dans le plan " $D_2/K_2 ; T/K_2$ " pour  $K_4 = 3$  par simulation MC avec  $L = 30$ .

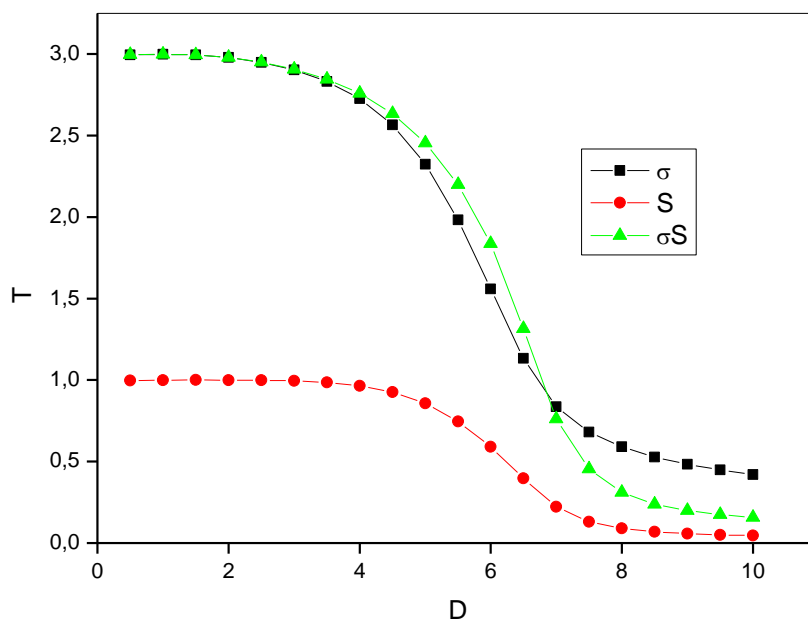


Figure III.25 : Aimantation (pour les paramètres  $\sigma ; S ; \sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$  ( $D = -7$  et  $K_4 = 6$ ).

Dès lors comme précédemment dans le cas des spins  $(1,3/2)$ , nous avons obtenu le développement de la magnétisation en fonction de la température ainsi que les susceptibilités du système étudié pour différentes valeurs des paramètres de couplage, maintenant Comme indiqué sur les figures (III.20, III.21, III.22, III.23) sachant que nous avons tracé dans le cas  $K4=3$  et  $D=-9$  ainsi que  $D=4$ , les résultats de notre MC à la température basse révèlent une phase de Baxter ferromagnétique  $(S_1\sigma_1S_2\sigma_2)=(1/2\ 1/2\ 1/2\ 1/2)$  premiers cas (figures III.20,III.21) et l'autre cas indique une phase ferromagnétique de Baxter  $(1\ 1/2\ 1\ 1/2)$  avec (figures III.22,III.23) tel que attendu par le diagramme de phase  $T = 0$  (figure III.19). Si bien que le traçage des susceptibilités correspond à leur aimantation pour les deux cas (figures III.22, III.23).

De crainte nous obtenons le diagramme (figure III.24) dans le plan  $(T, D)$  pour  $K4=3$  de sorte qu'il apparaisse comme le diagramme qui montre dans le cas précédent (figure 12). Donc nous avons remarqué que pour de faibles valeurs de  $D/K2$ , deux phases sont séparées par une ligne de transition de premier ordre le premier indique la phase ferromagnétique  $1/2$  et la deuxième phase ferromagnétique  $3/2$ . Les deux se sépare avec une autre phase dite paramagnétique par une transition de second ordre et ça pour des valeurs supérieures de température.

Dans ce contexte, lorsque les valeurs des paramètres de couplage sont augmentées  $K4/K2 = 6$  avec la progression des valeurs de  $D/K2$ . Dans la figure III.27, nous avons trouvé une phase partiellement ordonnée  $\langle\sigma\rangle$ , entre la phase ordonnée de Baxter ferromagnétique  $3/2$  et la phase paramagnétique et peuvent être observés dans la variation de magnétisation ainsi que la susceptibilité dans la situation qu'ils montrés dans les figures III.25, III.26 telle que nous avons traité le cas de  $D=-7$  et  $K4=6$ . bien que nous ayons vue la même explication que le cas précède.

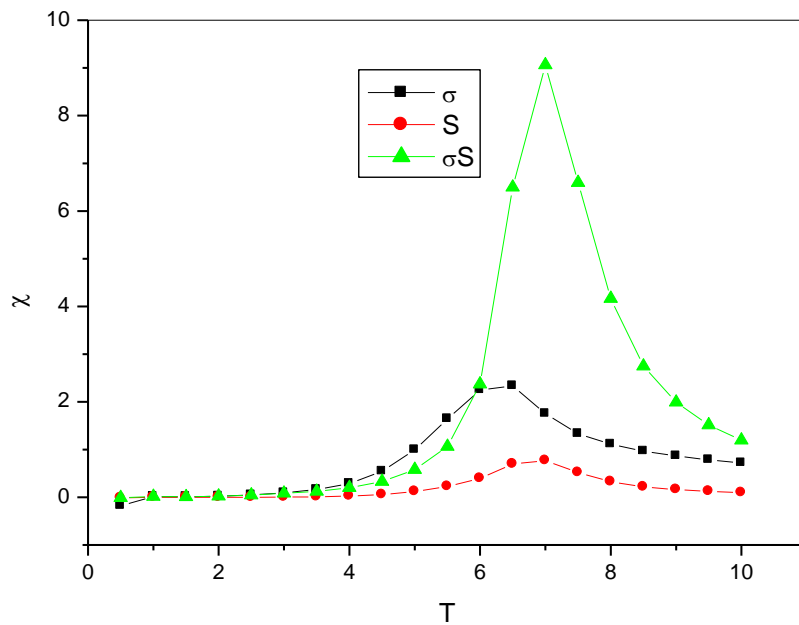


Figure III.26 : Susceptibilité (pour les paramètres  $\sigma$  ;  $S$  ;  $\sigma S$ ) en fonction de la température, avec une taille de système  $L = 30$

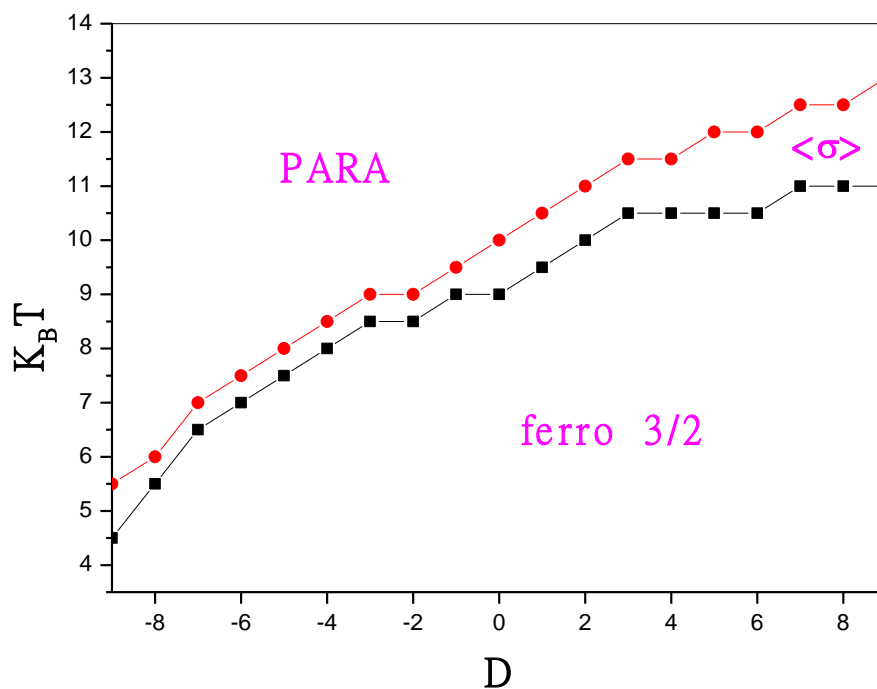


Figure III.27 : Diagramme de phase dans le plan  $T$  ;  $D$  avec  $K4=6$  sous la simulation de MC.

## Références

- [1] SABRI, S., FALAKI, M. EL, YADARI, M. EL, *et al.* Phase transitions of Ising mixed spin 1 and 3/2 with random crystal field distribution. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2016, vol. 460, p. 210-221.
- [2] TUCKER, J. W. Mixed spin 1–spin 3/2 Blume–Capel Ising ferromagnet. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 2001, vol. 237, no 2, p. 215-224.
- [3] LIU, R. M., ZHUO, W. Z., DONG, S., *et al.* Role of further-neighbor interactions in modulating the critical behavior of the Ising model with frustration. *Physical Review E*, 2016, vol. 93, no 3, p. 032114.
- [4] Ashkin J., Teller E., *Phys. Rev.*, 1943, 64, 178.
- [5] BEKHECHI, S., BENYOUSSEF, A., ETTAKI, B., *et al.* Phase transitions in the mixed Ashkin-Teller model. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 2000, vol. 18, no 2, p. 275-282.
- [6] BOUDEFLA, R., BEKHECHI, S., et HONTINFINDE, F. Numerical study of the spin-3/2 Ashkin-Teller model. *arXiv preprint arXiv:1510.06554*, 2015.
- [7] WOJTKOWIAK, Z. et MUSIAŁ, G. Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model. *Physica A: StatisticalMechanics and its Applications*, 2019, vol. 513, p. 104-111.

# Conclusion Générale et perspective

## Conclusion Générale

**N**ous avons introduit dans cette thèse le modèle Ashkin Teller qui est une généralisation du modèle d'Ising à un système à quatre corps. Il peut être considéré comme une superposition de deux modèles d'Ising qui sont couplés par une interaction à quatre spins. Notre objectif était d'explorer le cas  $S=1$  et  $\sigma=3/2$  où le ferromagnétisme a été étudié en plus d'analyser l'effet de différents champs cristallins par la méthode de Monte Carlo. Il joue un rôle très important en mécanique statistique pour comprendre les transitions de phase dans les matériaux magnétiques, ainsi que les propriétés magnétiques dans les machines telles que les ordinateurs, les disquettes de stockage et les disques durs. Cependant l'objectif était d'expliquer l'origine et les mécanismes fondamentaux du magnétisme, une très active recherche applicative a été mise en place pour permettre d'optimiser les prestations des matériaux magnétiques pour des applications industrielles.

Afin de bien décrire les propriétés magnétiques des systèmes typiques d'Ising en mécanique statistique aussi nous avons étudié les caractéristiques principales des transitions de phases dans ces matériaux avec leurs comportements critiques, en somme nous avons pu décrire aussi quelques modèles dans les systèmes Ising et définir la simulation de Monte Carlo. Dans ce cadre, nous avons analysé le modèle d'Ashkin-Teller avec des spins  $(1, 3/2)$  sur un réseau carré sous l'effet de différents champs cristallins et des paramètres de couplage. La première étape de notre étude a été la plus importante de la phase stable dans l'état fondamental (température zéro) dans trois cas de champ cristallin ; le système subit une transition de phase de premier ordre entre ces phases stables. Bien sûr ces diagrammes riches à des phases stables nous avons remarqué que nous avons des phases qui n'existaient pas dans l'ATM spin-1/2.

D'autre part, lorsque la température est non nulle, nous avons traité le modèle Ashkin Teller par la simulation de Monte Carlo. Plus précisément, la méthode Metropolis. Comme résultat, nous trouvons que les valeurs des paramètres de couplage sont fixes et que le champ cristallin varie



avec la variation de la température. Nous avons le diagramme de phase du second ordre qui contient des phases stables telles que la phase de Baxter  $3/2$  ainsi que la phase paramagnétique dans les différents cas de champ cristallin dans l'espace des paramètres ( $K_4/K_2$ ,  $D_1/K_2$ ,  $D_2/K_2$ ,  $D/K_2$ ,  $T/K_2$ ) délimité par des lignes avec plusieurs points critiques. Nous avons donc trouvé une nouvelle phase  $\langle \sigma S \rangle$  dans le diagramme de phase dans l'espace ( $K_4/K_2$ ,  $D/K_2$ ,  $T/K_2$ ). Enfin nous avons vérifié la nature de transition de phase de ce modèle et c'est la transition de phase de second ordre sont de type Ising.

Nous nous sommes dirigés aussi vers l'étude de ce modèle par d'autre façon telle nous changeons les spins ( $1/2, 3/2$ ) ou on a des spins mixtes toujours par la méthode de Monte Carlo, ici nous constatons d'abord le diagramme de phase à l'états fondamentale ( $T=0$ ) qui est riche en phase stable sépare entre eux par des lignes des premier ordre, ensuite nous avons vérifié une nouvelle phase dite  $\langle \sigma \rangle$  mais pour température élevée avec des variation de paramètres de champ cristallin et le paramètre de couplage à quatre composante.

Enfin, nous avons vu l'importance de ce modèle en mécanique statistique et l'utilisation dans l'étude des matériaux magnétique puisqu'il est riche par son comportement critique. Ainsi qu'il est utilisé pour déterminer les limites thermodynamiques dans ce contexte.

Comme perspective il y a plusieurs études à faire :

- ✓ Modèle Ashkin Teller sous le spin  $3/2$  sous l'effet de champs transverse.
- ✓ Utilisant quelque méthode pour résoudre les problèmes de ce modèle telle que le modèle Ashkin Teller à 3 dimensions.

## Résumé

Afin d'étudier la nature des transitions de phase dans les systèmes magnétiques, le but de notre recherche est d'explorer les états  $S=1$  et  $\sigma=3/2$  où le ferromagnétisme ainsi que l'influence de différents champs cristallins seront étudiés par la méthode de Monte Carlo de Le modèle Ashken-Teller qui est un couplage de deux modèles Ising avec un paramètre à quatre corps. Nous avons donné quelques définitions théoriques liées à la transition de phase ainsi que les types de magnétisme aussi les modèles de spin et la méthode de simulation. D'abord, nous identifions les phases les plus stables dans les diagrammes de phases à la température  $T=0$  par minimisation d'énergie. Ensuite Pour des températures plus élevées, on retrouve des diagrammes de phases riches en phases ordonnées : une phase Baxter  $3/2$  et une phase Baxter  $1/2$  ainsi qu'une phase  $\langle S \rangle$  qui n'apparaît ni en spin 1 ni en spin  $3/2$  ATM, et enfin, a  $\langle \sigma \rangle = 1/2$  phases avec des transitions de 1er et 2ème ordre.

**Mots clés :** Modèle d'Ising, Modèle d'Ashkin-Teller, spin-1, spin-3/2, Monte Carlo.

## Abstract

In order to study the nature of phase transitions in magnetic systems, the aim of our research is to explore the  $S=1$  and  $\sigma=3/2$  states where the ferromagnetism as well as the influence of different crystal fields will be studied by the Monte Carlo method of The Ashken-Teller model which is a coupling of two Ising models with a four-component parameter. We have given some theoretical definitions related to the phase transition as well as the types of magnetism also the spin models and the simulation method. First, we identify the most stable phases in the phase diagrams at temperature  $T=0$  by energy minimization. Then For higher temperatures, we find phase diagrams rich in ordered phases: a  $3/2$  Baxter phase and a  $1/2$  Baxter phase as well as a  $\langle S \rangle$  phase that appears neither in spin 1 nor in spin  $3/2$  ATM, and finally, a  $\langle \sigma \rangle = 1/2$  phases with 1st and 2nd order.

**Key words:** Ising model, Ashkin-Teller model, spin-1, spin-3/2, Monte Carlo.

## الملخص

من أجل دراسة طبيعة انتقالات الطور في الأنظمة المغناطيسية، فإن الهدف من بحثنا هو استكشاف الحالات  $S = 1$  و  $\sigma = 3/2$  حيث سيتم دراسة المغناطيسية الحديدية بالإضافة إلى تأثير الحقول البلورية المختلفة بواسطة طريقة Monte Carlo تقدم طريقة نموذج Ashken-Teller، وهو اقتران من نموذجين Ising مع معاملاً مكوناً من أربع مكونات. لقد قدمنا بعض التعريفات النظرية المتعلقة بمرحلة الانتقال بالإضافة إلى أنواع المغناطيسية ونماذج الدوران وطريقة المحاكاة. أولاً، نحدد المراحل الأكثر استقراراً في مخططات الطور عند درجة الحرارة  $T = 0$  عن طريق تقليل الطاقة. بالنسبة لدرجات الحرارة المرتفعة، نجد مخططات الطور غنية بالمراحل المرتبة: طور باكستر  $3/2$  ومرحلة باكس  $1/2$  بالإضافة إلى مرحلة  $\langle S \rangle$  التي لا تظهر في الدوران 1 ولا في الدوران  $3/2$  ATM، وأخيراً مراحل مع انتقالات من الدرجة الأولى والثانية.

## الكلمات الرئيسية

نموذج اشكين تالر، نموذج ايزينغ، سبين-1، سبين-3/2، طريقة مونت كارلو.