



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
LABORATOIRE DE PHYSIQUE THEORIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité: Physique Théorique

Par :

M^{me} BOUDEFLA Rania ép BELARBI

Sur le thème

Etude numérique du modèle Ashkin Teller

Soutenue publiquement le 05 Décembre 2015 à Tlemcen devant le jury composé de :

M ^f Tayeb BENOUAZ	Professeur	Université de Tlemcen	Président
M ^f Abdelkrim Elhasnaïne MERAD	Professeur	Université de Tlemcen	Examinateur
M ^f Nouredine ZEKRI	Professeur	U. S. T. O - Oran	Examinateur
M ^f Boumediène LASRI	Professeur	Université de Saïda	Examinateur
M ^f Ahmed HOUARI	Professeur	Université de Tlemcen	Examinateur
M ^f Smaïne BEKHECHI	M-C-A	Université de Tlemcen	Directeur de thèse

*Laboratoire de physique théorique (LPT)
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*



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
LABORATOIRE DE PHYSIQUE THEORIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité: Physique Théorique

Par :

M^{me} BOUDEFLA Rania ép BELARBI

Sur le thème

Etude numérique du modèle Ashkin Teller

Soutenue publiquement le 05 Décembre 2015 à Tlemcen devant le jury composé de :

M ^f Tayeb BENOUAZ	Professeur	Université de Tlemcen	Président
M ^f Abdelkrim Elhasnaïne MERAD	Professeur	Université de Tlemcen	Examinateur
M ^f Nouredine ZEKRI	Professeur	U. S. T. O - Oran	Examinateur
M ^f Boumediène LASRI	Professeur	Université de Saïda	Examinateur
M ^f Ahmed HOUARI	Professeur	Université de Tlemcen	Examinateur
M ^f Smaïne BEKHECHI	M-C-A	Université de Tlemcen	Directeur de thèse

*Laboratoire de physique théorique (LPT)
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

Louanges à Allah, seigneur de l'univers ; Que les salutations d'Allah soient sur son messager qu'il a envoyé en qualité de miséricorde universelle, ainsi que sur ses compagnons et ses frères jusqu'à la résurrection.

**A mes parents qui m'ont permis d'atteindre mon but ;
A mon mari et ma belle maman qui m'ont toujours soutenue ;
A mes deux filles ;
A mes frères et sœurs qui sont fiers de moi ;
A tous ceux qui me sont chers.**

Remerciements

*Au terme de ce travail, en ce moment charnière, l'instant est venu de jeter un coup d'œil derrière et autour de soi, pour remercier ceux et celles qui m'ont aidée et soutenue dans la réalisation de ce mémoire, dont le travail a été réalisé au **laboratoire de physique théorique** de l'université Abou-Bekr BELKAID, TLEMCEEN.*

Mes premières pensées vont bien entendu au Professeur Mr Bachir LIANI qui m'a accueillie dans son laboratoire et a accepté d'engager ses connaissances, sa patience et sa rigueur à mon service.

En particulier, je remercie Monsieur le docteur Mr Smaïne BEKHECHI à qui j'ai l'honneur de dédier ce modeste travail pour exprimer mon profond respect et ma grande estimation.

Par ailleurs, je voudrais vivement remercier le professeur Mr Tayeb BENOUAZ pour avoir accepté la difficile tâche de président de jury, professeurs Mr Nouredine ZEKRI et Mr Ahmed HOUARI à qui j'exprime toute ma gratitude du fait qu'ils ont accepté de se déplacer et juger mon travail, ainsi que les professeurs Mr Abdelkrim Elhasnaïne MERAD et Mr Boumediène LASRI, pour avoir accepté d'être membres à mon jury de thèse. Je leurs exprime toute ma reconnaissance pour le regard attentif qu'ils ont donné à mon travail.

Je tiens à remercier mes amis de leur appui scientifique et moral tout le long de ce travail de recherche. Sans oublier tous les membres de l'équipe de mon laboratoire qui ont été pour moi des partenaires d'une grande qualité tout au long de ces années.

Un remerciement très particulier à mon tendre époux pour avoir toujours été à mes côtés pendant ces années, pour avoir partagé mes doutes et mes espoirs, pour m'avoir encouragée et soutenue lorsque je ne croyais plus en mon travail et pour avoir fêté avec moi mes petites victoires.

Enfin, et ce n'est pas le merci le plus facile à formuler, je tiens à remercier chaleureusement mes parents, mes frères et sœurs ainsi que ma belle-famille qui m'ont permis d'entreprendre ces études et m'ont apporté leur soutien permanent.

RANIA

Table des matières

Remerciements.

Dédicaces.

Table des matières.

Résumé.

Introduction générale.....1

Chapitre I : Eléments de la physique statistique et propriétés magnétiques.

I.	Système isolé- Description microcanonique	5
II.	Système en contact avec un réservoir de chaleur-Description canonique....	6
1.	Distribution canonique :.....	8
a.	Condition d'équilibre thermique :.....	9
b.	Distribution des micro-états du système :.....	10
c.	Distribution des micro-états du système :	12
d.	Discussion physique :.....	13
2.	Autre approche pour obtenir la distribution canonique :.....	15
a.	Forme "généralisée" du postulat fondamental :.....	15
b.	Application à l'ensemble canonique :	17
3.	Expressions de quelques grandeurs thermodynamiques :.....	18

a.	Energie moyenne :18
b.	Capacité calorifique :18
c.	Entropie canonique :19
d.	Energie libre :19
e.	Pression canonique :20
f.	Potentiel chimique canonique :20
III.	Comparaison entre la situation canonique et la situation microcanonique :20
IV.	Grandeurs relatives au champ magnétiques :21
V.	L'origine des moments magnétiques :23
VI.	Les types de magnétisme :25
1.	Le diamagnétisme et le paramagnétisme :25
2.	Le ferromagnétisme :28
3.	L'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme :30
VII.	L'influence de la température sur le comportement magnétique :31

Chapitre II : Les transitions de phase.

I.	généralités sur les transitions de phase :33
II.	Classification des transitions de phase :38
1.	Classification d'Ehrenfest :38
2.	Classification de Landau.....42
III.	Transitions de phase et paramètres d'ordre associés :43
IV.	Théorie de Landau des transitions de phase :44
V.	Comportement de quelques grandeurs physiques :47

Chapitre III : Etude du modèle d'Ashkin-Teller à spin-3/2 par la simulation de Monte Carlo.

I.	Simulation :50
----	--------------	---------

1. Définition de la simulation :	50
2. Le but de la simulation :	51
3. La simulation d'un système :	51
II. Méthodes classiques de simulation :	51
1. Dynamique moléculaire :	51
2. Méthode de Monte Carlo - Structure d'un programme standard de simulation Monte Carlo:	55
III. Méthodes de simulations numériques ou de Monte Carlo :	58
1. Echantillonnage :	59
2. Réalisation pratique de la méthode de Monte Carlo:	60
3. Analyse des erreurs :	61
4. Conditions aux bords :	62
IV. Nature d'une transition de phase :	63
V. Introduction au modèle Ashkin Teller :	64
VI. L'Hamiltonien du modèle :	65
VII. Diagramme de phases à l'état fondamental :	65
VIII. La simulation de Monte Carlo :	67
IX. Résultats et discussion :	69

Chapitre IV : L'approximation du champ moyen et le modèle d'Ashkin-Teller à spin-1 sous champ transverse.

I. La méthode du champ moyen :	78
II. Etude du modèle d'Ashkin-Teller spin-1 sous champ transverse par L'approximation champ moyen:	80
III. Résultats et discussion :	85

Conclusion générale :.....97

Références bibliographiques.

Résumés.

RESUME

Cette thèse de doctorat concerne l'étude du modèle d'Ashkin-Teller spin $3/2$ par des méthodes de mécanique statistique telle que les simulations Monte-Carlo et par le champ moyen le modèle d'Ashkin-Teller spin 1 sous champ transverse. Ce modèle a été introduit auparavant pour expliquer l'adsorption du Sélénium sur une surface de Nickel.

Le premier chapitre est concerné par une introduction des ensembles statistiques et des différents aspects magnétiques dans les matériaux.

Dans le second chapitre une introduction aux différents types de transitions de phases dans les systèmes magnétiques est faite. La nature ainsi que l'ordre de transition est donnée telle que la classification d'Ehrenfest basée sur la discontinuité des dérivées premières et secondes de l'énergie libre et celle de Landau basée sur le paramètre d'ordre.

Au troisième chapitre une introduction détaillée de la méthode de Monte-Carlo, ainsi que la théorie du finite-size-scaling a été faite. Dans la suite de la thèse une étude numérique du modèle d'Ashkin-Teller à spin $3/2$ permet de comprendre l'effet des spins et du champ cristallin sur les diagrammes de phases et le comportement critique des observables physiques. Dans la première partie, ce modèle a été étudié sur le réseau carré à $T = 0$ en déterminant exactement les différentes phases et les régions qui les séparent. Le diagramme de phase de l'état fondamentale présente de nouvelles phases de Baxter délimitées par des transitions du premier ordre. Les résultats obtenus sont intéressants et les diagrammes de phases, à $T > 0$, pour différentes valeurs des interactions montrent des transitions du second ordre et aussi font apparaître des phases partiellement ordonnées à haute température qui ne sont pas présentes dans le cas où on a 2 états de spins.

Enfin dans le dernier chapitre nous avons étudié les effets quantiques sur le modèle d'Ashkin-Teller à spin 1 et sous champ cristallin par la méthode du champ moyen. Pour cela nous introduisons un champ Ω qui agit sur les spins transverses. Pour des Ω faibles ou petits les différents diagrammes de phases pour $\Omega = 0$ persistent. Ces diagrammes de phases présentent des transitions du premier ordre et du second ordre avec des points tricritiques et critiques d'ordre supérieurs. En augmentant la force du champ transverse Ω , nous observons une migration du point tricritique vers les basses températures jusqu'à sa disparition pour Ω très fort. De même, nous observons la

disparition des phases partiellement ordonnées l'une après l'autre en fonction du champ transverse Ω .

INTRODUCTION GENERALE

La branche de la physique sur laquelle est articulé ce travail de thèse est la mécanique statistique, qui est l'un des piliers de la physique moderne. Elle se propose d'étudier les systèmes complexes et se compose de nombreuses entités microscopiques en interaction. Elle permet de décrire les propriétés thermodynamiques macroscopiques de ces systèmes et tente de faire un lien entre le monde microscopique et le monde macroscopique, Ce qui fait que des lois macroscopiques complexes des spécifiques peuvent s'expliquer à partir des lois microscopiques.

Etant donné que les divers concepts sont en interaction, de divers potentiels d'interaction ont tendance à ordonner et à organiser ces entités microscopiques en structures bien définies, sous certaines conditions extérieures.

Ainsi, de nombreux éléments se présentent sous plusieurs formes cristallines et se transforment d'une forme à l'autre lorsqu'on varie l'un des paramètres physiques en jeu comme par exemple la température. Ainsi, l'augmentation de la température d'un système provoque une agitation thermique et perturbe par conséquent sa structure par la naissance de mouvements compliqués. En abaissant cette température, le système revient dans son état de plus basse énergie ou dans son état fondamental. On dit que le système a subi un changement d'état ou de phase, ou qu'il y a eu transition de phase, et qui dit transition, dit dans certains cas, l'existence d'un point critique et de propriétés caractéristiques d'homogénéité et d'universalité.

En variant donc un certain nombre de paramètres intensifs (comme la température, la pression), on met en évidence les diverses phases d'un système et leurs domaines d'existence qui sont représentés sur un diagramme de phase et la température utilisée ici définit ce qu'on appelle paramètre de contrôle de système.

Comme les mouvements de perturbation créés par la variation de la température sont compliqués, la physique statistique ne va pas s'intéresser totalement à tous ces mouvements, mais seulement à certaines de leurs propriétés moyennes.

Pour mieux comprendre les systèmes complexes et les phénomènes de transition de phase dans ces systèmes, les physiciens ont construit des modèles mathématiques idéalisés, suffisamment simples, pour que certaines quantités soient calculables ; mais suffisamment riches, pour que la physique intéressante ne soit pas purement et simplement ignorée. À partir de ces modèles mathématiques, on cherche à calculer les

Introduction générale

valeurs moyennes de paramètres, dits macroscopiques. Dans ce cas, on fait recours à des méthodes de simulations numériques qui occupent aujourd'hui une place aussi importante que la théorie et l'expérience dans l'étude des propriétés de la matière.

Les réseaux de spins ont un intérêt particulier en physique de la matière condensée et spécialement dans l'étude du magnétisme. Les modèles de spins sont définis par des variables de spins placées aux nœuds d'un réseau, pris comme un ensemble de sites (ou nœuds) reliés par des liens. Le réseau de Bethe en est un exemple et de nombreux problèmes sont exactement solubles sur un tel réseau. Les propriétés de ces modèles sur réseau sont étudiées en utilisant des méthodes bien connues de la mécanique statistique d'équilibre, tels que la technique du groupe de renormalisation, les simulations Monté Carlo et l'approximation du champ moyen.

La simulation monté Carlo de ces modèles sur ordinateur va prédire les propriétés macroscopiques moyennes de ces systèmes complexes. En effet, les simulations permettent d'étudier et d'expérimenter un système donné dont on connaît les interactions complexes, de mesurer les effets de certains changements dans l'interaction sur le comportement du système et d'expérimenter de nouvelles situations. On peut dire que, comme les systèmes modèles introduisent des abstractions et des simplifications, chaque modèle se prête à une technique ou à une méthode spéciale.

Ces modèles sont en plus caractérisés par des paramètres de contrôle qui, une fois changés, les modèles peuvent montrer des effets collectifs, par exemple l'apparition d'un ordre partiel. Afin de décrire ces effets, une notion de paramètre d'ordre a été introduite. Un paramètre d'ordre prend des valeurs caractéristiques du comportement global du système et prend deux valeurs distinctes autour du point critique. Dans les systèmes magnétiques par exemple, le paramètre d'ordre est l'aimantation, tandis que dans les systèmes liquide-gazeux, le paramètre d'ordre est la différence des densités le liquide et le gaz.

Pour certaines valeurs des paramètres du modèle ou des champs externes, le paramètre d'ordre est non nulle et indique une phase ordonnée, la transition d'une valeur nulle à une valeur non nulle du paramètre d'ordre s'effectue à une valeur critique du paramètre de contrôle et correspond donc à une transition de phase. Généralement, le comportement d'un paramètre d'ordre du point critique peut être de deux types: discontinu ou continu. Le paramètre d'ordre est dans une quantité physique qui indique

Introduction générale

l'état macroscopique du système autour des points critiques. De plus, près des points critiques.

Dans ce travail de thèse, nous avons étudié un modèle particulier de mécanique statistique où deux modèles d'Ising sont superposés. Dans un modèle d'Ising simple, à chaque site est associée une seule variable. Dans le présent modèle communément appelé modèle d'Ashkin-Teller, deux variables de spins sont déposées à chaque site. Nous avons commencé par l'étude du modèle Ashkin Teller spin $3/2$ par la méthode de Monte Carlo, puis l'étude du modèle Ashkin Teller spin 1 sous le champ transversale magnétique en utilisant la théorie du champ moyen. Un exemple de la réalisation physique du modèle est le composé du Sélénium adsorbé sur une surface du Nickel. Par la suite, ce modèle a été exploré par plusieurs chercheurs avec des méthodes d'investigation différentes : méthode de groupe de renormalisation, méthode de champ moyen, méthode de simulation Monte Carlo, méthode récursive ...etc.

Ce sujet de thèse est divisé en quatre chapitres précédés d'une introduction générale dans laquelle nous avons donné l'objectif du travail effectué, la démarche utilisée ainsi que l'organisation de cette thèse.

Dans le chapitre I, nous avons rappelé quelques notions sur le magnétisme et les différents états magnétiques sans oublier d'introduire les éléments de la physique statistique.

Dans le chapitre II, les transitions de phase sont présentées ou nous avons rappelé les critères de classification telle que la théorie thermodynamique de Landau.

Dans le chapitre III, nous avons étudié le modèle Ashkin Teller spin $3/2$ par la simulation de Monte Carlo. Nous avons présenté les comportements thermodynamiques des différents paramètres d'ordre en fonction des couplages, de la température et du champ cristallin. Les températures de transition ont été trouvées en utilisant les pics des susceptibilités. Les résultats obtenus montrent que les diagrammes de phase présentent une structure très riche et que le modèle possède de nombreuses propriétés avec des transitions du second ordre.

Dans le chapitre IV, nous avons étudié le modèle Ashkin Teller spin 1 sous champ transverse en utilisant la méthode du champ moyen qui donne des résultats qualitativement corrects et comparables avec ceux trouvés par M. Bادهداه et al, en

Introduction générale

absence du champ transverse, ils ont simulé le problème en utilisant la méthode de Monte Carlo et la matrice de transfert « finite size scaling ». Nous avons constaté que l'effet de champ transversal croissant ne change pas non plus de l'ordre des transitions ni la nature des points multicritiques, mais cause une disparition des phases localisés dans la région des basses températures ou le champ cristallin est élevé.

Une conclusion générale est des perspectives de nos recherches sont données à la fin.

CHAPITRE I

La mécanique statistique et la mécanique quantique sont les bases de la physique moderne. Elles fournissent des méthodes pour étudier les propriétés de la matière.

La mécanique quantique propose des structures microscopiques de la matière qui ne sont pas perceptibles à l'échelle macroscopique. Elle se base sur quelques postulats. La mécanique statistique étudie les propriétés macroscopiques de la matière en partant des mécanismes et des structures microscopiques fournies par la mécanique quantique. Les progrès réalisés au 20^{ème} siècle dans la compréhension des propriétés des matériaux et dans leurs applications industrielles qui bouleversent l'humanité, sont dus notamment à la mécanique quantique et la physique statistique [1].

Ce chapitre a pour but de rappeler des notions fondamentales de la mécanique statistique et les systèmes magnétiques qui seront utilisées tout le long de cette thèse.

La mécanique statistique se base sur un postulat dit « postulat fondamental » introduit dans le cadre d'un système isolé à l'équilibre, étant donné un système isolé en équilibre, il se trouve avec probabilités égales dans chacun de ses micro-états accessibles. Les propriétés fondamentales d'un système isolé sont étudiées avec ce postulat unique. A partir de celui-ci, on étudie des systèmes qui ne sont pas isolés mais qui se trouvent dans des situations particulières dans lesquelles on peut encore utiliser le postulat fondamental d'une manière justifiée [2].

Dans un système considéré quelconque, en mécanique statistique, une grandeur très importante est l'entropie statistique définie par :

$$S = -K_B \sum_i P_i \ln P_i \quad (\text{I. 1})$$

Ou P_i la probabilité de l'état microscopique i du système et K_B la constante de Boltzmann.

I. Système isolé- Description microcanonique :

Un système isolé est un système qui n'a pas d'interaction avec le reste de l'univers. Evidemment, ceci signifie simplement que les interactions entre le système et l'extérieur sont négligeables. Les paramètres fixés par l'extérieur tels que l'énergie E , le volume V et le nombre de particules N constants.

Chapitre I: Eléments de la physique statistique et propriétés magnétiques

Les états microscopiques accessibles d'un système isolé sont ceux qui vérifient ces contraintes extérieures. Soit Ω le nombre total d'états microscopiques accessibles, le postulat fondamental de la mécanique statistique à l'équilibre est énoncé comme suit :

« Tous les états microcanoniques accessibles d'un système isolé à l'équilibre ont la même probabilité ». D'après le postulat énoncé, on a :

$$P_i = \frac{1}{\Omega} \quad (\text{I. 2})$$

Pour tous états l . On appelle cette expression « probabilité microcanonique ». Les états microscopiques qui vérifient cette probabilité forment un ensemble dit « microcanonique ». La description des propriétés du système utilisant cette probabilité est appelée « description microcanonique » [1-3].

L'entropie statistique S d'un système isolé [4] est donc :

$$S = K_B \sum_i \frac{1}{\Omega} \ln \Omega = K_B \frac{1}{\Omega} \ln \Omega \sum_i 1 = K_B \ln \Omega \quad (\text{I. 3})$$

L'expression (I. 3) est appelée « entropie microcanonique ».

La température microcanonique T [5] est définie par :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad (\text{I. 4})$$

La pression microcanonique p [6] est définie par :

$$\frac{p}{T} = \frac{\partial S}{\partial V} \quad (\text{I. 5})$$

Le potentiel chimique microcanonique μ [7] est défini par :

$$\frac{\mu}{T} = \frac{\partial S}{\partial N} \quad (\text{I. 6})$$

II. Système en contact avec un réservoir de chaleur- Description canonique:

Lorsqu'un système est en interaction avec d'autres systèmes, il faut en principe considérer l'ensemble de ces systèmes si l'on veut étudier ses propriétés. En réalité, cela

est impossible car il y a trop de paramètres qui sont mis en jeu. Dans certaines situations, un petit nombre de ces paramètres suffit pour calculer les propriétés du système. Une de ces situations est la situation dite « canonique ».

En physique statistique, l'ensemble (ou la situation) canonique est un ensemble statistique introduit par le physicien américain Josiah Willard Gibbs [8]. Il correspond au cas d'un système physique de volume V donné et contenant un nombre fixe N de particules en interaction avec un autre système, appelé "réservoir" ou thermostat, beaucoup plus "gros" que le système considéré, et avec lequel il peut échanger de l'énergie mais pas de matière. Le thermostat se comporte comme un réservoir supposé infini d'énergie, la réunion des deux systèmes étant considérée comme isolée. Le couplage entre le système étudié et le réservoir est considéré comme faible, c'est-à-dire que l'état du réservoir n'est pas modifié quels que soient les échanges d'énergie entre lui et le système [9].

Un exemple d'une telle situation peut être donné par une bouteille d'eau fermée et plongée dans une piscine, cette dernière constitue le réservoir. Il est clair que même si la bouteille est initialement à une température beaucoup plus basse, ou plus élevée, que celle de la piscine, elle n'influencera pas de façon mesurable la température de la piscine, en toute rigueur, il faudrait considérer que le volume de la bouteille est fixe, et donc négliger les phénomènes de dilatation ou de contraction de celle-ci. La notion de "réservoir" est relative, ainsi une tasse de thé chaud pourra être approximativement considérée comme un réservoir pour une tranche de citron plongée dedans, il convient de préciser qu'il convient de tenir compte du temps dans cette situation, initialement, la tasse de thé, très chaude, va imposer "rapidement", c'est-à-dire avant qu'elle n'ait le temps de refroidir, sa température à la tranche de citron, mais ensuite, elle refroidira pour arriver à l'équilibre avec la pièce dans laquelle elle se trouve, mais certainement pas pour toute la pièce dans laquelle elle se trouve, qui pourra à l'inverse être considérée comme le réservoir vis-à-vis du système constitué par la tasse de thé (et la tranche de citron) à condition, en toute rigueur, de négliger les pertes par évaporation de la tasse de thé, pour ne pas avoir d'échange de matière.

La condition d'équilibre thermique entre le système étudié et le réservoir est en pratique réalisée lorsque tous les deux sont à la même température. Plus précisément le réservoir,

beaucoup plus gros que le système considéré, impose sa température à ce dernier, c'est pourquoi il est souvent appelé le thermostat.

L'ensemble canonique est donc l'ensemble des "copies virtuelles" du même système dans le même état d'équilibre avec le thermostat, donc à la même température. Contrairement au cas de l'ensemble microcanonique l'énergie du système étudié est alors amenée à fluctuer d'une "copie" du système à une autre de l'ensemble. Toutefois, et contrairement à la situation microcanonique les différents micro-états d'énergie E_l du système étudié ne possèdent pas tous la même probabilité, du fait de l'interaction avec le réservoir. Il est possible de déterminer la forme générale de la distribution de probabilité des micro-états d'énergie accessibles du système, appelée distribution canonique.

1. Distribution canonique :

Dans la situation canonique, le volume V et le nombre de particules N du système correspondent à des paramètres extérieurs, comme c'est le cas de l'énergie dans la situation microcanonique V et N ne sont connus qu'aux incertitudes δV et δN près, dont les valeurs sont fixées. Il convient de souligner que la fixité du volume du système implique que celui-ci n'échange pas de travail avec le réservoir, les échanges d'énergie avec ce dernier sont purement thermiques [10], on peut bien sûr "relâcher" ce paramètre extérieur en faisant varier le volume, puis en laissant le système évoluer dans un nouvel état d'équilibre dans la situation canonique, avec cette nouvelle valeur de volume il y aura bien sûr échange de travail lors de ce "relâchement" du volume, ce qu'il faut retenir est que dans la situation canonique "habituelle" et le volume n'est pas contrairement à l'énergie une grandeur qui peut varier librement par échange avec un "réservoir de volume", de façon à parvenir à l'équilibre. Par ailleurs elle peut être difficile à réaliser en pratique, du fait des phénomènes de dilatation-contraction des parois du récipient contenant le système: de fait cette condition de volume fixe est rarement réalisée en chimie par exemple, où l'on préfère considérer que c'est la pression qui est fixe.

En revanche, et contrairement au cas microcanonique, l'énergie E du système n'est plus fixée, en raison des échanges avec le réservoir, et est donc une variable interne, au même titre que peut l'être par exemple la densité de la matière constituant le système.

Par suite, la distribution des différents micro-états du système n'a aucune raison d'être celle de l'ensemble microcanonique, où ceux-ci sont équiprobables, mais doit être déterminée en prenant en compte ces échanges système - réservoir.

La détermination de la distribution des niveaux d'énergie au sein d'un ensemble canonique se fait en considérant l'ensemble microcanonique qu'il constitue avec le réservoir d'énergie. L'énergie totale du système étudié et du réservoir est notée E_T , celle du système dans un micro-état donné E_l (l étant un indice générique permettant de distinguer les divers micro-états), et celle correspondante du réservoir E_L , avec dans tous les cas :

$$E_T = E_l + E_L \quad (\text{I. 7})$$

L'ensemble {système étudié + réservoir} étant considéré comme isolé, l'énergie E_T est constante à δE près, et $E_l \ll E_L$ pour que le thermostat constitue effectivement un réservoir infini d'énergie pour le système considéré.

a. Condition d'équilibre thermique :

À l'équilibre thermodynamique l'entropie S_T de l'ensemble {système + réservoir} doit être maximale. Comme l'entropie est une grandeur extensive, l'entropie de l'ensemble {système + réservoir} est la somme des entropies du système, notée S , et du réservoir, notée S_r :

$$S_T = S + S_r \quad (\text{I. 8})$$

Le système n'interagissant avec le réservoir qu'en s'échangeant une énergie δE avec ce dernier, il est possible d'écrire la variation correspondante de l'entropie totale, en toute rigueur, on a $S = S(E, V, N)$ et il conviendrait d'écrire les dérivées partielles sous la forme $\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V, N}$, etc. Toutefois pour alléger l'écriture les autres variables seront omises dans les dérivées partielles:

$$\delta S_T = \delta E \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{E=E_l} - \delta E \left. \frac{\partial S_r}{\partial E} \right|_{E=E_L=E_T-E_l} \quad (\text{I. 9})$$

À l'équilibre thermique l'entropie de l'ensemble {système + réservoir} est maximale donc $\delta S_T = 0$, par suite il vient:

$$\left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{E=E_l} = \left. \frac{\partial S_r}{\partial E} \right|_{E=E_T-E_l} \quad (\text{I. 10})$$

Par ailleurs, comme $E_l \ll E_L$ en pratique :

$$\left. \frac{\partial S_r}{\partial E} \right|_{E=E_T-E_l} \approx \left. \frac{\partial S_r}{\partial E} \right|_{E=E_T} = \frac{1}{T_r^*} \quad (\text{I. 11})$$

où T_r^* est la température microcanonique du réservoir, qui ne dépend donc pas de l'état du système étudié. Il est alors possible de poser :

$$\left. \frac{\partial S_r}{\partial E} \right|_{E=E_l} = \frac{1}{T} \quad (\text{I. 12})$$

T étant la température canonique du système étudié, et la relation d'équilibre thermique entre ce dernier et le réservoir se réduit à $T = T_r^*$. Le réservoir "impose" donc à l'équilibre sa température, supposée constante, au système étudié, d'où le terme souvent utilisé de "thermostat" pour le désigner.

Tout ceci suggère d'introduire le facteur :

$$\beta = \frac{1}{K_B T} = \frac{1}{K_B} \frac{\partial E}{\partial S} \quad (\text{I. 13})$$

Ceci constitue pour ainsi dire une définition du concept de température. Lorsque ces deux facteurs sont égaux, les variations d'entropies seront strictement opposées pour les deux systèmes puisqu'ils échangent une quantité d'énergie toujours strictement opposée. À température égale, on est donc assuré du caractère extrémal (maximal) de l'entropie, ce qui assure l'équilibre thermodynamique.

b. Distribution des micro-états du système :

Soient $\Omega_T(E_T)$ le nombre de micro-états du système total d'énergie totale E_T , constante (à δE près), et $\Omega_r(E_r = E_T - E_l)$ celui du réservoir lorsque le système étudié

est dans un micro-état d'énergie E_l . Comme lorsque le système se trouve dans ce micro-état le réservoir peut se trouver dans n'importe lequel des Ω_r micro-états correspondants, sans qu'aucun ne soit favorisé, la probabilité P_l^c de trouver le système étudié dans l'énergie E_l au sein de l'ensemble canonique est donc donnée par:

$$P_l^c = \frac{\Omega_r(E_T - E_l)}{\Omega_r(E_T)} \quad (\text{I. 14})$$

C'est-à-dire le nombre de cas favorables sur le nombre total de cas possibles, cette relation suppose en fait l'indépendance statistique entre les états des deux sous-systèmes constitués respectivement par le système considéré et le réservoir, qui est elle-même valable si ceux-ci sont faiblement couplés [11]. Le dénominateur n'étant qu'une constante indépendante du micro-état l considéré, il est possible d'écrire en passant au logarithme et faisant apparaître l'entropie microcanonique $S_r = K_B \ln \Omega_r$ du réservoir:

$$K_B \ln \Omega_r (E_T - E_l) = S_r(E_T - E_l) = S_r(E_T) - E_l \frac{\partial S_r}{\partial E_T} \quad (\text{I. 15})$$

Soit encore en tenant compte de la condition d'équilibre thermique $\frac{1}{T} = \frac{\partial S_r}{\partial E_T}(E_T)$ entre le système et le réservoir:

$$\ln \Omega_r (E_T - E_l) \approx \frac{S_r(E_T)}{K_B} - \frac{E_l}{K_B T} \quad (\text{I. 16})$$

Il vient dès lors l'expression de la probabilité P_l^c des micro-états l :

$$P_l^c = C e^{\left(\frac{E_l}{K_B T}\right)} \quad (\text{I. 17})$$

Où C est une constante de normalisation donnée par la condition $\sum_l P_l^c = 1$, la sommation portant sur tous les micro-états possibles du système. Il convient de distinguer cette sommation, par état du système, de celle qui peut être effectuée par niveau d'énergie. Dans le premier cas la somme comporte un terme par état du système, et donc plusieurs états dégénérés, c'est-à-dire des états distincts mais de même énergie E_l , apparaissent plusieurs fois dans la somme. Dans le second cas au contraire, il y a un terme dans la somme par valeur distincte de E_l , il faudrait tenir compte du degré de dégénérescence $g(E_l)$ de chaque état dans les sommations[12].

L'expression (I . 17) peut se réécrire sous la forme suivante:

$$P_l^c = \sum_{E_l} \frac{g(E_l)e^{-\beta E_l}}{Z} \quad (\text{I . 18})$$

et $Z = \sum_{E_l} g(E_l)e^{-\beta E_l}$, la notation \sum_{E_l} rappelant que l'on doit sommer un terme par valeur de l'énergie et non par état, même dégénéré, du système[12]:

$$P_l^c = \frac{e^{\left(\frac{-E_l}{K_B T}\right)}}{Z} = \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} \quad (\text{I . 19})$$

où Z est la fonction de partition canonique définie par :

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l} \quad (\text{I . 20})$$

c. Cas continu :

Dans le cas où le spectre des micro-états du système peut être considéré comme continu ou quasi-continu, en pratique, il faut que les écarts entre deux niveaux d'énergie voisins soient très faibles devant l'énergie caractéristique $K_B T$ liée à l'agitation thermique, il est fréquent de recourir à une description continue. On introduit alors la notion de densité d'états $\rho(E)$ telle que le nombre $dN(E)$ de micro-états du système d'énergies comprises entre E et $E + dE$ soit donné par:

$$dN(E) = \rho(E) dE \quad (\text{I . 21})$$

Il faut alors considérer la densité de probabilité $p^c(E)$ pour que les micro-états du système aient des énergies comprises entre E et $+dE$, qui est alors donnée selon la formule précédente modifiée sous la forme:

$$p^c(E) = \frac{\rho(E)e^{-\beta E}}{Z} dE \quad (\text{I . 22})$$

La fonction de partition Z étant alors donnée par:

$$Z = \int \rho(E)e^{-\beta E} dE \quad (\text{I . 23})$$

L'intégrale portant sur l'ensemble des valeurs possibles de l'énergie, ceci peut paraître quelque peu contradictoire avec les hypothèses relatives au thermostat, car on autorise potentiellement des variations très grandes, voire infinies, de l'énergie, sans compter que certains de ces états peuvent être incompatibles avec les paramètres extérieurs imposés au système. En pratique cependant les états d'énergie ayant des valeurs extrêmes par rapport à la valeur moyenne sont très peu probables et ne contribuent pratiquement pas à l'intégrale.

d. Discussion physique :

Contrairement au cas du formalisme microcanonique, les divers micro-états du système étudié ne sont pas équiprobables. Si on considère deux valeurs distinctes de l'énergie, notées E_2 et E_1 , avec $E_2 > E_1$, le rapport de leurs probabilités au sein de l'ensemble canonique, qui correspond au rapport de leurs "populations" respectives, est donné par:

$$\frac{P_2^c}{P_1^c} = \frac{\Omega(E_2)}{\Omega(E_1)} = e^{\frac{-\Delta E}{K_B T}} \quad (\text{I. 24})$$

Avec : $\Delta E = E_2 - E_1 > 0$

Clairement plus l'écart énergétique ΔE entre les niveaux est important pour une température donnée, plus le ratio de population sera faible, l'état de plus basse énergie étant le plus probable.

Le ratio de probabilité des différents états est "modulée" par la quantité $K_B T$, qui joue le rôle d'une énergie caractéristique [12], traduisant en quelque sorte l'influence de "l'agitation thermique" (lié au réservoir) sur l'occupation des différents micro-états du système en fonction de leur énergies respectives.

Il est utile de retenir l'ordre de grandeur suivant: $K_B T = 1eV \Leftrightarrow T = 12000K$

Par suite, l'écart énergétique entre les différents niveaux d'énergie d'un atome étant de l'ordre de l'électronvolt, il est extrêmement improbable de trouver les atomes d'un gaz

monoatomique comme l'hélium ou le néon dans un état excité à la température ordinaire $T = 300 K$, puisque pour $\Delta E = 1 eV$ le ratio précédent est de l'ordre de $4 \cdot 10^{-18}$. On dit alors que les "degrés de liberté électroniques" sont gelés à la température ordinaire, toutefois, les sous-niveaux associés aux structures fine et hyperfine de l'état fondamental, lorsqu'ils sont présents, possèdent des écarts bien plus faibles, de l'ordre de ≈ 0.1 à $0,01 eV$ et $10^{-6} eV$, respectivement, ce qui correspond dans le cas de la structure fine à des température de l'ordre de quelques centaines à quelques milliers de K . Il peut alors s'avérer nécessaire de tenir compte de ces niveaux dans le calcul de la fonction de partition Z . Toutefois bien souvent la température T est suffisamment élevée pour que sauf cas particulier les différents sous-niveaux de structure fine, lorsqu'ils existent à l'état fondamental, soient tous excités et il est possible de raisonner comme s'ils étaient confondus en un seul niveau dégénéré, en utilisant le facteur de dégénérescence associé. Il en est de même pour l'éventuelle structure hyperfine, sauf à très basse température. En revanche pour des températures élevées, de l'ordre de plusieurs milliers de degrés, les états excités pourront jouer un rôle important.

À l'inverse dans le cas de gaz constitués de molécules, il existe des degrés de liberté associés aux vibrations et aux rotations moléculaires. Typiquement les écarts d'énergies associés à ces termes sont de l'ordre de $\approx 0,1$ à $0,01 eV$ et $\approx 10^{-3} - 10^{-5} eV$, respectivement [13]. Ainsi les degrés de liberté de rotation ne seront "gelés" qu'à très basse température, et joueront certainement un rôle à température ordinaire, et il en sera de même pour ceux de vibration dès lors que la température est suffisamment élevée, plus précisément il est possible de définir des "températures caractéristiques" associées aux écarts entre les différents sous-niveaux. Ainsi par exemple l'écart entre deux niveaux de vibration d'une molécule diatomique, ou de deux niveaux d'un mode de vibration d'une molécule polyatomique, sera donné (dans l'approximation harmonique) par la quantité $\hbar\omega_0$, liée à la "raideur" de l'oscillateur. Il est alors possible d'introduire la température caractéristique T_v en posant $K_B T_v = \hbar\omega_0$. Cette température est typiquement de l'ordre de quelques milliers de K pour de nombreux gaz diatomiques, mais elle peut être aussi basse que quelques centaines de K pour des gaz comme le dichlore ou le dibrome.

Il faudra donc tenir compte de ces degrés de liberté supplémentaires, ce qui explique pourquoi l'expression de l'énergie interne d'un gaz parfait varie selon que l'on considère

un gaz monoatomique, pour lesquels il n'y a pas de degrés de liberté de rotation ou de vibration, et est alors donnée par $U = \frac{3}{2}RT$ (par mole), ou un gaz diatomique, où il faut alors tenir compte des deux degrés de liberté supplémentaires liés à la rotation, ce qui donne $U = \frac{5}{2}RT$. À haute température, cette valeur tendra vers $U = \frac{7}{2}RT$ du fait du "dégel" des degrés de liberté de vibration.

2. Autre approche pour obtenir la distribution canonique :

Il est possible de procéder différemment pour obtenir la distribution précédente, en utilisant une approche "généralisée [8-10-11] du postulat fondamental de la physique statistique. Si cette approche est fortement calculatoire, par rapport à celle plus physique employée plus haut, elle est très féconde, et présente l'avantage de pouvoir être généralisée à pratiquement n'importe quelle situation.

a. **Forme "généralisée" du postulat fondamental :**

En premier lieu, il convient de rappeler le postulat fondamental de la physique statistique:

« Étant donné un système isolé en équilibre, il se trouve avec des probabilités égales dans chacun de ses micro-états accessibles » [8].

Ce postulat privilégie évidemment les systèmes isolés, et son application à la situation canonique implique de raisonner sur le système global, isolé, et effectuant des hypothèses de faible couplage sur le système étudié, pour y avoir recours.

Il est possible de généraliser ce postulat de la façon suivante:

« À l'équilibre macroscopique, la distribution statistique des états microscopiques est celle qui maximise l'entropie statistique du système :

$$S = -K_B \sum_l P_l \ln P_l \quad (\text{I. 25})$$

compte tenu des contraintes extérieures qui sont imposées à ce dernier » [14].

Dans tous les cas la distribution de probabilité devra respecter la contrainte liée à la condition de normalisation $\sum_l P_l = 1$, qui peut aussi être mise sous la forme:

$$\sum_l P_l - 1 = 0 \quad (\text{I. 26})$$

Par ailleurs, dans le cas de l'ensemble canonique, la seconde contrainte qui porte sur la distribution de probabilité $P_l = P_l^c$ est que la valeur moyenne $\langle E \rangle$ de l'énergie du système étudié est fixée à l'équilibre de par son contact avec le réservoir (supposé infini) d'énergie [10], c'est-à-dire qu'il faut que P_l^c soit telle que [14]:

$$\sum_l P_l E_l - \langle E \rangle = 0 \quad (\text{I. 27})$$

b. Application à l'ensemble canonique :

Le problème de la détermination de la distribution de probabilité P_l^c dans le cas de l'ensemble canonique est donc celui d'une maximisation sous contrainte de la quantité,

$$\tilde{S} = -K_B \sum_l P_l^c \ln P_l^c \quad (\text{I. 28})$$

les deux contraintes étant:

- (I. 26), (condition de normalisation).
- (I. 27), (contact avec le réservoir d'énergie).

Ce problème peut se résoudre en utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange, on cherche alors à maximiser la quantité [14]:

$$\tilde{S}(a, b) = -K_B \sum_l P_l^c \ln P_l^c - a(\sum_l P_l - 1) - b(\sum_l P_l E_l - \langle E \rangle) \quad (\text{I. 29})$$

avec a et b étant deux constantes arbitraires qui seront déterminées ultérieurement en remplaçant l'expression obtenue de $P_l^c(a, b)$ dans celles des deux contraintes imposées à la distribution.

Chapitre I: Éléments de la physique statistique et propriétés magnétiques

On minimise alors \tilde{S} en considérant chacun des P_l^c comme une variable indépendante, c'est-à-dire en cherchant P_l^c tel que $\frac{\partial \tilde{S}}{\partial P_l^c} = 0$, ce qui donne les conditions:

$$-K_B \ln P_l^c - K_B - a - bE_l = 0 \quad (\text{I. 30})$$

ce qui implique:

$$P_l^c(a, b) = e^{-\left(1 + \frac{a}{K_B}\right)} e^{\left(\frac{bE_l}{K_B}\right)} = C e^{\left(\frac{bE_l}{K_B}\right)} \quad (\text{I. 31})$$

avec C constante de normalisation.

On obtient bien une distribution de la même forme que précédemment, la constante b étant bien l'inverse de la température T comme il est possible de le vérifier en substituant cette expression dans celle de l'entropie statistique \tilde{S} . Il vient en effet après réarrangement:

$$\tilde{S}(a, b) = K_B \left(1 + \frac{a}{K_B}\right) (\sum_l P_l^c) + b(\sum_l E_l P_l^c) \quad (\text{I. 32})$$

soit encore compte tenu du fait que $\sum_l P_l^c = 1$ et de $\sum_l E_l P_l^c = \langle E \rangle$:

$$\tilde{S}(a, b) = K_B \left(1 + \frac{a}{K_B}\right) + b\langle E \rangle \quad (\text{I. 33})$$

Il suffit de remarquer que $\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \langle E \rangle} = \frac{1}{T}$ où T est la température du réservoir imposée au système pour vérifier que $= \frac{1}{T}$. L'utilisation de la contrainte $\sum_l P_l^c - 1 = 0$ permet alors de montrer que :

$$e^{-\left(1 + \frac{a}{K_B}\right)} = \frac{1}{\sum_l e^{-\beta E_l}} = \frac{1}{Z} \quad (\text{I. 34})$$

On montre dans ce qui suit que l'on peut exprimer les grandeurs physiques fondamentales en fonction de Z [15].

3. Expressions de quelques grandeurs thermodynamiques : [2-5]

La fonction de partition canonique Z ne dépend pas de l'énergie E_l des micro-états individuels, en revanche elle dépend en général des paramètres extérieurs du système, notamment sa température T et son volume V . Il est facile de vérifier que Z permet de déterminer simplement les principales caractéristiques du système, dont son énergie moyenne $\langle E \rangle$ et son entropie statistique \tilde{S} , lesquelles s'identifient à la limite thermodynamique, à l'énergie interne $U = U(T, V)$ et à l'entropie $S = S(T, V)$ du système étudié.

a. Energie moyenne :

Par définition l'énergie moyenne du système est donnée par la relation [5-16]:

$$\langle E \rangle = \sum_l E_l P_l^c = \sum_l E_l \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} \quad (\text{I. 34})$$

or il est facile de vérifier l'identité:

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = - \sum_l E_l \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} = -\langle E \rangle \quad (\text{I. 35})$$

soit encore en repassant à la température T :

$$\langle E \rangle = K_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (\text{I. 36})$$

À la limite thermodynamique, $\langle E \rangle$ s'identifie à l'énergie interne U du système.

b. Capacité calorifique :

Elle est donnée par :

$$C_V = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = \frac{d}{dT} \left[- \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right] = - \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \left(\frac{d\beta}{dT} \right) \quad (\text{I. 37})$$

$$C_V = - \frac{1}{K_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (\text{I. 38})$$

c. Entropie canonique :

Il est possible d'établir l'expression de l'entropie du système étudié dans la situation canonique en utilisant la définition de l'entropie statistique (I . 39) sur un ensemble. En substituant dans cette expression celle de P_l^c correspondant à la distribution canonique, il vient:

$$\tilde{S} = -K_B \sum_l \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} \ln \left(\frac{e^{-\beta E_l}}{Z} \right) = -K_B \sum_l \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} (-\beta E_l - \ln Z) = \frac{\langle E \rangle}{T} + K \quad (\text{I. 39})$$

Où il a été tenu compte du fait que $\sum_l \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} = 1$ d'après la définition de la fonction de partition Z . Compte tenu de l'expression précédente de $\langle E \rangle$ il est possible de réécrire l'expression de l'entropie statistique du système sous la forme:

$$\tilde{S} = -K_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial T} + K_B \ln Z \quad (\text{I. 40})$$

À la limite thermodynamique, \tilde{S} s'identifie à l'entropie thermodynamique S du système.

d. Energie libre :

Les expressions précédentes de l'énergie interne et de l'entropie thermodynamique peuvent être réécrites sous une forme plus exploitable en introduisant l'énergie libre $F = F(T, V, N)$ du système, définie à partir de la fonction de partition Z par:

$$Z = e^{-\beta F} \quad (\text{I. 40})$$

soit encore :

$$F = -K_B T \ln Z \quad (\text{I. 41})$$

Il est alors facile de vérifier que l'énergie interne $U = U(T, V, N)$ et l'entropie $S = S(T, V, N)$ du système sont données en fonction de l'énergie libre F par:

$$U = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, N} \quad (\text{I. 42})$$

Et

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (\text{I. 43})$$

ce qui permet de retrouver l'identité classique:

$$F = U - TS \quad (\text{I. 44}).$$

e. Pression canonique :

La pression canonique p est définie par :

$$p = - \frac{\partial F}{\partial V} \quad (\text{I. 45})$$

f. Potentiel chimique canonique :

Le potentiel chimique canonique μ est défini par :

$$\mu = - \frac{\partial F}{\partial N} \quad (\text{I. 46})$$

III. Comparaison entre la situation canonique et la situation microcanonique :

Il est important de comprendre la différence entre la situation canonique et la situation microcanonique. La situation microcanonique est celle d'un système macroscopique isolé à l'équilibre, dont l'énergie est par conséquent fixée et ne peut donc fluctuer, c'est-à-dire que sa valeur est connue à δE près [17-18]. Contrairement à la situation précédente, la situation canonique, le système n'est pas isolé. Il échange de la chaleur avec un environnement qui est en contact avec lui. Par conséquent son énergie fluctue, c'est-à-dire elle peut prendre différentes valeurs, à chacune correspond une certaine probabilité. L'énergie du système est ici une variable interne et non plus un paramètre extérieur. C'est la température canonique, fixée par le thermostat qui remplace l'énergie comme paramètre extérieur. On note que la température

microscopique se calcule à partir des caractéristiques du système lui-même, alors qu'ici sa température canonique T est imposée de l'extérieur, par thermostat. Bien entendu, température canonique et température microcanonique se réfèrent à la même grandeur physique, c'est la situation du système considéré qui change d'un cas à l'autre [19].

IV. Grandeurs relatives au champ magnétiques :

Dans la région proche de la source du champ. Les dipôles magnétiques sont rencontrés dans les matériaux magnétiques et sont analogues aux dipôles électriques. Ils peuvent être représentés par des petites barres d'aimants composés des dipôles nord et sud au lieu des charges positive et négative des dipôles électriques. Les dipôles magnétiques sont influencés par le champ magnétique de manière similaire à l'influence des dipôles électriques par le champ électriques. A l'intérieur d'un champ magnétique, la force du champ exerce un couple. Ceci est apparent dans l'alignement de l'aiguille d'un compas magnétique (boussole) avec le champ magnétique de la terre.

Le champ magnétique externe appliqué est désigné par H [20]. S'il est généré par le moyen d'une bobine cylindrique formée de N boucles étroitement rapprochées, ayant une longueur l , et parcourue par un courant I , alors :

$$H = \frac{NI}{l} \quad (\text{I. 47})$$

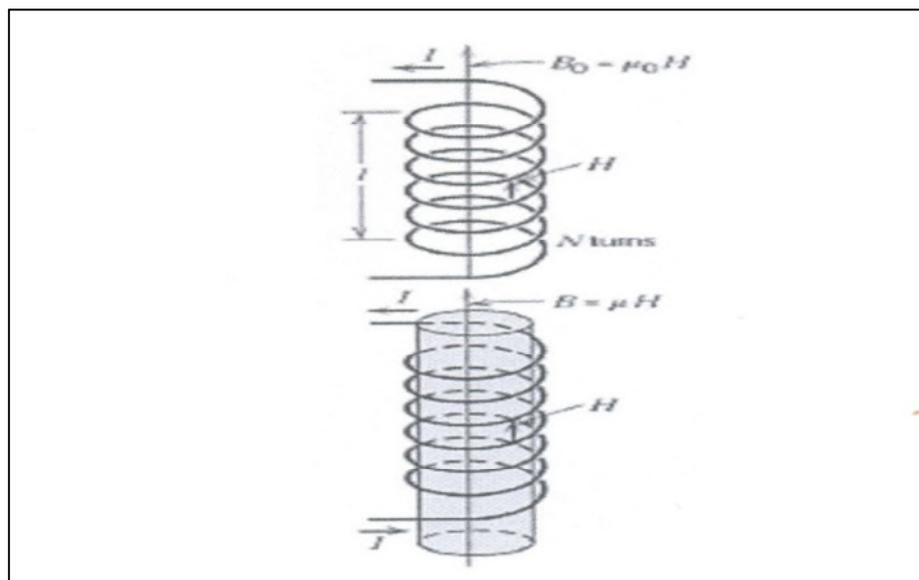


Figure (I, 1)- Champ et induction magnétique pour une bobine cylindrique.

Chapitre I: Eléments de la physique statistique et propriétés magnétiques

Il peut être généré par une boucle de courant, une barre d'aimant... L'unité de H est l'ampère par mètre ($A.m^{-1}$). L'induction magnétique, ou la densité du flux magnétiques, notée B , représente la valeur du champ magnétique interne dans une substance qui est soumis à un champ H . L'unité de B est le Tesla (ou weber par mètre carré W/m^2). B et H sont des vecteurs de champ. La valeur du champ magnétique et la densité du flux sont reliées par :

$$B = \mu H \quad (I. 48)$$

Le paramètre μ est appelé perméabilité et est une propriété du milieu ou H et B sont mesurés. Il représente une mesure du degré avec lequel le matériau peut être aimanté (magnétisé), ou la facilité avec laquelle un champ B peut être induit en présence d'un champ externe H [21-22]. Dans le vide :

$$B_0 = \mu_0 H \quad (I. 49)$$

Avec μ_0 la perméabilité magnétique du vide, est une constante universelle, sa valeur est $4\pi \cdot 10^{-7} H.m^{-1}$.

Plusieurs paramètres peuvent être utilisés pour décrire les propriétés magnétiques d'un solide. L'un de ces paramètres est le rapport entre la perméabilité magnétique dans un matériau et la perméabilité du vide :

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \quad (I. 50)$$

μ_r est appelée la perméabilité magnétique relative.

Une autre quantité M , appelée l'aimantation du solide, est définie par l'expression :

$$B = \mu_0 H + \mu_0 \langle M \rangle \quad (I. 51)$$

En présence d'un champ H , les moments magnétiques dans le matériau tendant à s'aligner avec le champ et à le renforcer par le biais de leurs champs magnétiques ; le terme $\mu_0 \langle M \rangle$ dans l'équation (I. 51) est une mesure de cette contribution.

La valeur de $\langle M \rangle$ est proportionnelle au champ appliqué [21] :

$$\langle M \rangle = \chi_m H \quad (I. 52)$$

χ_m est appelé susceptibilité magnétique, elle n'a pas d'unité. La susceptibilité magnétique et la perméabilité relative sont reliée par :

$$\chi_m = \mu_r - 1 \quad (\text{I. 53})$$

Il existe des analogues électriques pour chacun de ces paramètres magnétiques. B et H sont les champs, respectivement, analogues au déplacement diélectrique D et le champ électrique. La perméabilité magnétique μ est analogue à la permittivité ϵ ($D = \epsilon E$).

Les unités en magnétisme peuvent prêter à confusion, puisqu'il existe concrètement deux systèmes d'unité communément utilisés. Certains utilisent le système international SI (ou MKS) ; d'autres utilisent le système $cgs - emu$ (pour centimètres, grammes, seconde, électromagnétique unités) [22].

Quantité	Symbole	Unités SI	Unités egs-emu	Facteur de conversion
Induction magnétique	B	Tesla (weber/m ²)	Gauss	10^{-4}
Champ magnétique	H	A/m	Oersted	$10^3/4\pi$
Aimantation	M	A/m	emu/cm ³	10^3
Perméabilité du vide	μ_0	Weber/AM	Dimensionless	$10^{-7} \times 4\pi$
Perméabilité relative	μ_r	Dimensionless	Dimensionless	Dimensionless
Susceptibilité	χ_m	Weber/AM	emu/cm ³	$10^{-7} \times (4\pi)^2$

Tableau (I, 1)- Tableau des unités.

V. L'origine des moments magnétiques :

Les propriétés magnétiques macroscopiques des matériaux sont conséquence des moments magnétiques associés avec les électrons individuels. Certains de ces concepts sont relativement complexes et font appel aux principes de la mécanique quantique ; par conséquent, des simplifications sont faites pour une compréhension qualitative.

Chaque électron dans l'atome a un moment magnétique qui résulte de deux sources.

Une est reliée à son mouvement orbital au tour du noyau. Etant une charge en mouvement, un électron peut être considéré comme un petit circuit électronique qui génère un petit champ magnétique et ayant un moment magnétique le long de son axe de rotation.

Chapitre I: Eléments de la physique statistique et propriétés magnétiques

Chaque électron peut aussi être considéré comme autour de son propre axe ; l'autre moment magnétique est original de ce spin de l'électron qui est dirigé le long de son axe. Ainsi, chaque électron dans son atome peut être considéré comme étant un petit aimant ayant deux moments magnétiques permanents orbital et de spin [22] .

Le moment magnétique le plus fondamental est le magnéton de Bohr μ_B , qui a la valeur de $9,27 \cdot 10^{-24} Am^2$.

Pour chaque électron, le moment magnétique de spin est $\pm\mu_B$ (le signe plus pour haut ou up et le signe moins pour bas ou down). En plus, la contribution du moment magnétique orbital est égale à $m_1\mu_B$, m_1 étant le nombre quantique magnétique de l'électron.

Dans chaque atome individuel, le moment de spin. Par exemple, le moment de spin d'un électron up s'annulera avec celui d'un électron down. Le moment magnétique de tous ces électrons constitutifs, incluant les deux contributions : orbitale et de spin.

Pour un atome ayant des couches et des sous-couches électroniques complètement remplies, le moment magnétique total sera nul. De ce fait, les matériaux composés de tels atomes ne peuvent pas être magnétisés de manière permanente. Cette catégorie inclus les gaz rares (*He, Ne, Ar ... etc*) aussi bien que certains matériaux ioniques [23].

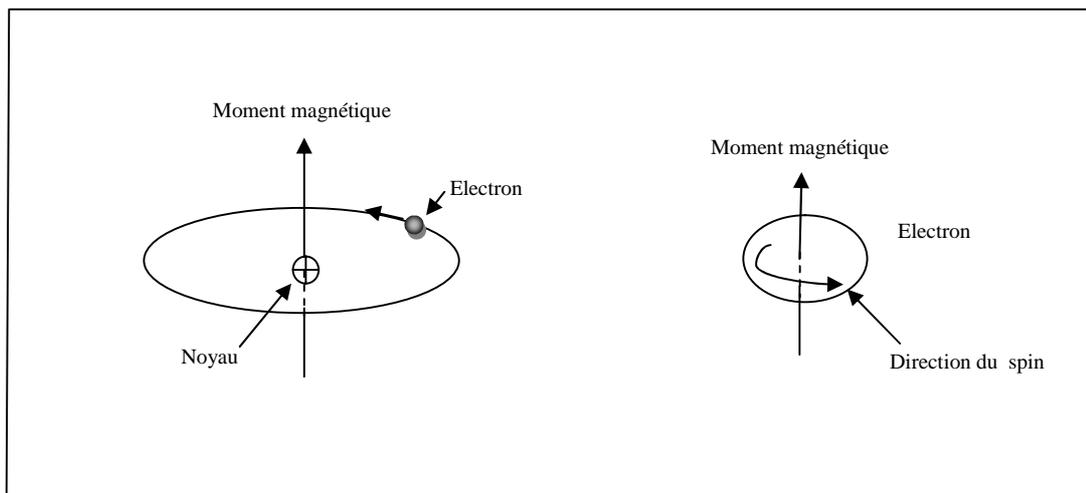


Figure (I, 2)- L'origine des moments magnétiques.

VI. Les types de magnétisme :

Les types de magnétisme incluent le diamagnétisme, le paramagnétisme et le ferromagnétisme [21-23]; en plus, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme sont considérés comme des sous-classes du ferromagnétisme.

Tous les matériaux exhibent au moins un de ces types de magnétisme, et le comportement dépendra de la réponse des électrons et des dipôles magnétiques et des atomes à l'application d'un champ magnétique externe appliqué.

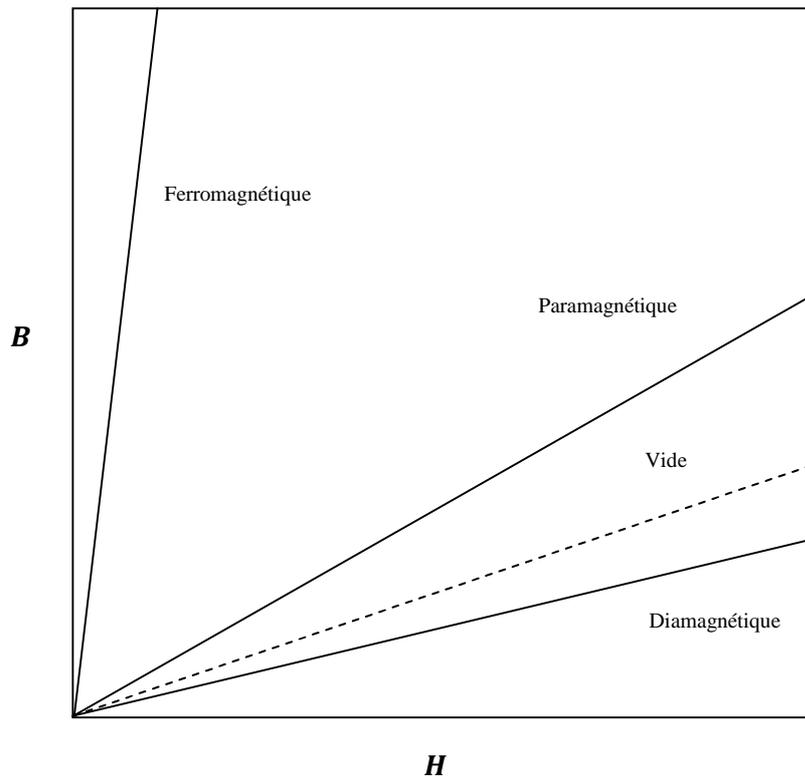


Figure (I, 3)- Les différents types du magnétisme.

La courbe (I,3) relative au vide est de pente égale à 1 ($\mu_r = \mu/\mu_0 = 1$)

1. Le diamagnétisme et le paramagnétisme :

Le diamagnétisme est une forme de magnétisme très faible qui n'est pas permanente et persiste seulement lorsqu'un champ externe est appliqué [24-25]. Il est induit par le changement dans le mouvement orbital des électrons à cause de l'application du champ magnétique. L'amplitude du moment magnétique induit est

extrêmement petite, et celui-là est dans une direction opposée au champ appliqué. Ainsi, la perméabilité relative μ_r est inférieure à l'unité (mais juste de très peu), et la susceptibilité magnétique est négative ; c'est-à-dire, l'amplitude du champ B dans le solide diamagnétique est inférieure à son amplitude dans le vide.

Le diamagnétisme est trouvé dans tous les matériaux ; mais parce qu'il est très faible, il peut être observé uniquement lorsque les autres types de magnétisme sont absents ou dans les supraconducteurs [26-27].

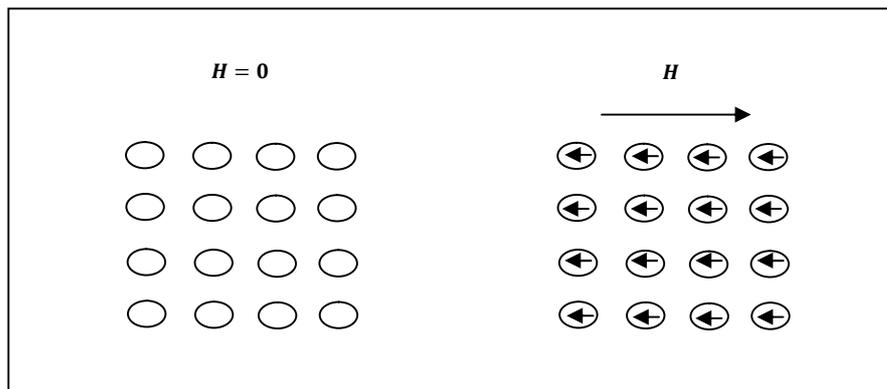
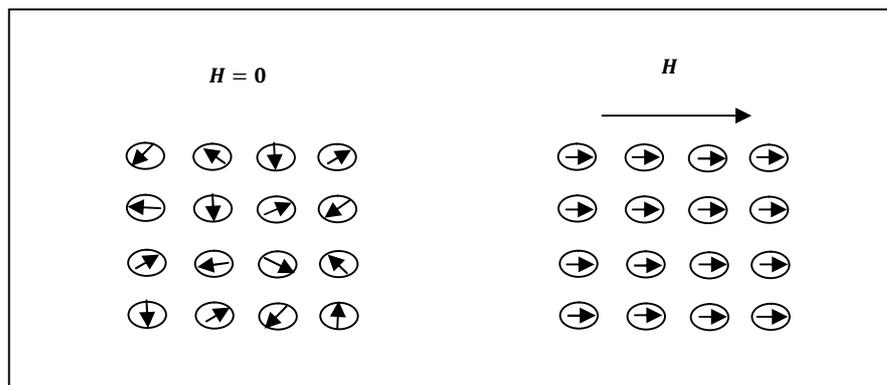


Figure (I, 4)- L'orientation des moments magnétiques (diamagnétisme).

Pour certains matériaux solides, chaque atome possède un moment dipolaire permanent à cause de leurs couches ou sous-couches non complètement remplies. En l'absence de champ magnétique externe, l'orientation de ce matériau ne possède pas une nette magnétisation macroscopique, ces dipôles atomiques sont libres de faire des rotations comme le Cuivre(Cu), le Zinc(Zn), l'Or(Au) et l'Argent(Ag), et le paramagnétisme [26-27] résulte lorsqu'ils s'alignent préférentiellement, par rotation, avec un champ externe appliqué, comme l'Aluminium(Al), le Platine(Pt) et le Manganèse(Mn).



Chapitre I: Eléments de la physique statistique et propriétés magnétiques

Figure (I, 5)- L'orientation des moments magnétiques (paramagnétisme).

Ces dipôles magnétiques sont influencés par le champ externe individuellement, et n'interagissent pas mutuellement. Dans la mesure où les dipôles s'alignent avec le champ externe, ils le renforcent, donnant lieu à une perméabilité relative μ_r supérieure à l'unité et à une susceptibilité magnétique positive relativement faible. Les susceptibilités des matériaux paramagnétiques vont d'environ 10^{-5} à 10^{-2} .

Les matériaux diamagnétiques et paramagnétiques [5-26] sont considérés comme étant non magnétiques parce qu'ils exhibent une magnétisation uniquement en présence d'un champ externe. Aussi, pour les deux types, la densité du flux B est presque la même que dans la vide.

Diamagnétiques		Paramagnétiques	
Matériaux	Susceptibilités χ_m (en unités SI)	Matériaux	Susceptibilités χ_m (en unités SI)
Oxide d'aluminium	-1.81×10^{-5}	Aluminium	2.07×10^{-5}
Cuivre	-0.96×10^{-5}	Chrome	3.13×10^{-4}
Or	-3.44×10^{-5}	Chlorure de chrome	1.51×10^{-3}
Mercure	-2.85×10^{-5}	Sulfate de manganèse	3.70×10^{-3}
Argent	-0.41×10^{-5}	Molybdène	1.19×10^{-4}
Silicium	-2.38×10^{-5}	Sodium	8.48×10^{-6}
Chlorure de sodium	-1.41×10^{-5}	Titane	1.81×10^{-4}
Zinc	-1.56×10^{-5}	Zirconium	1.09×10^{-4}

Tableau (I, 2)- Les valeurs de la susceptibilité magnétique pour certains matériaux.

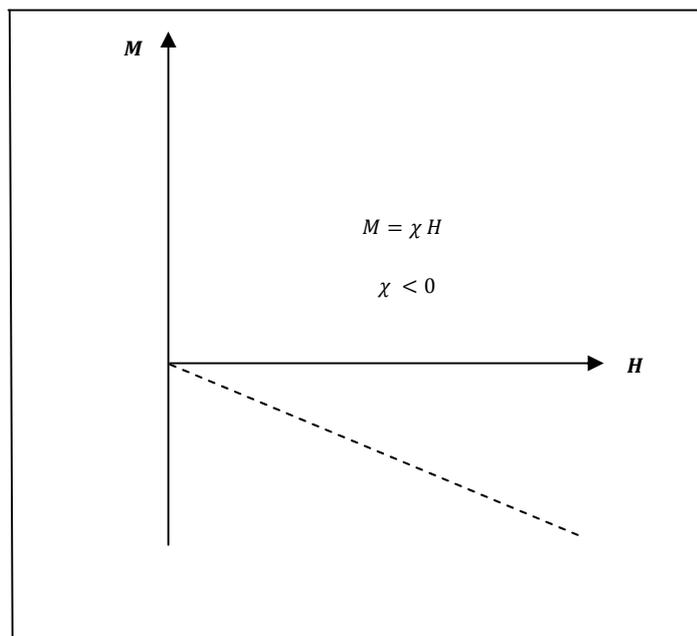


Figure (I, 6)- Comportement diamagnétique des matériaux.

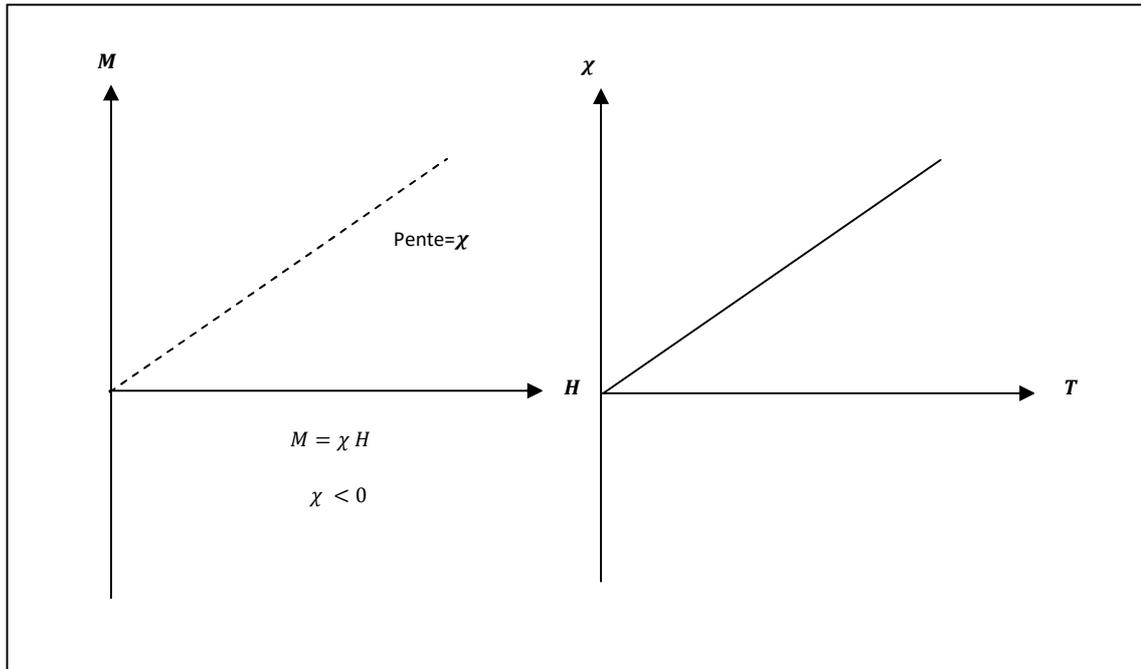


Figure (I, 7)- Comportement paramagnétique des matériaux.

2. Le ferromagnétisme :

Certains matériaux métalliques, possèdent un moment magnétique permanent en absence d'un champ externe, et manifestent une magnétisation permanente très importante :

Il s'agit du ferromagnétisme [28]. On l'observe dans les métaux de transitions : le fer(*Fe*) , le Cobalt(*Co*) , le Nickel(*Ni*) , et certains des matériaux de terres rares comme le gadolinium (*Gd*) . Des susceptibilités magnétiques aussi élevées que 10^{-6} sont possibles pour les matériaux ferromagnétiques, par conséquent $H \ll M$ et :

$$B = \mu_0 M \quad (\text{I. 54})$$

Les moments magnétiques permanents dans les matériaux ferromagnétiques résultent des moments magnétiques atomiques dus aux spins des électrons qui ne sont pas annulés par suite à la structure électronique de l'atome [29].

Il y a également une contribution du moment magnétique orbital qui est faible en comparaison avec le moment de spin. En plus, dans un matériau ferromagnétique, les

Chapitre I: Éléments de la physique statistique et propriétés magnétiques

interactions de couplage entre les moments des atomes adjacents leur permettent de s'aligner même en l'absence de champ externe. L'origine de ces forces de couplage n'est pas complètement comprise, mais il est généralement admis qu'elles découlent des structures électroniques de ces métaux. Cet alignement mutuel des spins existe dans des régions relativement larges du cristal, appelé domaines magnétiques.

La magnétisation maximale possible, ou magnétisation de saturation M_S d'un matériau ferromagnétique représente la magnétisation qui résulte lorsque tous les dipôles magnétiques dans une pièce de solide sont mutuellement alignés avec le champ externe. Il existe également une densité de flux de saturation B_S . La magnétisation de saturation est égale au produit du moment magnétique net pour chaque atome par le nombre des atomes présents.

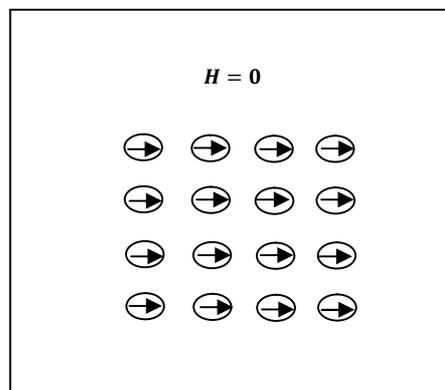


Figure (I, 8)- L'orientation des moments magnétiques ou $H=0$ (ferromagnétisme).

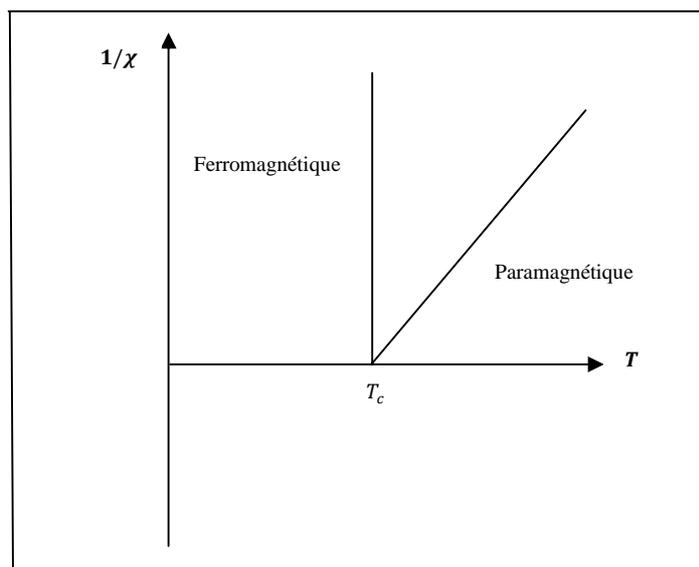


Figure (I, 9)- Comportement d'un matériaux ferromagnétique.

3. L'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme :

Ce phénomène de couplage de moments magnétiques entre atomes ou ions adjacents arrive dans d'autres matériaux que ceux qui sont ferromagnétiques. Le couplage résulte en un alignement antiparallèle, c'est-à-dire dans directions exactement opposées, ce phénomène est dit antiferromagnétisme [30].

Le ferrimagnétisme correspond à un arrangement partiellement antiparallèle des moments magnétiques :

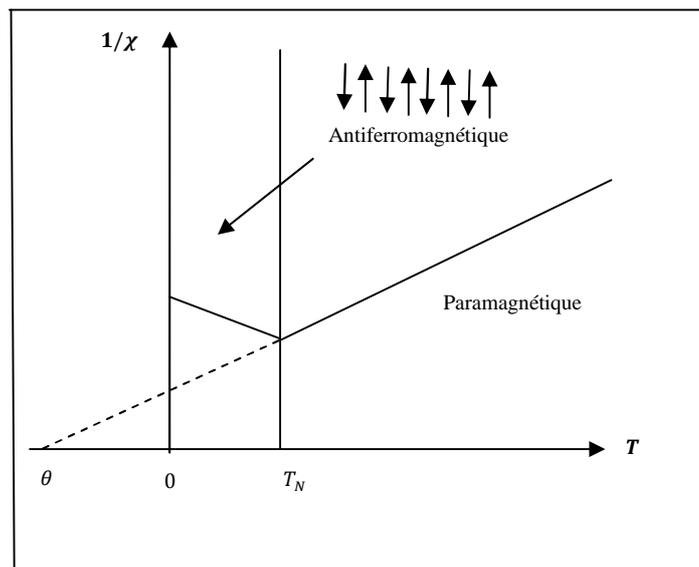


Figure (I, 10)- Comportement d'un matériaux antiferromagnétique.

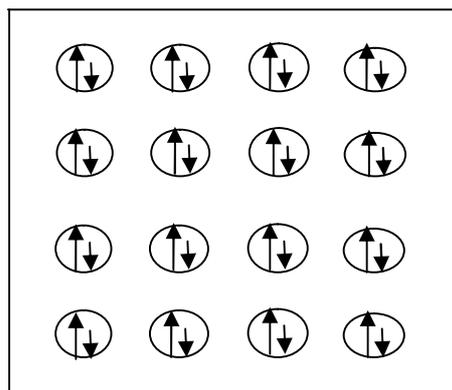


Figure (I, 11)- Arrangement des moments magnétiques dans un matériaux ferrimagnétique.

VII. L'influence de la température sur le comportement magnétique :

La température peut aussi influencer les caractéristiques des matériaux. L'augmentation de température augmente l'amplitude des vibrations thermiques des atomes [31].

Les moments magnétiques des atomes sont libres de tourner ; ainsi, avec l'augmentation de la température, le mouvement thermique des atomes neutralise les forces de couplage entre les dipôles atomiques adjacents, causant des désalignements, avec ou sans la présence de champ magnétique externe. Ceci résulte en une décroissance de la magnétisation dans les matériaux ferro [32]. La magnétisation de saturation est maximale à $0 K$, lorsque les vibrations thermiques sont au minimum.

Avec l'augmentation de la température, la magnétisation de saturation diminue graduellement et puis chute abruptement à zéro à une température appelée le point de Curie T_c . A la température T_c , les forces de couplage sont complètement détruites, de sorte que pour des températures supérieures à T_c , les matériaux ferromagnétiques sont tous paramagnétiques.

La valeur de la température de Curie [25-33] varie d'un matériau à un autre ; par exemple, pour le fer, le cobalt, le nickel, et le Fe_3O_4 les valeurs respectives des températures de Curie sont 768, 1120, 335 et 585°C.

L'antiferromagnétisme est également affecté par la température ; ce comportement disparaît à ce qui est appelé la température de Néel T_N [34]. A des températures supérieures à ce point, les matériaux antiferromagnétiques deviennent également paramagnétiques.

La température de Néel T_N , est la température au-dessus de laquelle un matériau antiferromagnétique ou ferrimagnétique devient paramagnétique. Au-dessus de cette température, l'énergie thermique est suffisante pour rompre l'ordre magnétique microscopique de la matière.

La température de Néel est analogue à la température de Curie T_c , pour les matériaux ferromagnétiques. Elle porte le nom de Louis Néel (1904-2000), qui a reçu le prix Nobel de physique en 1970 pour ses travaux dans ce domaine.

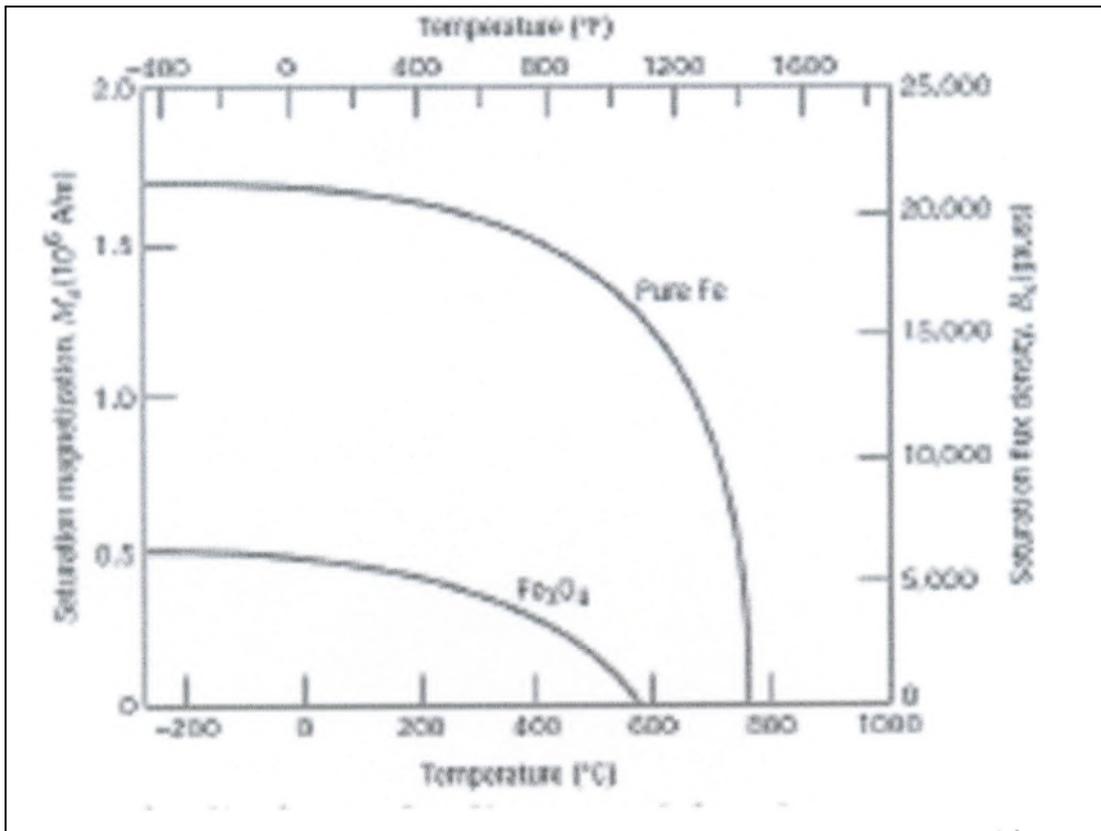


Figure (I, 12)- L'influence de la température sur le comportement critique.

CHAPITRE II

I. généralités sur les transitions de phase :

De manière générale, la plupart des matériaux peuvent exister sous différentes phases. Chacune de ces phases se caractérise par des propriétés macroscopiques différentes [35] qui sont fonction d'un ensemble de paramètres intensifs tels que la température, la pression, un champ électrique ou magnétique. La variation continue d'un de ces paramètres permet de passer d'une phase à une autre [36]. On parle alors de transition de phase, celle-ci s'accompagne de changements de propriétés tels que :

- Un réarrangement structural du réseau cristallin.
- Le changement de comportement magnétique, de ferromagnétique à paramagnétique au point de Curie.

Le phénomène de transition de phase occupe une place importante en physique de la matière condensée, pour diverses raisons : sa fréquence et sa diversité, son caractère spectaculaire et l'intérêt des problèmes conceptuels qui s'y rattachent [37].

Commençons par prendre un exemple bien connu, l'eau et ses diverses phases : solide (glace), liquide, gaz (vapeur), qu'on peut distinguer dans l'expérience quotidienne. Les transitions d'une phase à l'autre, qu'un changement de température permet d'observer, sont très familières :

- Gel (dégel) : transition solide-liquide
- Ebullition (condensation) : transition liquide-gaz
- Sublimation : transition solide-gaz

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

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

Pour un système donné, on fait varier un certain nombre de paramètres [38]

Chapitre II: Les transitions de phase

(température, pression, champ extérieur...etc.) pour mettre en évidence les diverses phases du système et en explorer les domaines d'existence, et on consigne les résultats sur une carte : on détermine un diagramme de phase.

Pour fixer quelques idées, considérons quatre diagrammes de phases particuliers [39]:

La figure (II. 1) est le diagramme de phase (pression, température) montrant les domaines d'existence de trois phases (solide, gaz, liquide). On note deux points critiques (Pression, température), point d'arrêt à la frontière entre domaines liquides et gaz. En tournant autour du point critique, on peut passer continument de la phase liquide à la phase gazeuse sans transition discontinue.

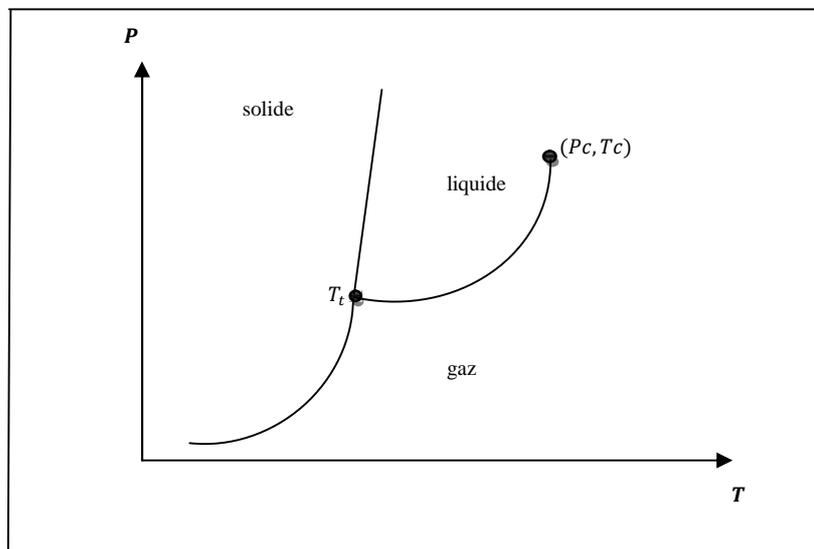


Figure (II, 1)- Le diagramme de phase de l'eau, avec ces trois phases stables : solide, liquide, gaz dans le plan (Pression, Température). La ligne de transition liquide-gaz présente un point d'arrêt.

Le deuxième diagramme de la figure (II. 2) est le diagramme de phase (champ magnétique, température) d'un corps qui présente une transition ferromagnétique. Ce diagramme présente une frontière sur l'axe $H = 0$ avec un point d'arrêt, qu'on appelle aussi point critique. En champ nul, à haute température on observe une phase désordonnée, dite paramagnétique sans aimantation. Lorsque $T = Tc$, au point critique, une transition se produit, et pour $T < Tc$, on observe une phase ordonnée, dite ferromagnétique, présentant une aimantation spontanée. Il y a une analogie avec la transition liquide-gaz, H et P jouant les rôles similaires.

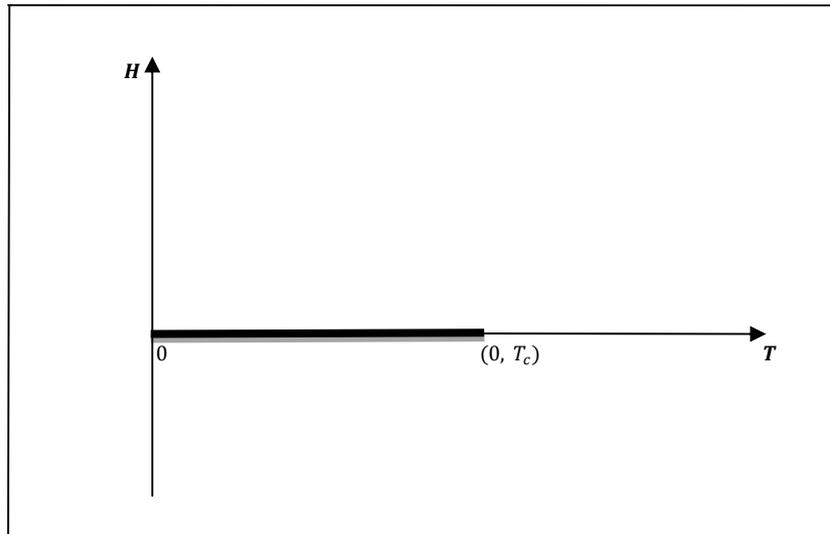


Figure (II, 2)- Le diagramme de phase d'un ferromagnétique dans le plan (champ magnétique, Température). Il existe une ligne de discontinuité, sur l'axe $H = 0$, pour une température inférieure à la température critique T_c .

Dans le diagramme de la figure (II. 3), si on traverse la frontière ($H = 0 ; 0 < T < T_c$), on observe un saut de l'aimantation. Ce saut diminue quand le point de franchissement de la frontière se rapproche du point critique. Au point critique, il n'y a plus de saut d'aimantation.

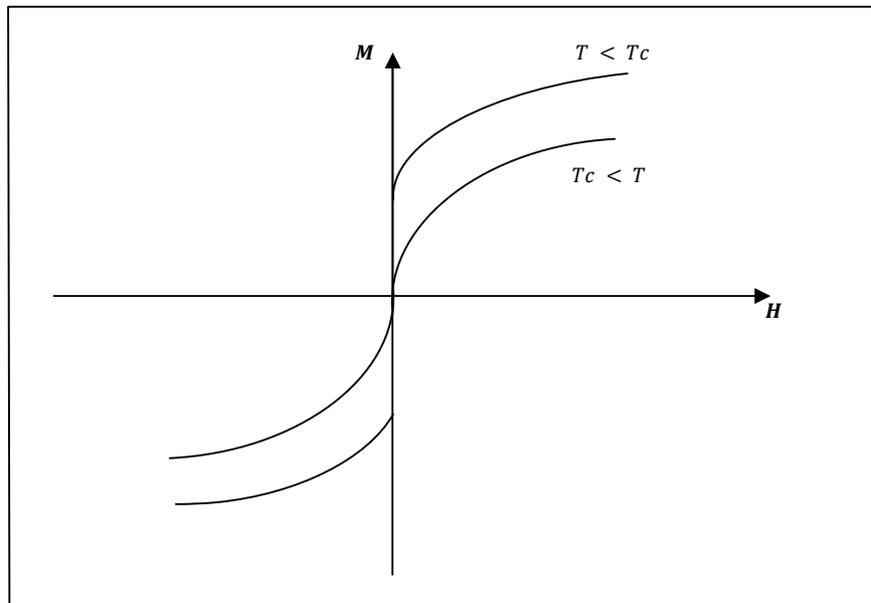


Figure (II, 3)- Courbe d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique à différentes températures. Pour $T < T_c$, l'aimantation présente une discontinuité quand le champ

Chapitre II: Les transitions de phase

magnétique change de signe. Cette discontinuité n'existe plus pour $T_c < T$.

Le dernier diagramme de la figure (II. 4) est un diagramme (champ magnétique, température) mais pour un corps qui présente une transition antiferromagnétique (avec une aimantation alternée dans la phase ordonnée). On observe sur ce diagramme deux domaines séparés par une ligne (une partie en trait épais, l'autre en trait fin) : quand on franchit la partie épaisse, on observe un saut de l'aimantation alternée ; quand on franchit la ligne fine, il n'y a pas de saut. Cette dernière ligne est une ligne de point critique (puisque'il n'y a pas de saut). La ligne de point critique a un point d'arrêt, sur sa ligne de transition, quand appelle un point tricritique.

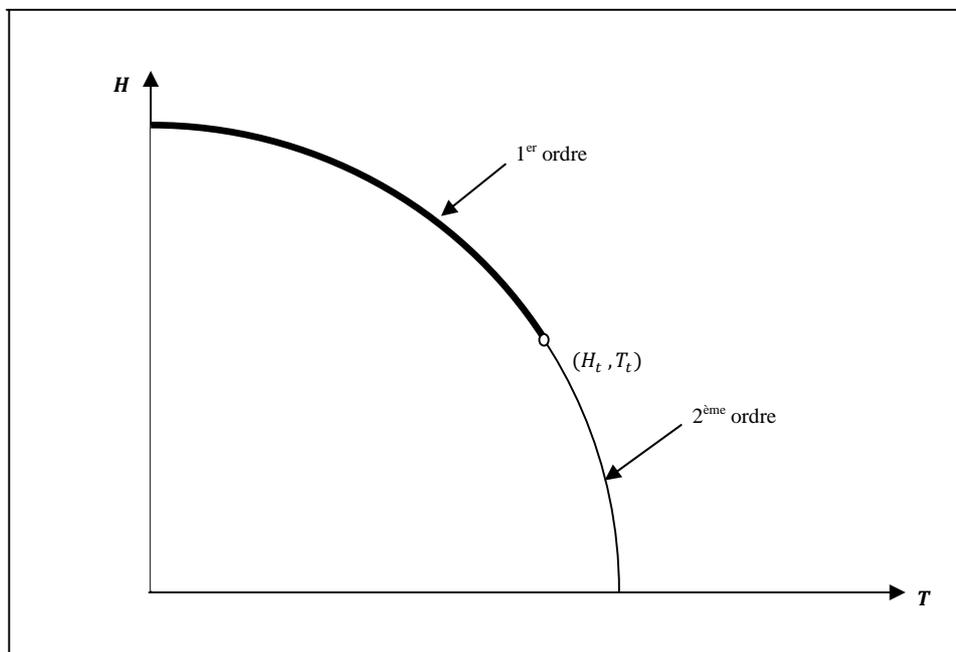


Figure (II, 4)- Exemple d'un diagramme de phase montrant un point tricritique, pour un matériau antiferromagnétique, l'ordre de transition change sous l'effet d'un champ magnétique uniforme.

Les transitions de phase peuvent aussi être vues comme des bifurcations liées à une brisure spontanée de symétrie.

Ceci se voit clairement si l'on représente non plus le diagramme de phase (II, 5), mais le paramètre d'ordre en fonction du paramètre de contrôle.

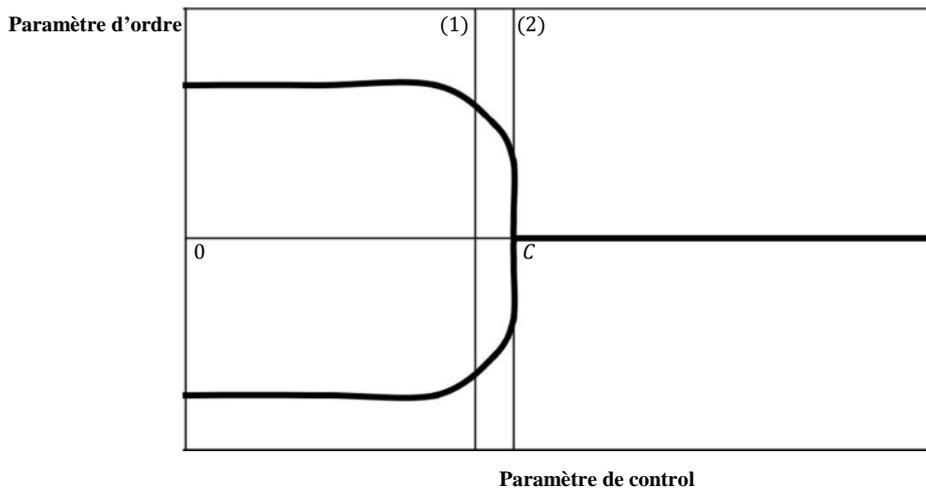


Figure (II, 5)- Diagramme de phase dans le plans (paramètre contrôle « ex : densité, aimantation », paramètre d'ordre « ex : température »).

Isotrope et homogène au-dessus de la température critique, la matière bifurque, à basse température, dans une région macroscopique donnée, vers une orientation magnétique ou une densité préférentielle. En l'absence d'excitation extérieure (ici un champ magnétique ou une pression extérieure) rien ne permet de prévoir à partir des équations ou des conditions aux limites qui déterminent le système, la branche choisie en un point donné de l'espace.

Si l'on baisse la température du système au-dessus de la température critique (transformation (1) en figure), on peut voir une variation discontinue du paramètre d'ordre à la transition. D'une réalisation microscopique à l'autre du système (ou d'une région spatiale à l'autre, pour des systèmes de taille macroscopique) la configuration du système change de façon discontinue (transition de phase du premier ordre). A la température de bifurcation ou température critique (transformation (2) en figure), le paramètre d'ordre varie continûment, tandis que certaines grandeurs thermodynamiques (susceptibilité, compressibilité, chaleur massique) divergent, à cause d'une augmentation dramatique de la longueur de corrélation et de la taille caractéristique des fluctuations [39], qui deviennent comparables à la taille du système (transition de phase du deuxième ordre).

II. Classification des transitions de phase :

Les domaines des transitions de phase connaissent, à la fois, une diversité foisonnante extrêmement riche, mais aussi de nombreuses propriétés communes, voire universelles, c'est pourquoi est apparue, très tôt, la nécessité d'apporter une certaine classification dans cette diversité [40]. Tout naturellement, les transitions de phase étant caractérisées par leurs singularités thermodynamiques, c'est par la nature de ces singularités qu'on a tout d'abord, tenté d'effectuer cette classification. Mais, avec l'évolution historique de la thermodynamique et de la physique statistique, diverses façons de discuter ces singularités ont été, en leur temps, proposées. Ces différentes classifications traduisent l'évolution conceptuelle des méthodes d'étude des transitions de phase.

1. Classification d'Ehrenfest (1880 – 1933) : [41]

Considérant le potentiel thermodynamique :

$$G = U - TS + pV \quad (\text{II}, 1)$$

comme on l'a dit plus haut, Ehrenfest proposa d'appeler transition du premier ordre les transitions s'accompagnant de discontinuités dans les grandeurs physique comme l'entropie, qui sont liées à des dérivées premières du potentiel thermodynamique, et transition du second ordre les transitions s'accompagnant de discontinuités dans les grandeurs physique, comme la chaleur spécifique, qui sont reliées à des dérivées secondes du potentiel thermodynamique, les dérivées premières restant continues [41].

Plus généralement si toute les dérivées d'ordre $(n - 1)$ de G sont continues et que la dérivée d'ordre n est discontinue, la transition sera d'ordre n . pour illustrer tout cela,

considérons dans le plan des variables intensives (p, T) de la figure (II, 6) [42], soit une de transition séparant deux phases I et II . En tout point de la courbe, la condition pour que l'équilibre soit assuré est donnée par :

$$G_I(p, T) = G_{II}(p, T) \quad (\text{II}, 2)$$

Chapitre II: Les transitions de phase

Ou G_I et G_{II} sont les potentiels thermodynamiques des deux phases.

En évoluant le long de la ligne de transition de phase, du point M vers le point M' voisin, on peut écrire :

$$dG_I = -S_I dT + V_I dp \quad (\text{II}, 3)$$

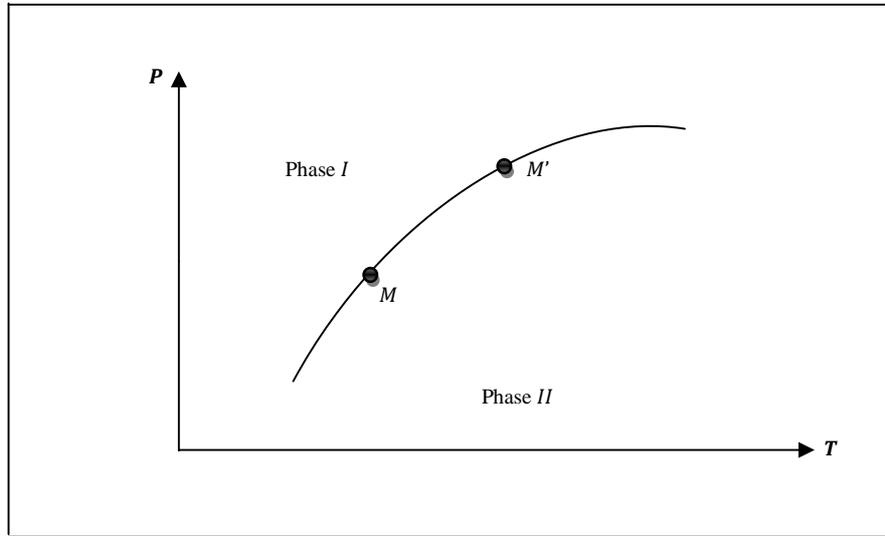


Figure (II, 6)- Exemple de schéma illustrant la classification des transitions de phase selon Ehrenfest.

$$dG_{II} = -S_{II} dT + V_{II} dp \quad (\text{II}, 4)$$

Ou les quantités V_j et S_j sont les volumes molaires et entropies des deux phases.

Comme, on choisit avoir $dG_I = dG_{II}$, il vient :

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{courbe}} = \frac{S_I - S_{II}}{V_I - V_{II}} \quad (\text{II}, 5)$$

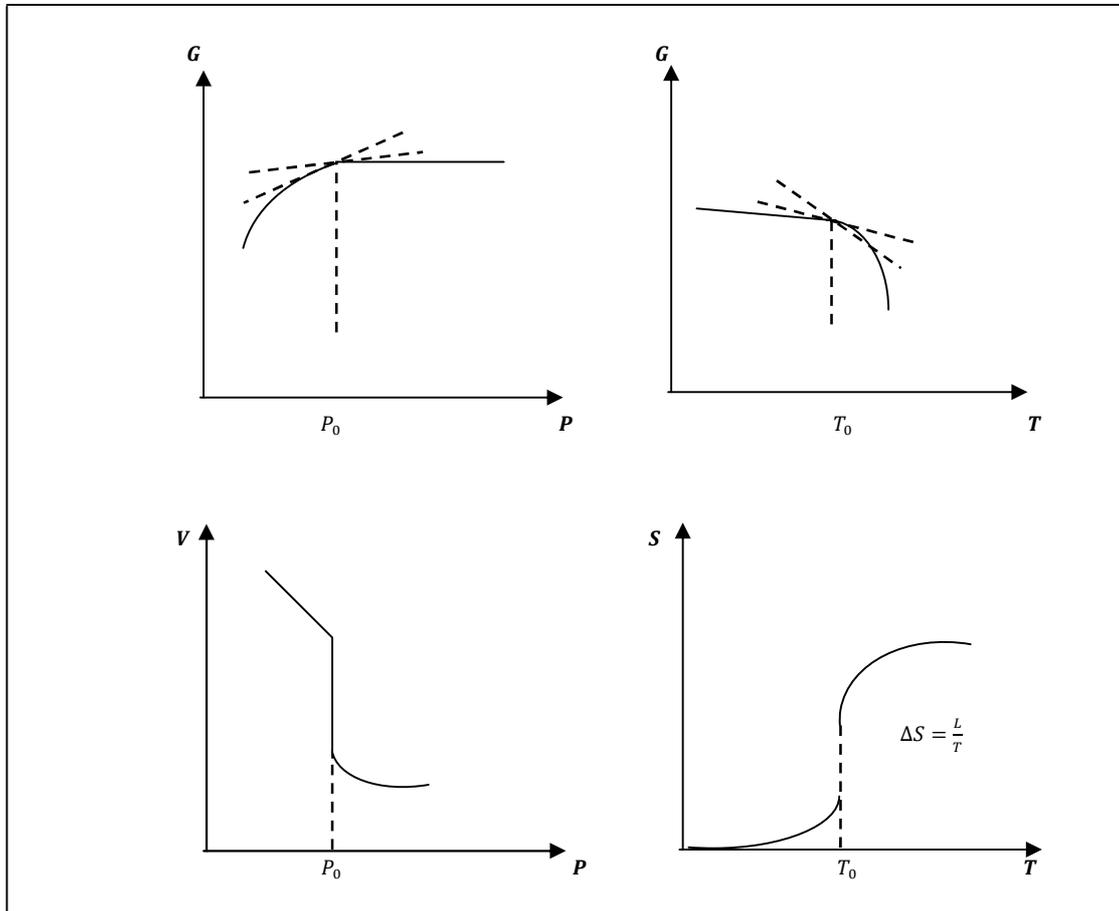
On introduit la chaleur latente de la transition L , reliée au saut d'entropie ΔS par la relation $L = T \Delta S$, et la discontinuité du volume molaire à la transition ΔV .

C'est la relation de Clapeyron. Nous sommes ici dans le cas d'un changement de phase du 1^{er} ordre [43], puisque que les dérivées premières de G (ici S et V) sont discontinues.

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

$$dS_I = \frac{1}{T} C_{pI} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T_I} dp \quad (\text{II}, 6)$$

$$dS_{II} = \frac{1}{T} C_{pII} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T_{II}} dp \quad (\text{II}, 7)$$



Figures (II, 7)- Transitions de phase du premier ordre.

Suivant la définition d'Ehrenfest une transition est dite du premier ordre lorsqu'une dérivé première au moins de l'enthalpie libre (énergie de Gibbs) G du système par rapport aux variables du système est discontinu au cours de cette transition [44]. Par exemple, la fusion est une transition au premier ordre car le volume $V = \frac{\partial G}{\partial p}$ est différent pour le liquide et pour le solide ; il en est de même de l'entropie puisque $S = -\frac{\partial G}{\partial T}$.

D'où une autre relation similaire, mais pour une transition du 2^{ème} ordre [43]:

$$\left(\frac{dp}{dT} \right)_{\text{courbe}} = \frac{1}{T} \frac{\Delta C_p}{\Delta \left(\left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T \right)} = \frac{1}{TV} \frac{\Delta C_p}{\Delta \alpha} \quad (\text{II}, 8)$$

Chapitre II: Les transitions de phase

Ou $\alpha = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T$ est le coefficient de dilatation isotherme.

De même, en écrivant, pour une transition du second ordre, $dV_I = dV_{II}$, on obtient :

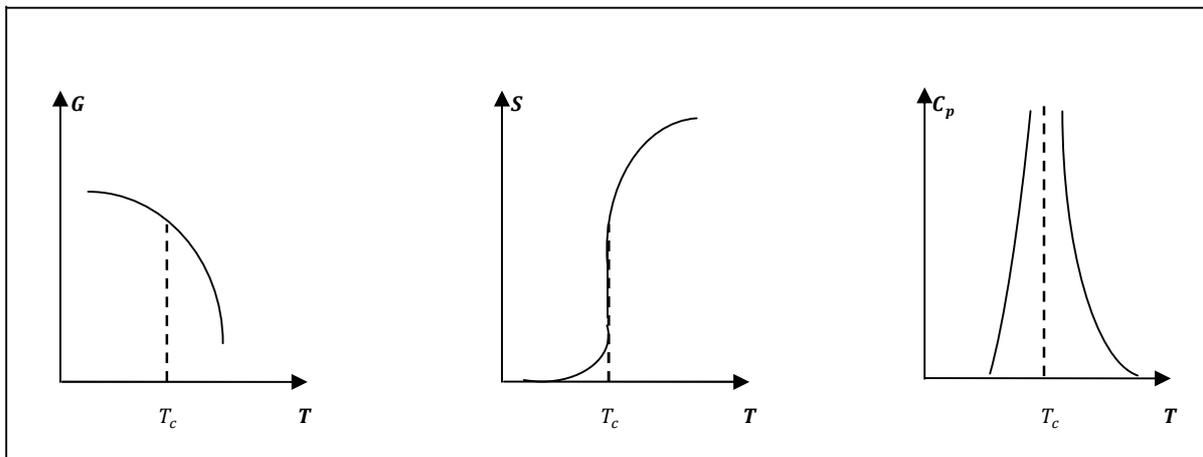
$$\left(\frac{dp}{dT} \right)_{\text{courbe}} = \frac{1}{T} \frac{\Delta\alpha}{\Delta\chi_T} \quad (\text{II}, 9)$$

Ou $\alpha = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p$ est la compressibilité isotherme.

A partir des équations (II, 8) et (II, 9), on obtient :

$$TV(\Delta\alpha)^2 = \Delta C_p \Delta\chi_T \quad (\text{II}, 10)$$

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



Figures (II, 8)- Transitions de phase du second ordre.

Notons que, selon cette définition de l'ordre de la transition, une transition peut être d'ordre n , sans limitation sur la valeur de n .

Selon Ehrenfest une transition de phase qui n'est pas du premier ordre (ou toutes les dérivées premières de G sont donc continues) est du deuxième ordre si une des dérivées secondes au moins de G par rapport aux variables du système est discontinue au cours de la transition. Il est devenu nécessaire de généraliser cette définition sous la forme

suivante : la transition de phase est du deuxième ordre si une des dérivées secondes au moins de G par rapport aux variables du système présente une singularité lors de la transition (la discontinuité n'étant qu'un cas particulier de la singularité). Comme exemple, la capacité calorifique à pression constante est proportionnelle à la dérivée seconde de l'enthalpie libre par rapport à la température puisque d'une part $C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p$ et d'autre part $= - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p$. Or elle est discontinue en un point A : la transition en un tel point est donc du second ordre [44].

2. Classification de Landau (1908 – 1968)

En fait, si la classification d'Ehrenfest des transitions de phases a le grand mérite de mettre en évidence les similitudes entre les phénomènes aussi différents que le magnétisme, la ferroélectricité, la supraconductivité et la transition liquide-gaz au point critique, elle se limite cependant à une vision thermodynamique des phénomènes [45-46]. Si celle-ci est incontestablement importante, elle n'est toutefois pas suffisante. Un physicien comme L.D. Landau a fait remarquer [47-48], en 1937, qu'une transition de phase sans chaleur latente s'accompagnait d'un changement de symétrie (à l'exception de la transition liquide/gaz au point critique qui est spécifique). Ainsi, dans le cas d'un matériau magnétique celui-ci n'a pas de moment magnétique permanent au-dessus de sa température de Curie (état paramagnétique), au-dessous de cette température au revanche, il possède une aimantation permanente orientée dans une certaine direction (état ferromagnétique).

On dit que la symétrie a été à la brisée à la transition : en dessous de la température de Curie, le matériau n'est invariant que par la rotation autour d'un axe orienté dans la direction de l'aimantation. Les questions de symétrie ont donc une grande importance dans l'étude des phénomènes de transition de phases. Landau a associé à ces considérations sur les changements ou les brisures de symétrie accompagnant un phénomène de transition de phase, la notion de paramètre d'ordre. Le paramètre d'ordre est de façon générale, une grandeur physique de caractère extensif qui est nulle dans la phase la plus symétrique (ou la plus désordonnée), et non nulle dans la phase la moins symétrique. Cette notion de paramètre d'ordre a une signification qualitative évidente : lors d'un abaissement de la température, on accroît l'ordre du système. Lorsqu'on refroidit un liquide, on le solidifie en traversant le point de solidification (le solide

Chapitre II: Les transitions de phase

crystallin est plus ordonné que le liquide). De même, si on refroidit un matériau ferromagnétique en dessous de son point de Curie on augmente l'ordre magnétique dans le système (une aimantation microscopique apparaît ce qui traduit l'existence d'un ordre magnétique).

Ainsi que dans le cas du magnétisme, le paramètre d'ordre et l'aimantation, dans le cas de la ferroélectricité, c'est la polarisation électrique. Le choix du paramètre d'ordre n'est pas toujours évident. Par exemple, dans le cas de la phase superfluide et des électrons associés à la supraconductivité.

A l'aide de cette notion de paramètre d'ordre, on peut ainsi distinguer deux types de transition :

- Les transitions sans paramètre d'ordre pour lesquelles les groupes de symétrie des deux phases sont tels qu'aucun n'est strictement inclus dans l'autre : elles sont toujours du premier ordre (avec chaleur latente) au sens d'Ehrenfest.
- Les transitions pour lesquelles on peut définir un paramètre d'ordre, et qui sont telles que le groupe de symétrie de la phase la moins symétrique est un sous-groupe des groupes de symétrie de la phase la plus symétrique. Si le paramètre est discontinu à la transition, celle-ci est du premier ordre au sens d'Ehrenfest ; si celui-ci est continu à la transition, celle-ci est second ordre (sans chaleur latente).

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

III. Transitions de phase et paramètres d'ordre associés :

Le concept du paramètre d'ordre a été présenté par Lev LANDAU (1937) à partir de considération sur le degré de la symétrie des phases sous lequel on peut rencontrer un même matériau ; cette variable thermodynamique aura la propriété d'être nulle au-dessus de la température critique et non nulle au-dessous. Le paramètre d'ordre

Chapitre II: Les transitions de phase

est en générale lui-même en fonction de variable d'état comme la température et la pression.

On a représenté sur le tableau (II, 1) quelques paramètres d'ordre P choisis pour différentes catégories de transition de phase.

Nature de la transition	Paramètre d'ordre P	Variable thermodynamique conjuguée
Liquide-Gaz	$ \rho_L - \rho_g $	μ
Ferromagnétique-Paramagnétique	Aimantation M	Champ magnétique H
Antiferromagnétique-Paramagnétique	Aimantation de sous réseau M_1 et M_2	N'a pas de sens physique
Ferroélectrique-Paraélectrique	Polarisation électrique P	Champ électrique E
Ordres - Désordres dans les alliages	Différence de probabilités d'occupations de deux sites	Différence de potentiel chimique
Supraconductivité	Gap supraconducteur Δ	N'a pas de sens physique
Superfluidité	Fonction d'onde de la phase superfluide	N'a pas de sens physique

Tableau (II, 1)- Transitions de phase et paramètre d'ordre associés.

IV. Théorie de Landau des transitions de phase :

Elle décrit une transition de phase supposée initialement continue et caractérisé par un paramètre d'ordre m nul dans la phase de haute température et non nul en dessous du point de transition [49-50]. A la température T , l'état d'équilibre stable correspond à une valeur de qui minimise l'énergie libre $F(T, M)$.

Soit T_c la température de transition, on doit avoir :

Chapitre II: Les transitions de phase

$$m = 0 \text{ si } T > T_C \text{ et } m \neq 0 \text{ si } T < T_C \quad (\text{II}, 11)$$

Le paramètre d'ordre étant supposé continu à T_C , il est naturel d'écrire un développement de la fonction énergie libre $F(T, M)$ en puissances de m au voisinage sous la forme suivante :

$$F(T, M) = F_0(T) + A_0(T)m + A(T)m^2 + B(T)m^3 + C(T)m^4 + \dots \quad (\text{II}, 12)$$

Cette expression de $F(T, M)$ doit être invariante par les opérations de symétrie du groupe de la phase haute température (en réalité, la phase désordonnée). Sur la figure, nous avons représenté schématiquement l'évolution de l'énergie en fonction du paramètre d'ordre pour différentes températures.

Pour $T > T_C$, l'énergie libre est minimale pour $m = 0$; aussi le développement précédent ne comporte pas de terme du premier degré en m (car n'est pas invariant par toutes les opérations de symétrie). En outre, $A(T)$ doit être positif.

En revanche, pour $T < T_C$, l'énergie libre $F(T, M)$ est minimale pour une valeur de $m \neq 0$ et $A(T)$ doit être négatif. $A(T)$ représente la concavité en $m = 0$ de l'énergie libre $F(T, M)$. La concavité est positive pour $T > T_C$ et négative pour $T < T_C$, au point de transition, cette concavité est nulle, et par conséquent, $A(T) = 0$. La forme la plus simple de la fonction $A(T)$ qui satisfait à toutes ces conditions est $A(T) = a(T - T_C)$ où la constante a est positive. C'est naturellement cette expression qui avait été initialement retenue par Landau.

Des études plus récentes [51] ont néanmoins montré qu'un tel développement de l'énergie libre $F(T, m)$ n'est pas valide dans un petit domaine de température autour de T_C , du fait des fluctuations critiques du paramètre d'ordre, grandes au voisinage de la transition du deuxième ordre.

Pour que le point de transition soit lui-même stable, il est nécessaire que $F(T_C, m)$ soit minimale en $m = 0$, ce qui impose : $B(T_C) = 0$ et $C(T_C) > 0$.

Il serait fortuit qu'au point de transition, $A(T)$ et $B(T)$ s'annulent simultanément, aussi est-on amené à considérer que $B(T)$ est identiquement nul. Par ailleurs, $C(T)$ étant positif à $T = T_C$, il doit le rester au voisinage immédiat de T_C , il est légitime de remplacer $C(T)$ par une constante c positive.

Chapitre II: Les transitions de phase

Une remarque importante est que, pour un système concret, le développement de l'énergie $F(T, m)$ est déterminé par la brisure de symétrie. Ainsi, pour certaines brisures de symétrie, un terme cubique est-il autorisé dans le développement de l'énergie libre : la transition ne peut alors être continue, en termes de théorie des groupes, car il est possible de former un terme d'ordre 3 qui est invariant par les opérations de symétrie de la phase de haute température (le critère dit de Landau n'est pas satisfait) [52].

Ainsi, pour une transition de phase du deuxième ordre, arrive-t-on au voisinage de T_C à un développement de la forme :

$$F(T, m) = F_0(T) + a(T - T_C)m^2 + cm^4 \quad (\text{II}, 13)$$

La valeur de m qui rend cette expression minimale est solution de l'équation :

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 2a(T - T_C)m + 4cm^3 = 0 \quad (\text{II}, 14)$$

Cette équation n'a qu'une seule solution $m = 0$ si $T > T_C$, tandis qu'elle en a trois solutions, $m = 0$ et $m = \pm \sqrt{\frac{a(T_C - T)}{2c}}$ si $T < T_C$.

Ces résultats apparaissent clairement sur la figure (II, 9). On constate que pour $T < T_C$, la solution $m = 0$ est à rejeter, car elle correspond à un minimum de $F(T, m)$, c'est-à-dire un état d'équilibre instable.

Le résultat qui découle de cette approche est, qu'au voisinage de T_C , le paramètre d'ordre m se comporte comme $\sqrt{T_C - T}$.

Notons que les deux états ordonnés pour $m > 0$ et $m < 0$ sont de même énergie. Ils correspondent, par exemple, pour le ferromagnétique à deux sens possible de l'aimantation. Pour une température inférieure à T_C , le système peut être décomposé en deux sous-systèmes pour chacun desquels le paramètre d'ordre m a un signe défini. Un tel sous-système est appelé domaine.

V. Comportement de quelques grandeurs physiques :

Maintenant, nous allons étudier le comportement de la chaleur spécifique et de la susceptibilité au voisinage du point de transition [53]. Par définition, la chaleur spécifique est donnée par la relation :

$$C_p = T \frac{dS}{dT} \text{ ou } S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - am^2 \quad (\text{II}, 15)$$

Dans la phase de haute température c'est-à-dire la phase désordonnée, m est identiquement nul et, au voisinage de T_C , la chaleur spécifique est donnée par :

$$C_p = -T \left. \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right|_{T=T_C} \quad (\text{II}, 16)$$

Dans la phase de base température c'est-à-dire la phase ordonnée, il faut tenir compte du terme au m^2 dans l'entropie et, au voisinage de T_C , la chaleur spécifique est donnée par :

$$C_p = -T \left. \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right|_{T=T_C} + a^2 \frac{T_C}{2c} \quad (\text{II}, 17)$$

A la température de transition T_C , la chaleur spécifique est discontinue. Au voisinage de T_C , sa valeur pour $T < T_C$ est supérieure à sa valeur pour $T > T_C$.

La susceptibilité isotherme relative au paramètre d'ordre est définie comme la quantité $\chi = -T \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_T$, ou h est le paramètre conjugué de m . pour calculer χ , il faut connaître la fonction $m(T, h)$, aussi est-il indiqué de choisir T et h comme des variables indépendantes.

Dans le cas $m = P$ (polarisation), le paramètre h représente le champ électrique et est extensif.

On choisit le potentiel thermodynamique $G = F(T, m) - mh$, dont l'équation de minimisation est $\frac{\partial G}{\partial m} = 2a(T - T_C)m + 4cm^3 - h = 0$ a pour solution la fonction $m(T, h)$. En décrivant par rapport à h et en remplaçant, il vient :

$$2a(T - T_C)\chi + 12cm^2\chi - 1 = 0 \quad (\text{II}, 18)$$

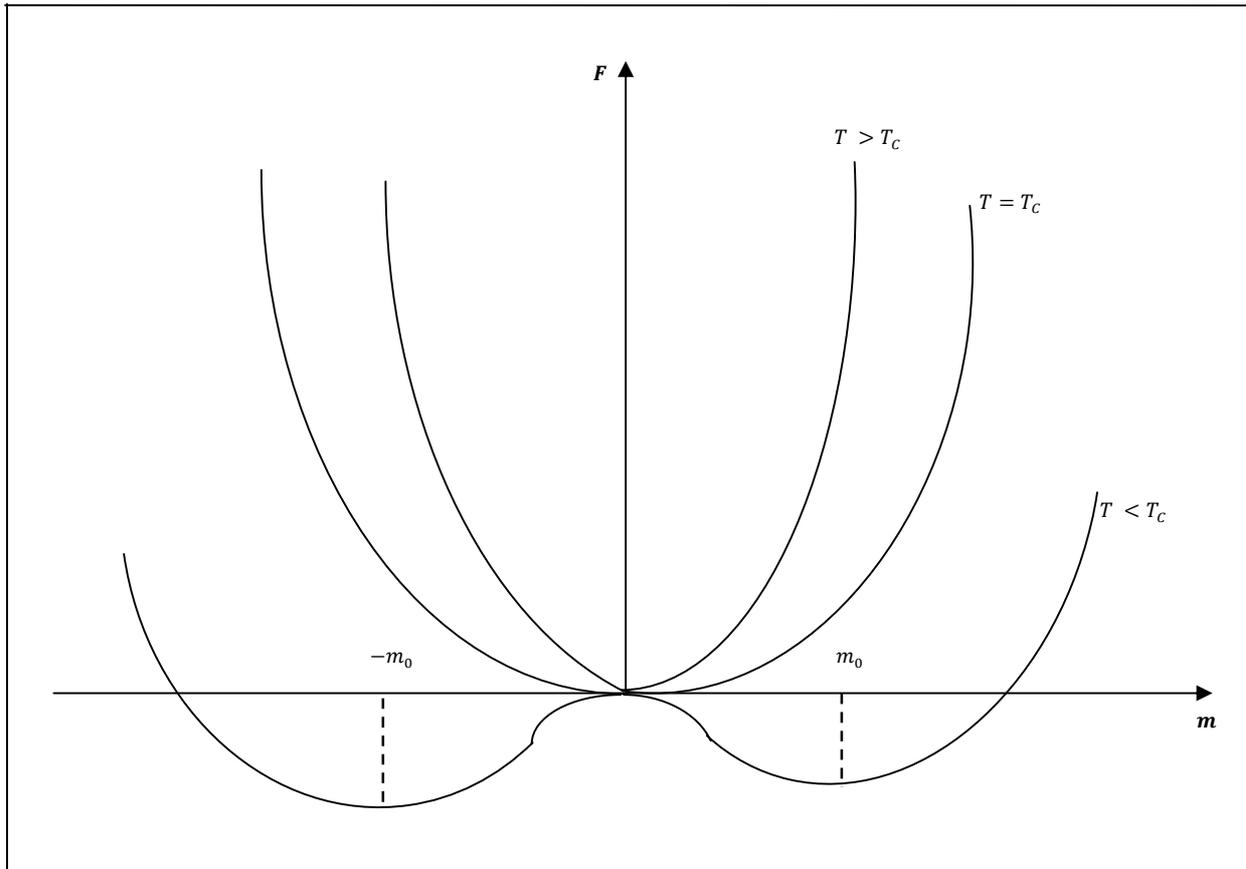


Figure (II, 9)- Variation de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre m .

Dans la phase de haute symétrie c'est-à-dire la phase désordonnée, m est nul et, au voisinage de T_c , la susceptibilité est donnée par :

$$\chi = \frac{1}{2a(T-T_c)} \quad (\text{II}, 19)$$

Dans la phase de basse symétrie c'est-à-dire la phase ordonnée, m n'est pas nul. Au voisinage de T_c et dans la limite où h tend vers zéro la susceptibilité est donnée par :

$$\chi = \frac{1}{4a(T_c-T)} \quad (\text{II}, 20)$$

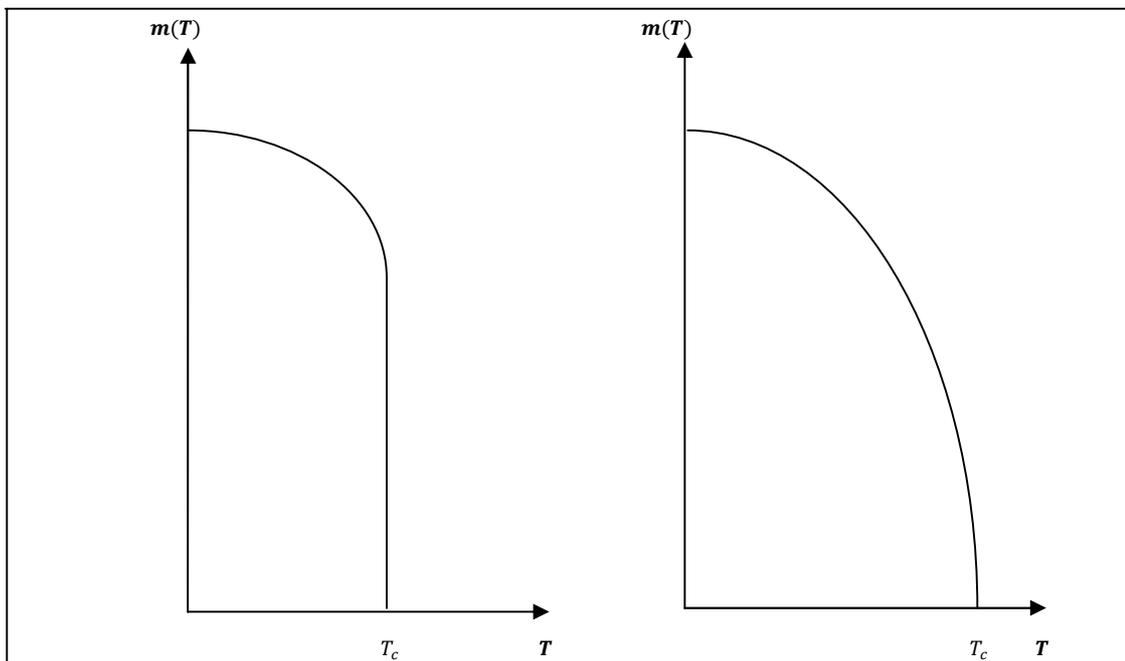
Au voisinage du point de transition, la susceptibilité isotherme relative au paramètre d'ordre se compte comme $1/|T - T_c|$, mais les coefficients en dessous et au-dessus du point de transition de phase diffèrent par un facteur 2. L'énergie libre $F(T, m)$ en tant que fonction de m est singulière au voisinage du point de transition et, par conséquent, le développement en puissance de $F(T, m)$ en fonction de m n'a pas de sens.

Chapitre II: Les transitions de phase

La théorie de Landau présente toutefois beaucoup d'intérêts, car les prédictions auxquelles elle conduit sont qualitativement bien vérifiées si on s'écarte suffisamment du point de transition, c'est-à-dire en fait en dehors de la zone où les fluctuations du paramètre d'ordre sont importantes [54].

Si au point de transition, le paramètre d'ordre est discontinu, la transition est du premier ordre. Dans la théorie que nous venons d'exposer, on montre qu'il peut en être ainsi dans les deux cas suivantes :

- Si le coefficient c est négatif, à la température de transition , $m = 0$ ne correspond pas à un état d'équilibre stable. Alors, la transition est du premier ordre en effet, à une température T_1 supérieur à T_c , m passe de façon discontinue d'une valeur nulle à une valeur non nulle.
- Si le développement de l'énergie libre en puissance de m comporte un terme en m^3 , à la température T_c qui annule le coefficient $A(T)$, la transition est encore du premier ordre et se produit à une température T_1 supérieur a T_c , on notera que, dans le cas précédent, il fait que la transition soit du premier ordre est lié aux propriétés du symétrie de l'énergie libre $F(T, m)$.



Figures (II, 10)- Comportement du paramètre d'ordre m à la transition du premier et du second ordre.

CHAPITRE III

Dans ce chapitre nous allons commencer par donner un aperçu général sur la simulation des systèmes et les méthodes de simulation.

Les méthodes de simulation existaient depuis l'ancien temps, mais le renouveau de la simulation tient à son champ d'application qui s'est élargie nettement ces années. L'apparition des ordinateurs lui donne une certaine puissance, et un usage de plus en plus vaste. Ainsi, elle a permis de trouver des solutions à des problèmes que les méthodes classiques n'avaient pas pu les résoudre. Le mot simulation est très courant et utilisé dans différents domaines mais d'un autre coté il est assez confus pour certains auteurs. Pour certains il s'agit d'un modèle, pour d'autres il s'agit d'une technique à base d'ordinateurs.

En premier lieu la simulation a son origine dans l'étude des systèmes réels ou imaginaires représentés par un modèle, donc le modèle est un élément fondamental de la simulation.

I. Simulation :

1. Définition de la simulation :

La simulation a été et reste toujours l'outil privilégié pour évaluer les performances de réseau et pour étudier le comportement des protocoles de réseau.

La simulation est la plus flexible des techniques discutées. Par exemple, elle permet d'étudier les modèles de réseau avec n'importe quel niveau de détail. De plus, on peut facilement modifier les conditions de fonctionnement du réseau et comparer les mesures d'intérêt d'un scénario à l'autre. Pour un non spécialiste, la simulation a plus de crédibilité que les modèles analytiques car elle est « plus proche » du système réel et nécessite, en principe, moins de simplifications et quasiment par d'hypothèse spécifique.

Or, la souplesse offerte par la simulation se paye cher : les simulations sont souvent gourmandes en ressources passives (par exemple, mémoire vive) et en temps de calcul lorsque les modèles utilisés sont un tant soit peu réalistes ou bien si l'on souhaite obtenir des résultats avec un niveau de précision élevé. Par exemple, au cours du processus de simulation, nous pouvons estimer les mesures de performance d'intérêt.

Mais à la différence des techniques analytiques, les observations de la simulation sont toujours entourées d'incertitude. Cette incertitude provient du fait que les résultats de la simulation ne sont qu'un échantillon d'un nombre potentiellement infini d'observations.

2. Le but de la simulation :

La technique de la simulation est utilisée dans un triple but :

- l'analyse des systèmes a la faculté d'assembler les sous-ensembles d'un système pour chercher et obtenir un meilleur profit des couts et des temps réduits.
- La simulation dans la construction des systèmes est semblable à une expérience de laboratoire et aboutit à la comparaison de plusieurs modèles de construction de systèmes.
- et la 3^{ème} application est pédagogique et concerne à la fois l'enseignement et l'entraînement.

Pour la classification de divers types de simulation, les variétés de modèles peuvent servir de base ; et chaque type de simulation fait intervenir un modèle du même nom. On distingue en effet, une simulation manuelle, graphique et écrite, de celle qui a recourt aux ordinateurs. En outre, il existe un autre critère de classification : la vitesse de simulation.

3. La simulation d'un système :

L'étude des systèmes, des modèles et de la simulation en général, est une préparation indispensable à la compréhension de la méthode simulation des systèmes. Les trois grandes parties qui composent cette méthode :

- construction du modèle.
- programmation sur ordinateur.
- analyse des résultats.

ne se chevauchent pas puisque le modèle est construit avant de commencer la programmation et cette dernière est terminée avant d'obtenir les résultats :

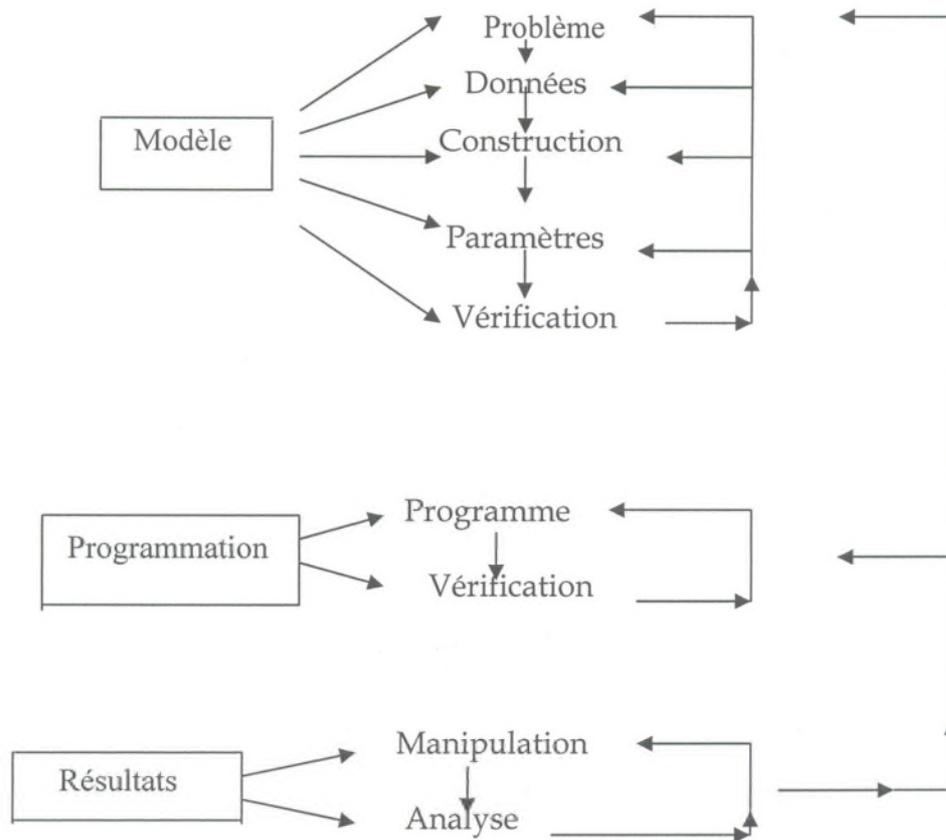


Figure (III, 1)- Schéma des étapes de la simulation d'un système.

La technique de la simulation peut être formulée de la façon suivante :

- Enoncer le problème dans l'optique du système.
- Construire un modèle du système pour dégager une solution.
- Vérifier le modèle et l'expérience.
- Mettre en pratique la solution retenue.

Ceci est proche de la technique de la recherche opérationnelle qui consiste à analyser le système considéré sous son aspect global puis construire un modèle mathématique dans le but d'étudier le rendement du système, déduire une solution soit analytiquement soit numériquement, et enfin faire la comparaison des résultats avec l'expérience.

La simulation par ordinateur supprime en partie la difficulté de rassembler des données expérimentales en produisant des observations indirectes tirées des distributions de

probabilités, permet de faire des expérimentations indirectes pour remplacer les expériences impossible à réaliser et s'accommode d'un nombre considérable de variables et enfin possède une grande vitesse pour manipuler des modèles.

Les techniques de simulation ont pu donc remplacer les expériences, qui sont parfois coûteuses, dangereuses ou même inaccessible au laboratoire.

II. Méthodes classiques de simulation :

Parmi les méthodes de simulation, on cite la méthode de Monte Carlo et la dynamique moléculaire. Ces méthodes de simulation sont très utilisées dans divers domaines de la science.

En effet, le grand développement des calculateurs électroniques a permis à ces méthodes basées sur la manipulation des nombres aléatoires d'être de plus en plus utilisées[55].

1. Dynamique moléculaire (DM) :

La dynamique moléculaire est une méthode de simulation du mouvement des atomes et des molécules. Elle se base sur le principe de la mécanique classique pour obtenir la trajectoire en intégrant les équations de mouvement. Cette technique est largement utilisée pour simuler les propriétés des solides, des liquides, et des gaz. Elle permet de calculer les propriétés physico-chimiques d'un système en admettant que le potentiel d'interaction est connu.

Une simulation de dynamique moléculaire consiste à simuler par le calcul informatique l'évolution d'un système de particules au cours du temps. De telles simulations servent de modèles structuraux et dynamiques pour la compréhension ou la prédiction de résultats expérimentaux. En pratique, cela revient concrètement à simuler le mouvement d'un groupe d'atomes dans le temps pour des conditions de température, pression et éventuellement de champs électromagnétiques connus. De nombreux cas particuliers, plus ou moins complexes existent avec par exemple des atomes qui se désintègrent en

émettant de l'énergie (fission nucléaire) ou qui fusionnent (fusion nucléaire), des troupes d'atomes contenant des isotopes, sur les zones d'interfaces et/ou de corrosion etc..

Dans ces simulations, le temps évolue de manière discrète et l'on souhaite connaître (entre autres) la position et la vitesse des particules à chaque pas de temps. Pour cela, un algorithme de dynamique est utilisé pour le calcul des forces vitesses et accélérations. Pour avoir les accélérations, un algorithme de calcul de forces et potentiels est utilisé [56].

La méthode utilisée pour calculer les forces d'interaction (ou le potentiel dont elles dérivent) caractérise une simulation. Par exemple on parle de dynamique moléculaire ab-initio si le potentiel est calculé à partir des premiers principes de la mécanique quantique. Si en revanche les forces dérivent d'un potentiel fixé empiriquement, on parlera de dynamique moléculaire classique.

La dynamique moléculaire s'applique aussi bien à l'étude structurale des molécules qu'à des systèmes en interaction de grande taille [57]. Néanmoins, les capacités de calcul étant limitées, le nombre de particules dans une simulation l'est aussi. Pour simuler un matériau infini dans une, deux ou trois dimensions, on placera les particules dans un espace périodique : on parlera alors d'une boîte de simulation. Lors du calcul des forces, on devra tenir compte de cette périodicité de l'espace. En pratique, on distinguera dans la force d'interaction des termes à courte portée, qui ne seront pas affectés par la périodicité, c'est-à-dire que seules les particules les plus proches seront prises en compte, et un terme à longue portée, qui devra en tenir compte. Le terme à longue portée est généralement de type coulombien et sera calculé par la somme d'Ewald...

Issue de la physique du solide et de la chimie quantique, la dynamique moléculaire trouve désormais de nombreuses applications : biologie, biochimie, chimie organique, physique des particules, physique de l'état solide, sciences des matériaux, mécanique...

2. Méthode de Monte Carlo - Structure d'un programme standard de simulation Monte Carlo:

Le nom et le développement systématique des méthodes de Monte Carlo datent de 1944 environ [55-58]. Elles sont la mise en œuvre des expériences mathématiques sur les nombres aléatoires. Historiquement, l'utilisation systématique, par Stanislaw Ulam, Nicholas Métropolis et John Von Neumann notamment, est intervenue à Los Alamos, pendant la préparation de la bombe atomique, ou ont collaboré de nombreux mathématiciens et physiciens de renom.

Le travail à Los Alamos consistait à simuler directement les problèmes de dispersion et d'absorption de neutrons pour les matériaux fissibles. Dès les premières applications, des méthodes de réduction de la variance ont été utilisées. Les recherches étant bien évidemment secrètes à Los Alamos, les premières publications sur le domaine ne sont intervenues qu'à partir de 1949. Ensuite, le développement de ces méthodes a accompagné les développements de l'informatique. En effet, en 1945 déjà, J. Von Neumann conjecturait le potentiel des ordinateurs pour la simulation stochastique : « l'ordinateur offrira certainement une nouvelle approche à la statistique mathématique : l'approche par expérience sur ordinateur ».

Les techniques de Monte Carlo ont alors été utilisées fréquemment et dans de nombreux domaines à partir des années 50, et même sur utilisées, par exemple pour des problèmes ou elles n'étaient pas les plus adaptées [59-60].

Les problèmes traités par la méthode de Monte Carlo sont de deux types : probabilistes ou déterministes suivant qu'ils concernent directement ou non le comportement et le résultat du processus aléatoire [61].

- Dans le cas où le problème traité serait de nature probabiliste, le code Monte Carlo consiste à observer les nombres aléatoires de telle façon qu'il simule de manière directe le processus physique aléatoire du problème considéré, et à tirer les solutions suivant le comportement de ces nombres aléatoires. Ce sont la méthode de Monte Carlo direct.

On peut citer comme exemple l'étude prévisionnelle des réacteurs nucléaires, des relations téléphoniques...

- Si maintenant le problème posé est de nature déterministe, bien qu'il n'ait pas de relations directes avec les processus aléatoires, on peut toujours faire une

certaine «gymnastique» d'esprit pour adjoindre au problème déterministe un processus aléatoire adéquat.

On peut donc résoudre numériquement le problème déterministe par une simulation directe du problème probabiliste correspondant. Cette technique de résolution est connue sous le nom de méthode Monte Carlo élaboré. On peut citer comme exemple la détermination de la constante π [62].

En général les méthodes Monte Carlo sont utilisées pour :

- L'évaluation des intégrales.
- Des équations intégrales et différentielles ets...

Tout calcul de Monte Carlo qui conduit à des résultats quantitatifs peut être considéré comme estimant la valeur d'une intégrale multiple.

En physique statistique on peut par exemple calculer la valeur moyenne d'une grandeur physique à partir d'un modèle d'Hamiltonien.

Soit alors un système classique avec un Hamiltonien H . La densité de probabilité du point représentant S dans l'espace des phases est alors proportionnel à $e^{-\beta H}$ [58-59].

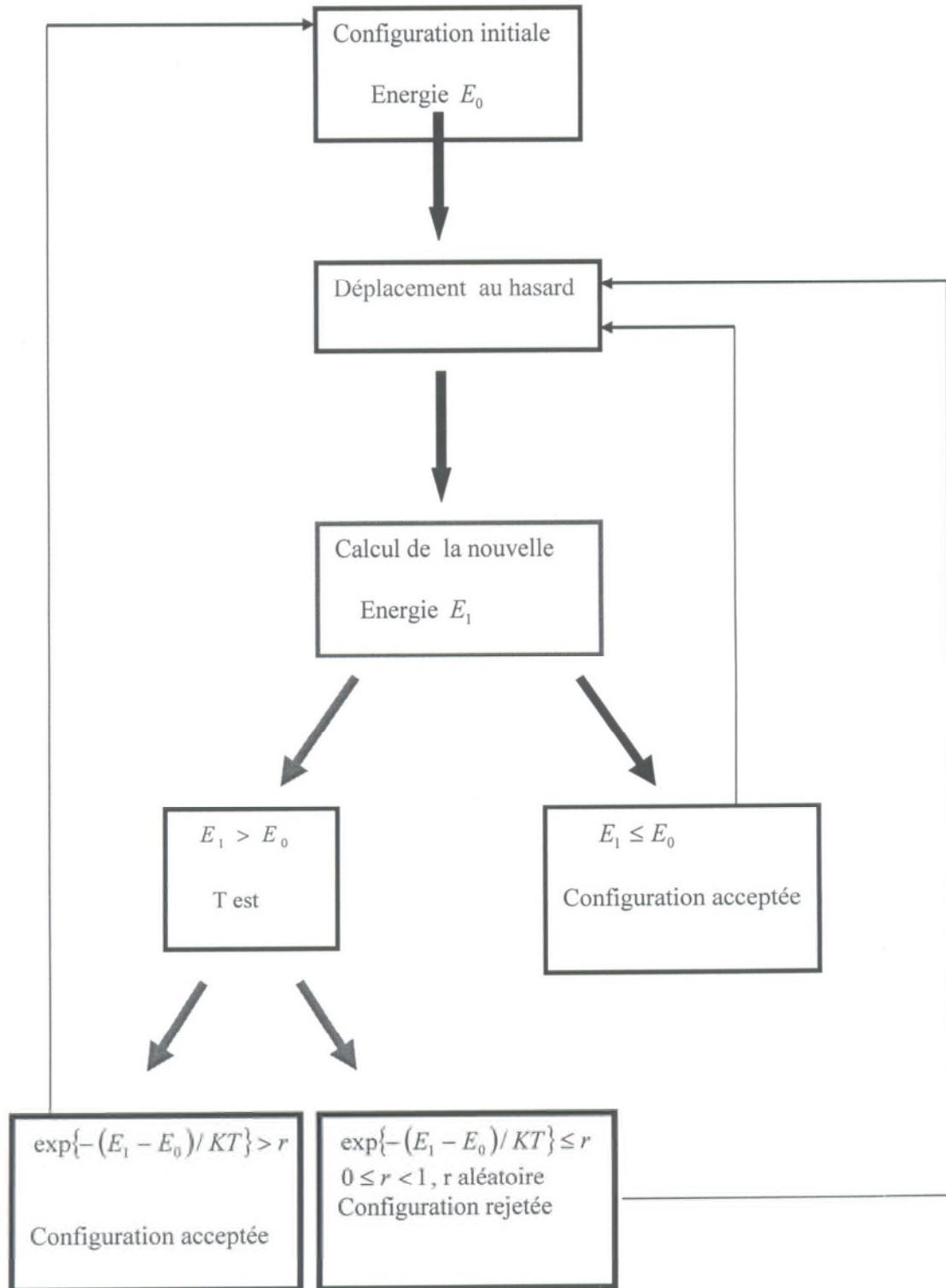


Figure (III,2)- Algorithme de la simulation par la méthode de Monte Carlo..

III. Méthodes de simulations numériques ou de Monte Carlo :

Une transition de phase dans un système n'apparaît qu'à la limite thermodynamique dans laquelle le volume V du système et le nombre de particules N tendent vers l'infini et c'est seulement dans cette limite que l'énergie libre ou quantité thermodynamique présente une singularité au point de transition. Pour un système fini, cette condition n'est pas satisfaite et donc on ne peut pas avoir de transition de phase. Mais Ferdinand et Fisher en 1969 ont montré, en développant la théorie pour les systèmes de taille finie (Finite size scaling) [63], que les systèmes de taille finie présente une réminiscence pour les transitions de phase et une étude systématique de ces pseudos transitions en fonction de la taille du système peut nous procurer des informations utiles afin de conclure sur le point de transition pour le système infini.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons sur une méthode qui se base sur le Finite size scaling [64], c'est la méthode de simulation numérique de Monte Carlo, puis nous appliquons cette méthode pour étudier numériquement le modèle Ashkin Teller à spin $3/2$.

Les simulations numériques sont appelées les méthodes de Monte Carlo du fait de leur utilisation des nombres aléatoires comme ceux provenant des jeux de hasard. Elles sont utilisées pour résoudre numériquement des problèmes mathématiques qui sont très complexes à traiter exactement. Les problèmes abordés par ces méthodes sont divisés en deux classes : les problèmes du type probabiliste et ceux du type déterministe.

En résolvant un problème probabiliste, on essaye de simuler directement le processus aléatoire inhérent (simulation de la diffusion des neutrons), alors que pour un problème déterministe, on fait une transformation de ce problème vers un autre problème de nature stochastique (équations différentielles en électromagnétisme et intégrales multidimensionnelles dans la théorie des N-corps). Les méthodes de Monte Carlo emploient en générale différentes techniques d'échantillonnage. L'un d'eux est l'échantillonnage important qui a été introduit pour la première fois par Métropolis en 1953 pour l'étude de l'équation d'état d'un système de disques durs en deux dimensions puis modifié ensuite par Fosdick et al pour qu'il soit appliqué aux modèles d'Ising sur réseau [58]. Cette technique est basée sur le fait que l'information statistique collectée est liée à son importance dans un problème bien particulier.

1. Echantillonnage :

Dans cette technique d'échantillonnage important, la valeur moyenne $\langle A \rangle$ d'une grandeur physique A est estimée à partir de la valeur moyenne prise sur un échantillon M relativement petit appartenant à l'ensemble total des configurations du système. Les configurations M utilisées pour cette estimée sont choisies de telle sorte que la probabilité P_μ du $\mu^{\text{ième}}$ état est reliée à sa contribution importante dans la valeur moyenne. L'estimé $\langle A \rangle_M \sim \langle A \rangle$ est donné par :

$$\langle A \rangle_M = \frac{\sum_{\mu=1}^M A_\mu P_\mu^{-1} e^{-E_\mu/KT}}{\sum_{\mu=1}^M P_\mu^{-1} e^{-E_\mu/KT}} \quad (\text{III , 1})$$

Ou A_μ est la valeur de A dans le $\mu^{\text{ième}}$ état et E_μ est l'énergie correspondant à cet état. Un choix simple pour P_μ peut-être :

$$P_\mu = \frac{e^{-E_\mu/KT}}{\sum_{\mu=1}^M e^{-E_\mu/KT}} \quad (\text{III , 2})$$

Avec ce choix, l'estimé $\langle A \rangle_M$ est réduit à une simple moyenne arithmétique :

$$\langle A \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M A_\mu \quad (\text{III , 3})$$

Comme on génère chaque nouvel état ν à partir de l'état précédent μ , seulement la probabilité relative des deux états $p_{\mu \rightarrow \nu}$ est utilisée, c'est la probabilité du $\nu^{\text{ième}}$ état à partir du $\mu^{\text{ième}}$ état. Le choix de la probabilité $p_{\mu \rightarrow \nu}$ n'est pas unique mais elle doit satisfaire à la condition de balance détaillée :

$$P_{eq}(\chi_\mu) p(\chi_\mu \rightarrow \chi_\nu) = P_{eq}(\chi_\nu) p(\chi_\nu \rightarrow \chi_\mu) \quad (\text{III , 4})$$

Les choix les plus fréquemment utilisés sont :

$$p_{\mu \rightarrow \nu} = \begin{cases} \text{Exp} \left(-\frac{E_\nu - E_\mu}{KT} \right) & \text{si } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{autrement} \end{cases} \quad (\text{III , 5})$$

$$p_{\mu \rightarrow \nu} = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \frac{E_\nu - E_\mu}{2KT} \right] \quad (\text{III , 6})$$

Le premier choix est utilisé pour simuler les systèmes en équilibre de Métropolis et al, alors que le second du à Glauber et al est utilisé dans le traitement cinétique du modèle d'Ising.

2. Réalisation pratique de la méthode de Monte Carlo:

Pour écrire un algorithme qui réalise la méthode de Monte Carlo, on doit d'abord spécifier le type de la taille du réseau ainsi que les conditions aux bords qui seront utilisées. Pour le modèle d'Ising, considérons un réseau cubique $L * L * L$ avec les conditions aux bords périodiques et tel que chaque site i est caractérisé par son spin S_i [65]. L'algorithme réalisant l'échantillonnage important est le suivant :

- Un site i du spin S_i du réseau est choisi pour être renverser($S_i \rightarrow -S_i$).
- Calculer l'énergie d'échange δE associée au renversement.
- Tirer un nombre aléatoire Z uniformément distribué entre 0 et 1.
- Calculer la probabilité de transition δE pour ce renversement. Si $Z < p$ on renverse le spin, sinon on ne le renverse pas. Quel que soit le cas, la configuration de spins obtenus est prise comme étant la nouvelle configuration. Le renversement du spin en moyenne est exécuté avec la probabilité, le renversement est toujours exécuté si $\delta E < 0$.
- Analyser la configuration résultante, stocker ses propriétés pour calculer les moyennes nécessaires.

Il existe plusieurs façons pour choisir les sites du réseau. Soit on visite le réseau site par site, soit on fait un choix aléatoire du site. Le premier est plus approprié pour les systèmes statiques, alors que le second sert pour l'étude des systèmes dynamiques mais son exécution est plus lente que celle du premier et nécessite aussi l'emploi des nombres aléatoires non corrélés.

On sait que la distribution des états générés $p(\chi_\mu)$ tend asymptotiquement, quand $\rightarrow \infty$, vers la distribution canonique $P_{eq}(\chi)$. Mais en général la configuration

initiale ne satisfait pas à la distribution canonique $P_{eq}(\chi)$, elle doit donc être exclue dans le calcul de la moyenne. Pour cela, on doit générer un nombre très grand de configurations jusqu'à ce que la mémoire de l'état initiale soit perdue. Pratiquement, on

fait plusieurs exécutions de Monte Carlo avec différentes configurations initiales et on essaye de suivre le processus de relaxation de l'aimantation en fonction des étapes de Monte Carlo et essayer d'estimer le nombre M_0 de configurations à éliminer après que l'équilibre thermique est atteint, d'où pour la moyenne on aura :

$$\langle A \rangle_M = \frac{\sum_{\mu=M_0+1}^M A_\mu}{(M - M_0)} \quad (\text{III}, 7)$$

3. Analyse des erreurs :

Une des limitations qui influence sur la précision des résultats est le fait d'utiliser un nombre fini de configurations, cette erreur peut être diminuée en augmentant le nombre d'étapes de Monte Carlo [66]. Une autre erreur beaucoup plus subtile est due au temps de corrélation qui existe entre deux configurations successives. L'un des résultats de cette corrélation est le temps de relaxation fini nécessaire au système pour atteindre l'équilibre thermique à partir de l'état initial arbitraire. Cet effet de relaxation est parfaitement normale et peut être éliminé simplement en omettant les M_0 configurations. L'erreur la plus importante produite par cette corrélation qui subsiste malgré que le système ait atteint l'équilibre thermique provient du retard des fluctuations critiques pour une transition du second ordre. En principe la vraie erreur associée aux propriétés statiques peut être déterminé en étudiant la dynamique du modèle. Une alternative due à Landau [67] consiste à utiliser la méthode de « coarse-graining » [68]. Dans cette méthode le nombre M d'étapes de Monte Carlo est subdivisé en p groupes de séquences successives dont chacun des groupes contient M_p étapes ($M = pM_p$). Les moyennes « coarse-grained » sont calculées pour chaque groupe de configurations :

$$\langle A \rangle_S = \frac{1}{M_p} \sum^M A_\mu \quad (\text{III}, 8)$$

La variance de ses valeurs « coarse-grained » est :

$$V_{M_p} = \frac{M_p}{p-1} \sum_{S=1}^{S=p} (A_S - \langle A \rangle_S)^2 \quad (\text{III}, 9)$$

V_1 est la variance usuelle c'est-à-dire en supposant les résultats non corrélés. Quand M_p augmente, la corrélation entre les successifs « coarse-grained » résultats devient petites, à la limite $M_p \rightarrow \infty$ donne la vraie erreur. Le rapport V_∞/V_1 a été appelé par Friedberg et Cameron l'Inefficiency Statistique (SI) qui permet d'estimer le plus large échantillon à avoir pour pouvoir produire la vraie erreur V_1 calculée à partir de l'échantillon original.

4. Conditions aux bords :

Comme le système utilisé est fini, il faut bien spécifier les conditions aux bords. Dans le but d'approximer un système infini, on utilise en général les conditions aux bords périodiques. Dans ce cas, l'effet de surface est éliminé mais l'effet de taille finie reste. Donc, les spins de chaque surface interagissent avec les spins de la surface opposée du système. Pour un réseau cubique de dimension linéaire L et où le site i est déterminé par ces coordonnées h, k et l , ($\vec{S}_i = \vec{S}(h, k, l)$), cette périodicité est exprimée par :

$$\vec{S}(h \pm L, k, l) = \vec{S}(h, k, l)$$

$$\vec{S}(h, k \pm L, l) = \vec{S}(h, k, l) \quad (\text{III}, 9)$$

$$\vec{S}(h, k, l \pm L) = \vec{S}(h, k, l)$$

Cependant, il faut faire un choix approprié de la dimension linéaire L , Pour un modèle d'Ising ferromagnétique L peut être paire ou impaire alors que pour un antiferromagnétique L doit être obligatoirement paire.

Parfois d'autres conditions aux bords sont utilisées, dues aux propriétés du système étudié autre que les propriétés volumiques du système. Les conditions aux bords libres sont utilisées si on veut simuler les films magnétiques. Donc, les spins après aux bords périodiques et libres :

$$\vec{S}(h \pm L, k, l) = \vec{S}(h, k, l)$$

$$\vec{S}(h, k \pm L, l) = \vec{S}(h, k, l) \quad (\text{III}, 10)$$

$$\vec{S}(h, k, l \leq 0) = \vec{S}(h, k, l > L) = 0$$

Pour étudier la coexistence de deux phases avec des valeurs opposées du paramètre, on utilise des conditions aux bords anti périodiques :

$$\vec{S}(h, k, l \pm L) = -\vec{S}(h, k, l) \quad (\text{III}, 11)$$

Combinées avec les conditions aux bords périodiques, on simule un système ayant une interface :

$$\vec{S}(h \pm L, k, l) = \vec{S}(h, k, l)$$

$$\vec{S}(h, k \pm L, l) = \vec{S}(h, k, l) \quad (\text{III}, 12)$$

$$\vec{S}(h, k, l \pm L) = -\vec{S}(h, k, l)$$

Pour une géométrie semi-infinie, une surface est libre et un champ effectif est appliqué sur la surface opposée alors que pour les directions restantes les conditions aux périodiques sont appliquées.

IV. Nature d'une transition de phase :

L'approche faite à partir du « finite size scaling » est très utile pour la distinction entre les transitions du premier ordre et celle du deuxième ordre [69]. En général, pour un système infini, les singularités dans la chaleur spécifique apparaissent comme une fonction delta pour une transition du 1^{er} ordre alors que la susceptibilité diverge au point de transition du second ordre. Mais pour un système fini, elles disparaissent et se présentent par un maximum qui est déplacé. Ainsi une étude de la taille L peut révéler

des informations sur la nature de la transition dans le système infini.

Pour une transition du second ordre dans un système infini, au point critique, le paramètre d'ordre s'annule d'une façon continue, la susceptibilité diverge et l'énergie libre présente un seul minimum. En traitant L comme paramètre on a une famille de courbes pour l'aimantation et pour la susceptibilité pour T en fonction de T_c .

Une transition de phase du 1^{er} ordre est caractérisée par une discontinuité du paramètre d'ordre, la chaleur spécifique a une singularité sous forme d'une fonction delta qui représente l'enthalpie de la transition (discontinuité de la chaleur latente) et l'énergie libre présente deux minimums.

La température de transition T_c . Est déterminée par le maximum de la chaleur spécifique ou la susceptibilité [70].

V. Introduction au modèle Ashkin Teller :

Dans ce travail, nous allons analyser un modèle magnétique avec trois états de spin connus comme modèle Ashkin-Teller [71] qui est une superposition de deux modèles d'Ising avec deux spins variables σ et S , dans chaque site i du réseau cubique, deux variables de spin σ_i et S_i sont associés. Entre chaque deux spins un couplage d'interaction d'échange K_2 [72]. En outre, les différents modèles d'Ising ont couplés par une interaction de quatre spins K_4 [73] et sur chaque site il y a l'interaction du champ cristallin D [72]. Toutes ces interactions sont limitées aux premiers plus proches voisins.

Le composé de sélénium absorbé sur une surface de nickel [74] est une bonne image physique pour ce modèle. Différentes méthodes ont été utilisées pour comprendre le comportement critique de ce modèle. Pour le cas à deux dimensions, l'approche du champ moyen [75-76-77-78-79], la simulations de Monte Carlo [70-76-78-80], l'analyse de suites [81], la dualité exacte [82], matrice de transfert « finite size scaling » et loi d'échelle [83-84], groupe de renormalisation [85-86] et le champ moyen du groupe de renormalisation [87], produisent trois différentes phases: une phase paramagnétique dans laquelle ni σ et S ni rien d'autre est ordonné ($\langle\sigma\rangle = \langle S\rangle = \langle\sigma S\rangle = 0$); la phase de

Baxter dans lequel σ et S sont ordonnés indépendamment de façon ferromagnétique, et aussi $\langle\sigma S\rangle \neq 0$; une troisième phase ordonnée appelée PO_1 où σS est ferromagnétiquement ordonné $\langle\sigma S\rangle \neq 0$, mais $\langle\sigma\rangle = \langle S\rangle = 0$.

Un des phénomènes les plus intéressants et difficiles est l'apparition d'autres nouvelles phases partiellement ordonnées dans ce modèle, par exemple, l'approche du champ moyen et la simulation de Monte Carlo trouvent des transitions de phase du premier et

du second ordre et une phase ferromagnétique partiellement ordonnée $\langle \sigma \rangle, (\langle \sigma \rangle \neq 0, \text{ et } \langle \sigma S \rangle = \langle S \rangle = 0)$ [80].

En utilisant les transformations de la dualité exactes en considérant la symétrie [74-84] le modèle Ashkin Teller anisotrope à deux dimensions présente également des phases partiellement ordonnées appelés $\langle \sigma \rangle$ et $\langle S \rangle$ qui sont reliés par symétrie à la phase $\langle \sigma S \rangle$. Ces résultats sont confirmés dans $d = 2$ et $d = 3$ par la simulation de Monte Carlo et la finite size scaling [78]. La phase PO_2 est définie par $\langle \sigma S \rangle = 0$, mais $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle \neq 0$ trouvée dans le modèle Ashkin Teller spin1 [78-79].

La simulation de Monte Carlo peut être représentée comme un outil puissant et efficace pour étudier les phénomènes critiques [78] à dimensionnalité réduite ($d = 2$). Ainsi, il est important de bien comprendre le diagramme de phase obtenue à partir de ce modèle par une méthode non perturbative, tels que la technique de Monte Carlo. Le principal problème qui se pose à partir de ce procédé est l'existence d'erreurs statistiques [88]. Dans ce travail, nous nous sommes concentrés principalement sur le Modèle Ashkin Teller à spin-3/2 en utilisant des simulations de Monte Carlo. En commençons par une petite présentation du modèle puis le diagramme de phase à $T = 0$, après on va décrire la méthodologie et le formalisme des simulations Monte Carlo [89-90]. Et nous recueillerons nos résultats à la fin.

VI. L'Hamiltonien du modèle :

L'Hamiltonien H du modèle peut être exprimée comme suit:

$$H = -K_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i \sigma_j + S_i S_j) - K_4 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j S_i S_j - D \sum_{\langle i \rangle} (S_i^2 + \sigma_i^2) \quad (\text{III.13})$$

Où les spins σ_i et S_i sont situés sur les sites d'un réseau cubique et peuvent prendre deux valeurs $\pm 3/2$ et $\pm 1/2$. Le premier terme décrit les interactions bilinéaires entre les spins aux sites i et j , avec le paramètre d'interaction d'échange K_2 . Le second terme K_4 décrit le couplage des spins sur les sites et sur chaque site agit un champ cristallin D . La sommation $\sum_{\langle i,j \rangle}$ agit sur les sites premiers voisins.

VII. Diagramme de phases à l'état fondamental :

Avant d'aller plus en profondeur dans les calculs permettant de déterminer les diagrammes de phase du modèle, nous pensons qu'il serait instructif de rechercher numériquement les états fondamentaux décrit par l'Hamiltonien donné par l'équation (III.13). Ces états fondamentaux correspondent aux phases thermodynamiquement stables du modèle.

Afin de calculer l'énergie de l'état fondamental, nous exprimons l'Hamiltonien comme une somme des contributions des plus proches voisins. Donc, la contribution d'une paire de S_1, S_2 et σ_1, σ_2 est:

$$E_p = -K_2(\sigma_1\sigma_2 + S_1S_2) - K_4\sigma_1\sigma_2S_1S_2 - D(S_1^2 + S_2^2 + \sigma_1^2 + \sigma_2^2) \quad (\text{III.14})$$

Par comparaison des valeurs de E_p pour différentes configurations que nous obtenons, la structure du diagramme de phase à l'état fondamental est montré sur la figure (III, 3).

A partir de cette figure, il y a deux phases ordonnées ferromagnétiques de Baxter, deux autres phases ordonnées antiferromagnétiques de Baxter et deux phases de Baxter mixtes, les différentes phases stables sont indiquées comme suit :

- Pour $K_4 / K_2 < D / K_2$: si $K_4 / K_2 < -0,4$ les spins σ_i sont parallèles tandis que les spins S_i sont antiparallèles et nous avons : $\langle S \rangle_F = \langle \sigma \rangle_{AF} = \langle \sigma S \rangle_F = 0$ et $\langle S \rangle_{AF} = \langle \sigma \rangle_F = 3/2$ et $\langle \sigma S \rangle_{AF} \neq 0$ qui caractérisent la phase appelé Baxter $-3/2$. Sinon si $K_4 / K_2 > -0,4$, La phase Baxter $3/2$ est stable depuis que les spins σ_i et S_i sont alignés et égales à $3/2$.
- Pour $K_4 / K_2 > D / K_2$: si $K_4 / K_2 < -4$ les spins σ_i sont parallèles tandis que les spins S_i sont antiparallèles et nous avons : $\langle S \rangle_F = \langle \sigma \rangle_{AF} = \langle \sigma S \rangle_F = 0$ et $\langle S \rangle_{AF} = \langle \sigma \rangle_F = 1/2$ et $\langle \sigma S \rangle_{AF} \neq 0$ qui caractérisent la phase appelé Baxter $-1/2$. Sinon si $K_4/K_2 > -4$, La phase Baxter $1/2$ est stable depuis que les spins σ_i et S_i sont alignés et égales à $1/2$. Les symboles $\langle \cdot \rangle_F$ et $\langle \cdot \rangle_{AF}$ indiquent la valeur moyenne thermique des variables de spin respectivement dans les phases ferromagnétiques et antiferromagnétiques.
- Sauf pour $K_4 / K_2 > D / K_2$, dans la zone $0 < D / K_2 < -1$ deux phases Baxter mixtes ont été trouvés, la première quand $K_4 / K_2 > -0,4$, tous les spins σ_i et S_i sont parallèles, et la seconde si $K_4 / K_2 < -0,4$, les spins σ_i sont parallèles tandis que les spins S_i sont antiparallèles.

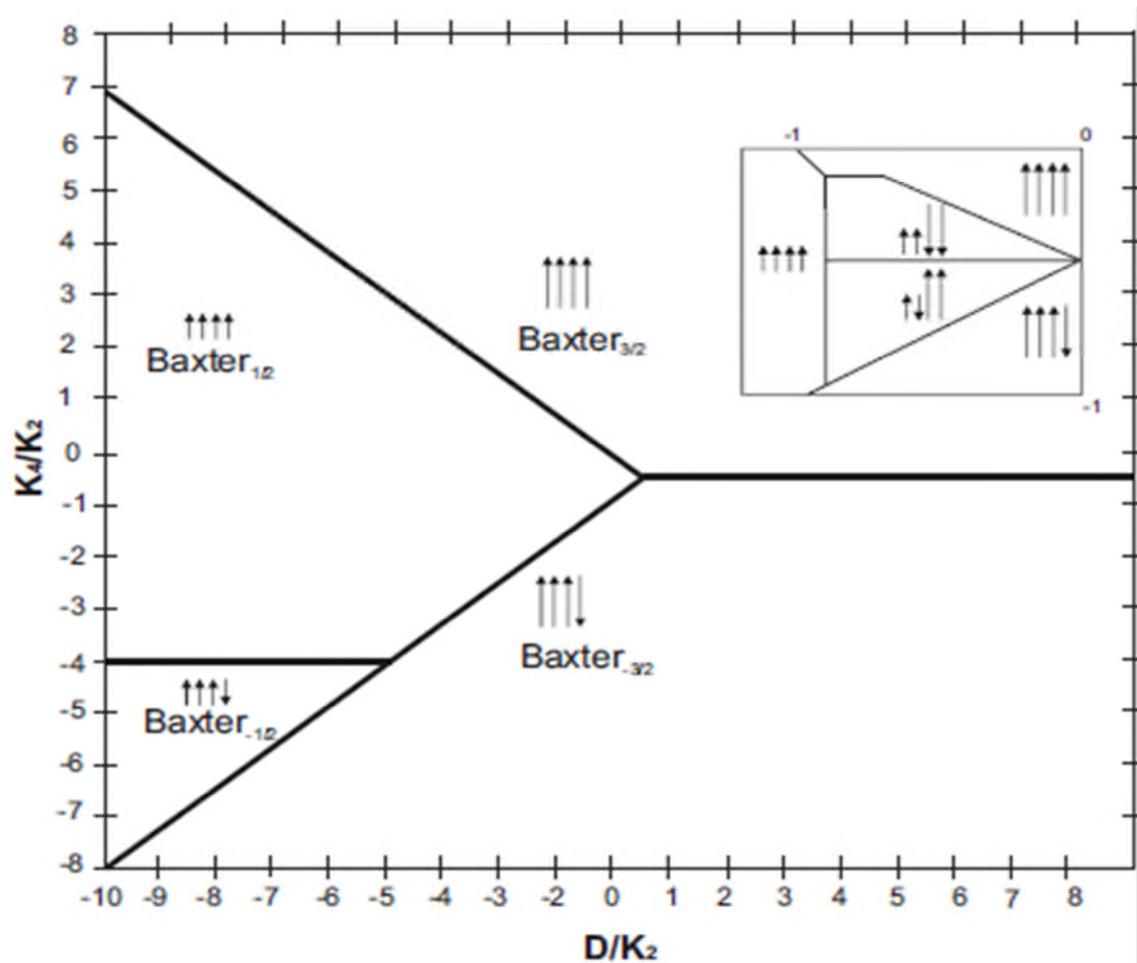


Figure (III,3)- Diagramme de phase à $T=0$. Il montre les différentes phases thermodynamiquement stables. Les points triples et les lignes de coexistences sont présents.

Il est aussi important de signaler que le diagramme de phase à $T = 0$ est indispensable dans la mesure où il nous permet de contrôler l'existence des lignes de transition du premier ordre aux basses températures ou les calculs numériques et la convergence de certaines quantités physiques sont difficiles à réaliser [91-92].

VIII. La simulation de Monte Carlo :

Le système étudié ici est un réseau carré de taille de système L , contenant $N = L^2$ spins donnés en utilisant l'algorithme bien connu de Métropolis [78]. Des conditions aux bords périodiques et la thermalisation de la configuration initiale ont été appliquées dans nos simulations [88].

Différentes configurations initiales ont été choisies pour vérifier si les états stationnaires obtenus sont corrects. Les spins sont choisis arbitrairement. Le spin est renversé ou pas selon la probabilité de transition et lorsque chaque spin a été visité une fois on dit qu'on a effectué un pas de Monte Carlo [88-89-90]. La procédure suivie pendant nos simulations est la suivante :

Pour des valeurs données de K_4 et de D , les paramètres d'ordre varient en fonction de la température. On choisit arbitrairement un site i contenant les deux spins σ_i et S_i . On génère un nombre aléatoire r_0 dans l'intervalle $[0,1]$ permettant de choisir sur quel type de spin entre σ_i et S_i le système va évoluer.

Un autre nombre aléatoire r_1 est choisis arbitrairement et ce dernier va permettre de sélectionner un état parmi les trois que le spin choisis va prendre. On calcule la différence d'énergie des configurations initiale et finale. Le calcul de la probabilité de transition $\omega_i(b)$ nous permet de savoir si le spin choisis va être renversé ou pas. On choisit un autre nombre aléatoire r_2 , si $r_2 < \omega_i(b)$ le spin est flippé sinon on ne fait rien.

Les simulations Monte Carlo sont effectuées à $d = 2$ avec les systèmes de tailles $L = 10, 16, 20, 30, 40$ et 60 . Nous utilisons $100000 - 200000$ pas de Monte Carlo pour calculer les quantités thermodynamiques après avoir $5000-50000$ balayages pour l'équilibre thermique. La plupart des diagrammes de phase présentés ici sont obtenus avec $L = 30$.

Les quantités thermodynamiques dont on a besoin telles que l'aimantation, la susceptibilité sont calculées [91-92]. Les expressions respectives de ces différentes quantités sont données par les formules suivantes:

$$|M_\alpha| = \langle |M_\alpha| \rangle = \frac{1}{np} \sum_c \sum_i \alpha_i(c) \quad \text{Avec } \alpha = \sigma, S, \sigma S \quad (\text{III.15})$$

$$|\chi_\alpha| = \frac{N}{K_B T} (\langle M_\alpha^2 \rangle - \langle |M_\alpha| \rangle^2) \quad \text{Avec } \alpha = \sigma, S, \sigma S \quad (\text{III.16})$$

K_B est la constante de Boltzmann, T est la température, $\alpha = \sigma, S, \sigma S$ et i parcourt tous les sites du réseau, c parcourt tous les p configurations de spins générés durant les simulations après avoir atteint l'équilibre thermique.

IX. Résultats et discussion :

Le diagramme de phase obtenu par la simulation de Monte Carlo montré dans la figure (III, 4) est présenté dans le plan $(K_B T / K_2, D / K_2)$. Nous avons une phase paramagnétique ou $(\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0)$ et deux Baxter phases ordonnées ferromagnétiques $\langle \sigma \rangle$ et $\langle S \rangle$ et aussi $\langle \sigma S \rangle \neq 0$. La première est Baxter1/2 et la seconde est le Baxter3/2 qui n'ont pas été trouvés dans les œuvres antérieures [70-77]. Ces phases sont séparées par des lignes, des points critiques, multicritiques et deux phases partiellement ordonnées: la phase $\langle \sigma S \rangle$, ou $\langle \sigma S \rangle \neq 0$ et $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0$ et la phase $\langle S \rangle$, ou $\langle S \rangle \neq 0$ et $\langle \sigma \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$. Cependant les data Monte Carlo sont obtenus à partir des pics dans les susceptibilités [93] pour $L = 30$, cette méthode a bien été appliquée à d'autres modèles [77] et a montré une bonne précision avec la matrice de transfert de taille finie [78]. La nature de la transition est déterminée à partir des discontinuités (continuités) dans les paramètres d'ordre pour la transition du premier (deuxième) ordre [77]. Dans notre étude, la nature de la transition est toujours de deuxième ordre pour toutes les valeurs.

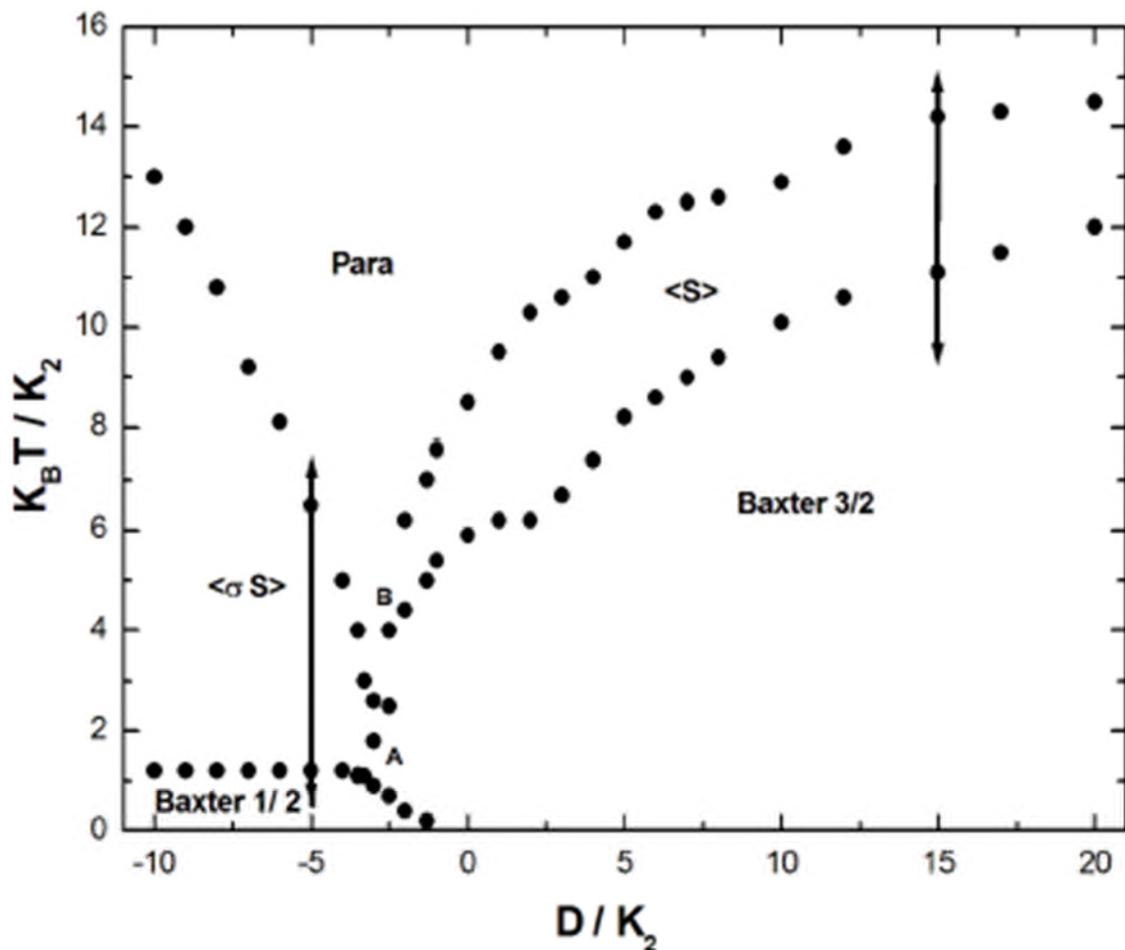


Figure (III, 4)- Diagramme de phase dans le plan $(K_B T / K_2, D / K_2)$ pour $K_4 = 0,25$ et la taille $L = 30$.

Les résultats de la figure (III, 4) sont obtenus pour $K_4 = 0,25$. Nous voyons aussi la phase Baxter1/2 séparée de la phase paramagnétique par la phase partiellement ordonné $\langle \sigma S \rangle$ aux faibles valeurs de D / K_2 , comme on le voit dans les figures (III, 5), (III, 6).

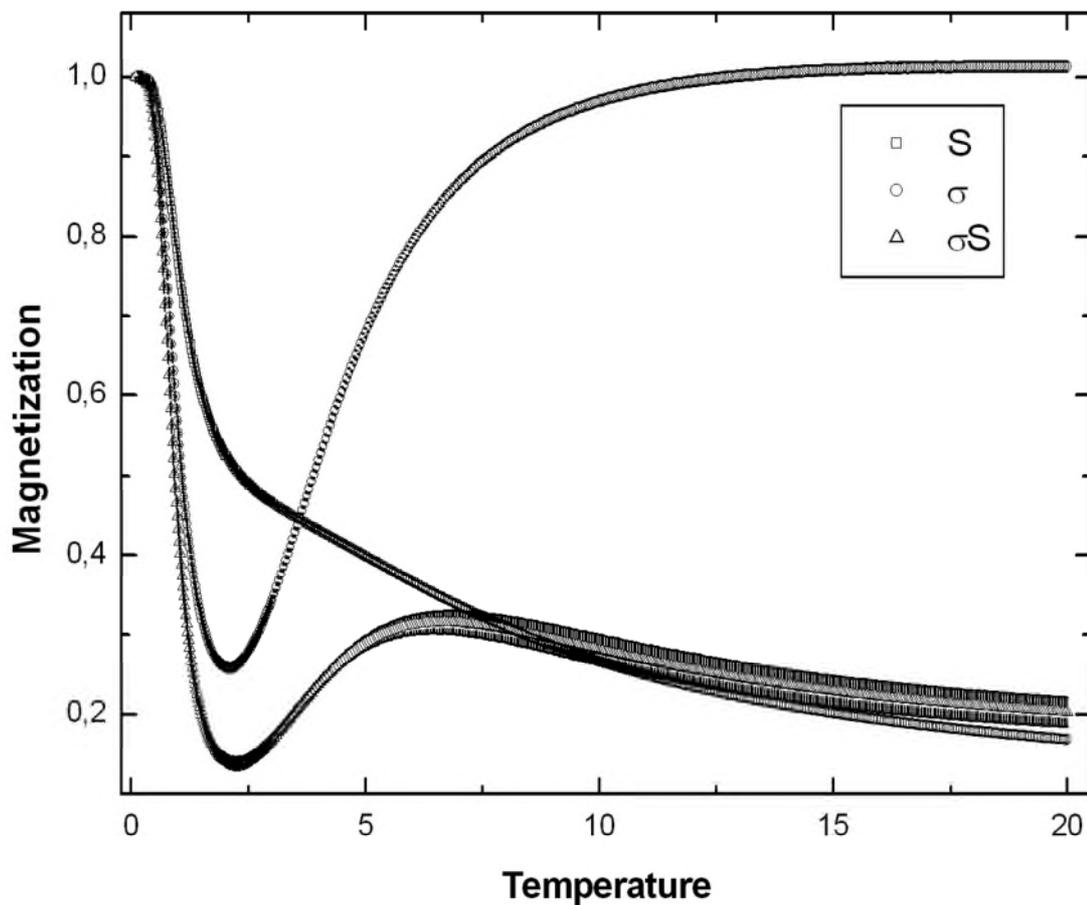


Figure (III,5)-L'aimantation avec barres d'erreurs présentant les trois paramètres d'ordre σ , S et σS en fonction de la température T pour $K_4 = 0,25$ et $D = -5$ et la taille $L = 30$.

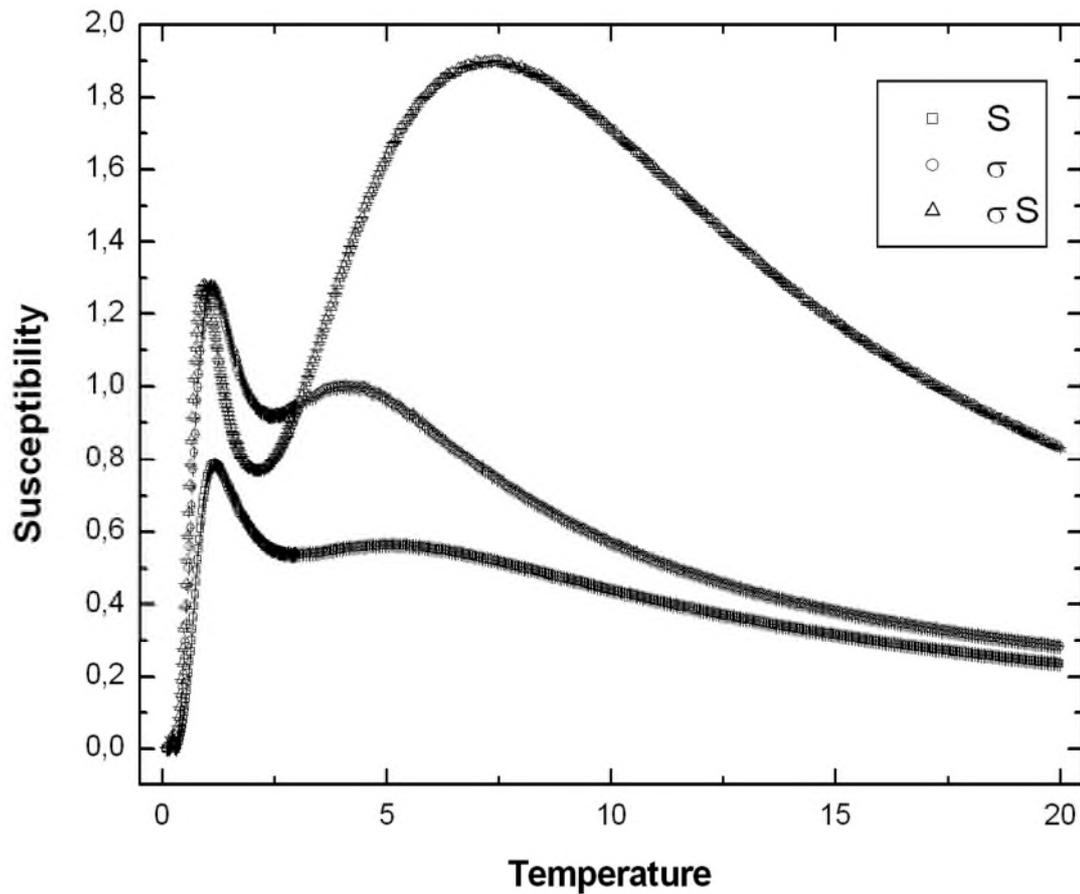


Figure (III,6)- la susceptibilité avec barres d'erreurs présentant les trois paramètres d'ordre σ , S et σS en fonction de la température T pour $K_4 = 0,25$ et $D = -5$ et la taille $L = 30$.

La phase Baxter3/2 est séparée de la phase paramagnétique par une nouvelle phase partiellement ordonné $\langle S \rangle$ aux valeurs élevées de $/K_2$, comme on le voit dans les figures (III, 7), (III, 8), cette dernière phase n'existe pas ni dans le modèle Ashkin Teller spin1/2 [77] ni dans le spin1 [79], mais vu dans le modèle d'Ashkin Teller mixte [77].

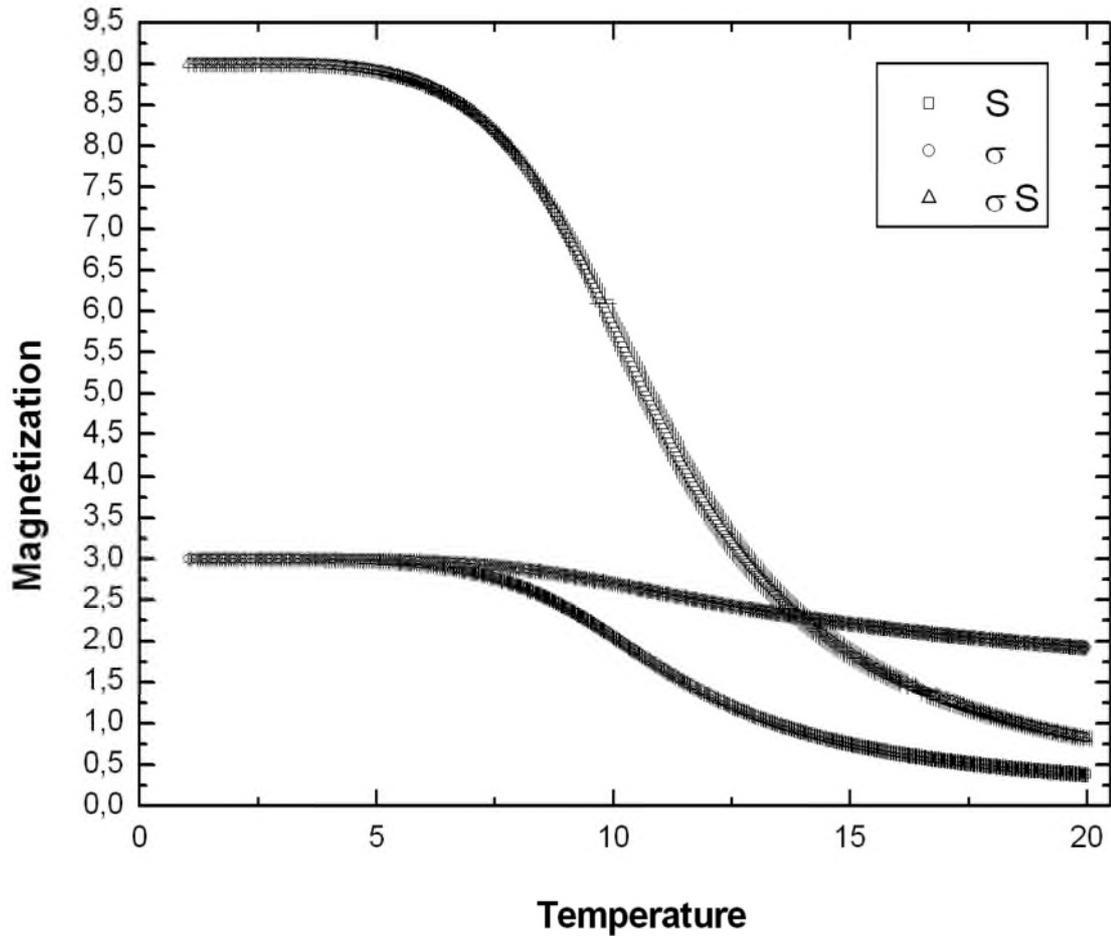


Figure (III,7)- L'aimantation avec barres d'erreurs présentant les trois paramètres d'ordre σ , S et σS en fonction de la température T pour $K_4 = 0,25$ et $D = 15$ et la taille $L = 30$.

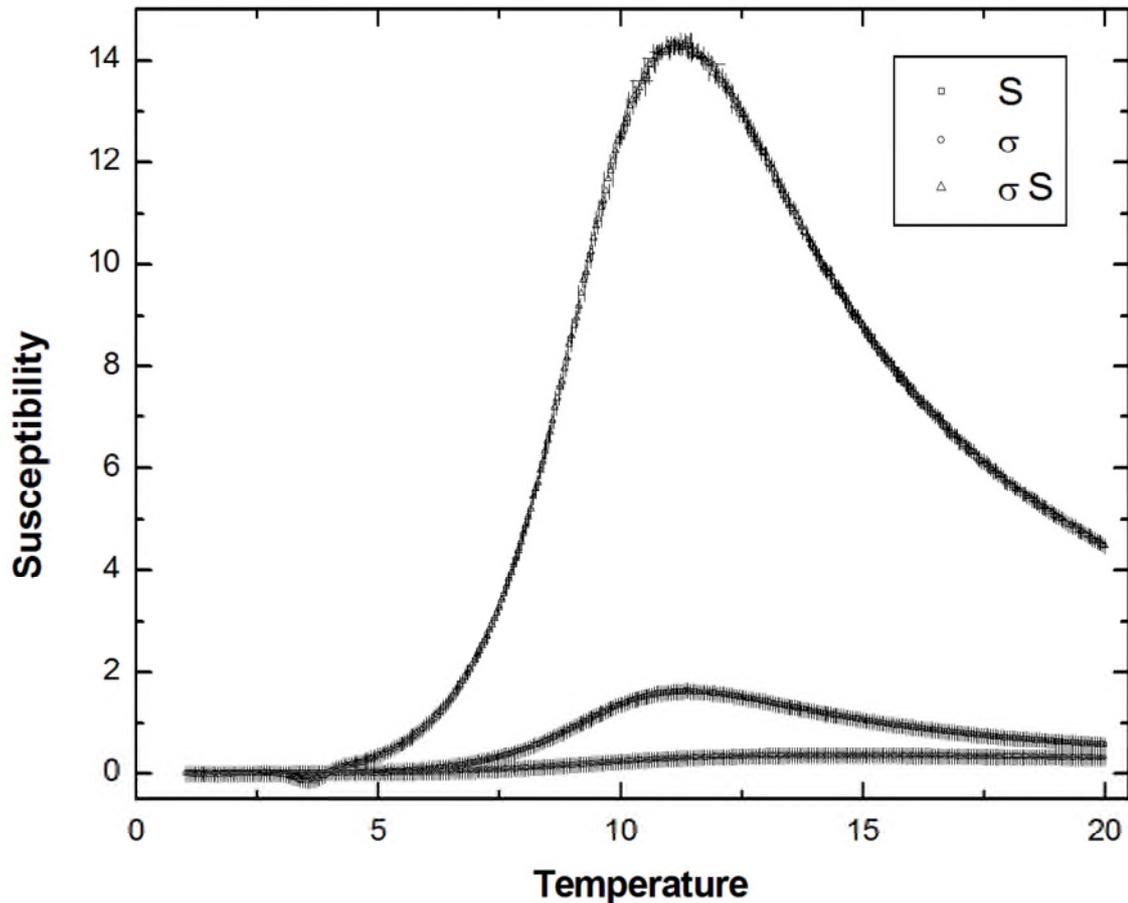


Figure (III,8)- La susceptibilité avec barres d'erreurs présentant les trois paramètres d'ordre σ , S et σS en fonction de la température T pour $K_4 = 0,25$ et $D = 15$ et la taille $L = 30$.

Revenant à la figure (III, 4), le rencontre de toutes les lignes critiques se trouve au niveau des points multicritiques $A (-2.98 \pm 0.01; 0,77 \pm 0.01)$ et $B (-2.54 \pm 0.01; 3,97 \pm 0.01)$. Les deux phases $\langle \sigma S \rangle$ et $\langle S \rangle$ séparent la phase désordonnée aux phases ferromagnétiques Baxter par des lignes de transition du second ordre.

Pour les barres d'erreur, nous avons tracé les erreurs des aimantations et des susceptibilités, comme on le voit dans les figures (III, 5), (III, 6), (III, 7) et (III, 8), ce qui présentent les trois paramètres d'ordre σ , S et σS en fonction de la température pour $K_4 = 0,25$ et $D = -5$ (ou $D = 15$) obtenu par des simulations Monte Carlo montrant que les barres d'erreur sont très petite, la simulation était trop long, il a fallu beaucoup de temps de calcul.

En augmentant l'interaction de quatre corps K_4 / K_2 , les deux phases Baxter restent dans les diagrammes de phase alors que selon l'interaction K_4 , comme représenté sur la figure (III, 9) pour $K_4 = 2$ la phase partiellement ordonné $\langle \sigma S \rangle$ est en baisse et l'autre $\langle S \rangle$ disparaît. Mais une fois $K_4 = 6$, la phase partiellement ordonnés $\langle \sigma S \rangle$ disparaît et l'autre phase partiellement ordonnée $\langle S \rangle$ est récupéré comme c'est indiqué dans Figure (III, 10). Les lignes continues sont liées par des points multicritiques d'ordre supérieur.

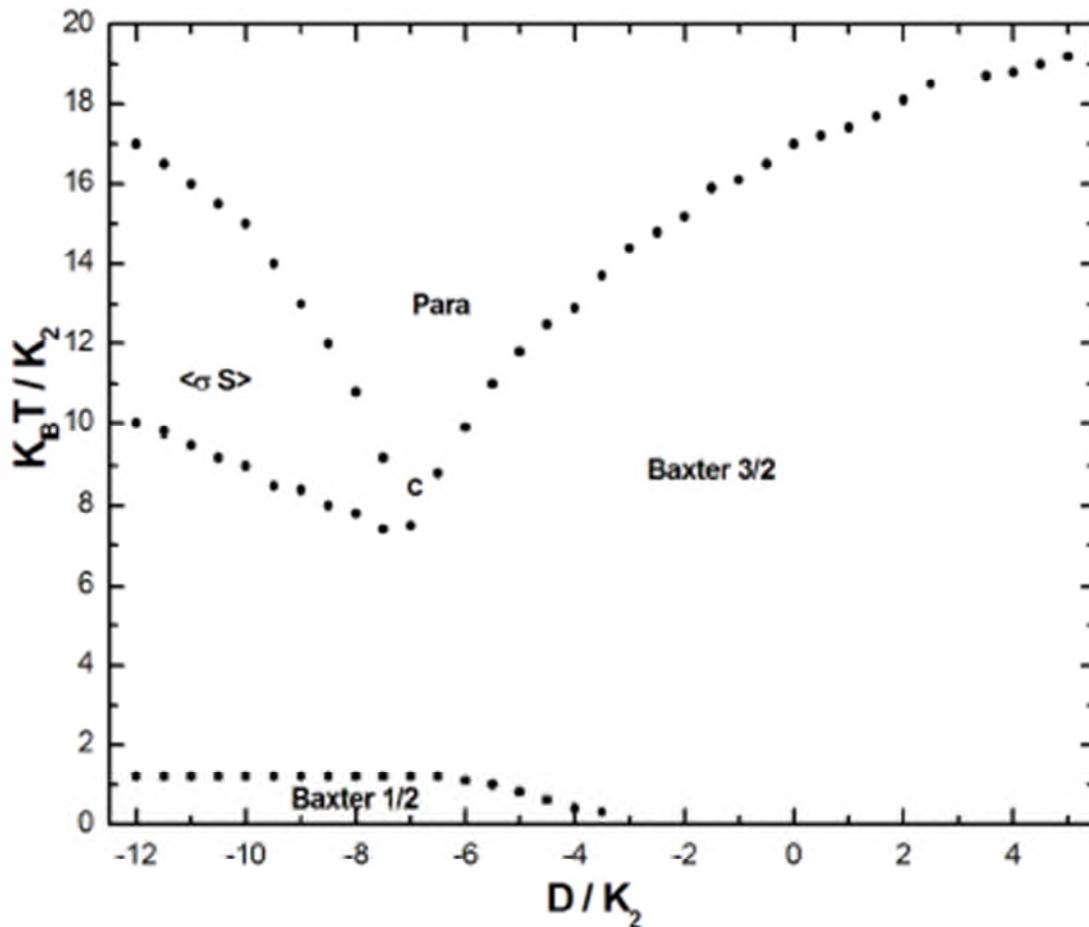


Figure (III,9)- Diagramme de phase dans le plan $(K_B T / K_2, D / K_2)$ pour $K_4 = 2$ et la taille $L = 30$.

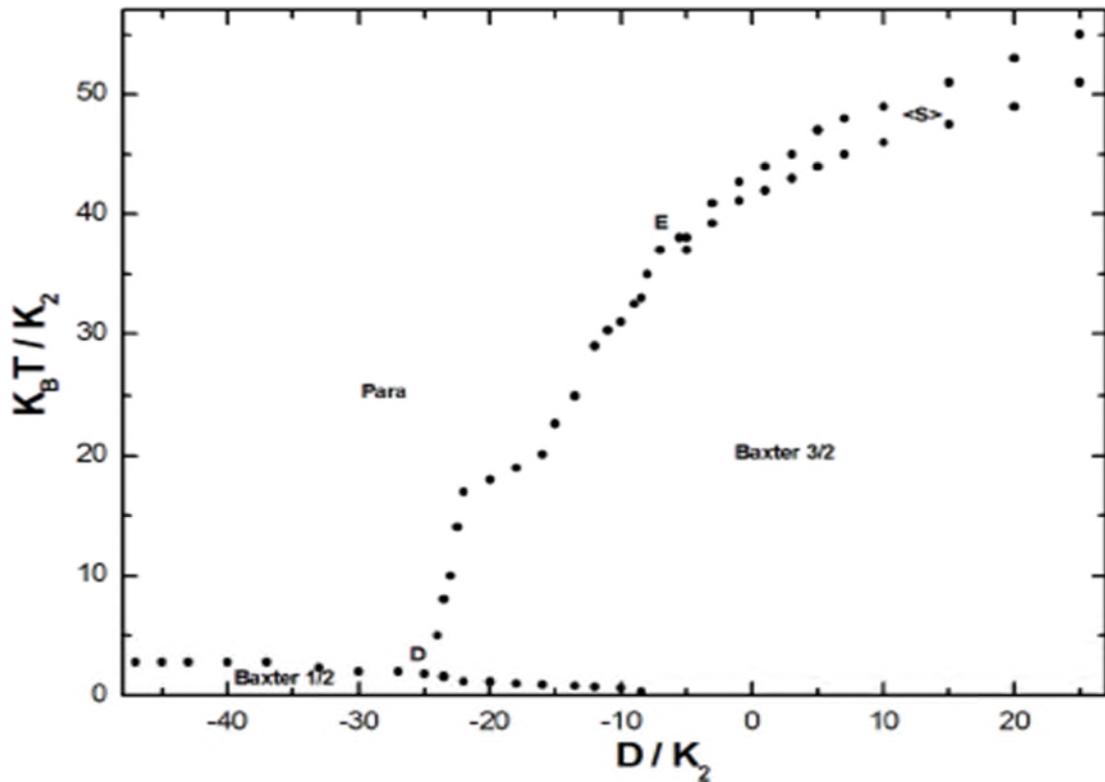


Figure (III,10)- Diagramme de phase dans le plan $(K_B T / K_2, D / K_2)$ pour $K_4 = 6$ et la taille $L = 30$.

Nous avons tracé les figures (III, 11) et (III, 12) qui présentent l'aimantation $M_L^{\sigma S}(T)$ et la susceptibilité $\chi_L^{\sigma S}(T)$, en fonction de la température T pour plusieurs valeurs de la taille L [77]. Des Comportements similaires sont obtenus pour les paramètres d'ordre $\langle \sigma \rangle$, $\langle S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$.

Les calculs effectués avec les aimantations et les susceptibilités sur les différentes tailles $L = 10, 16, 20, 30, 40$ et 60 montrent que les températures de transitions sont trouvées avec les pics des susceptibilités. On remarque un emplacement de ces pics lorsque la taille du système L augmente.

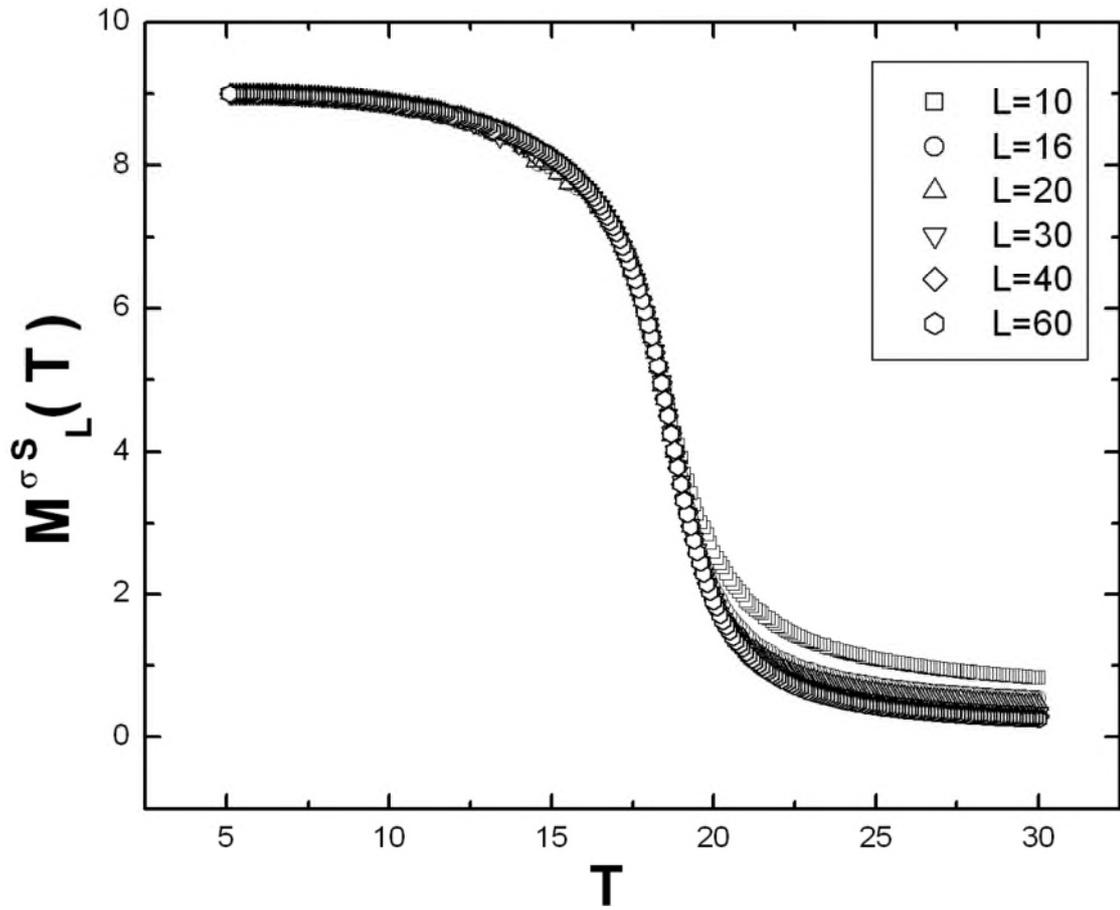


Figure (III, 11)- L'aimantation $M_L^{\sigma S}(T)$, en fonction de la température T pour différents choix de la taille L .

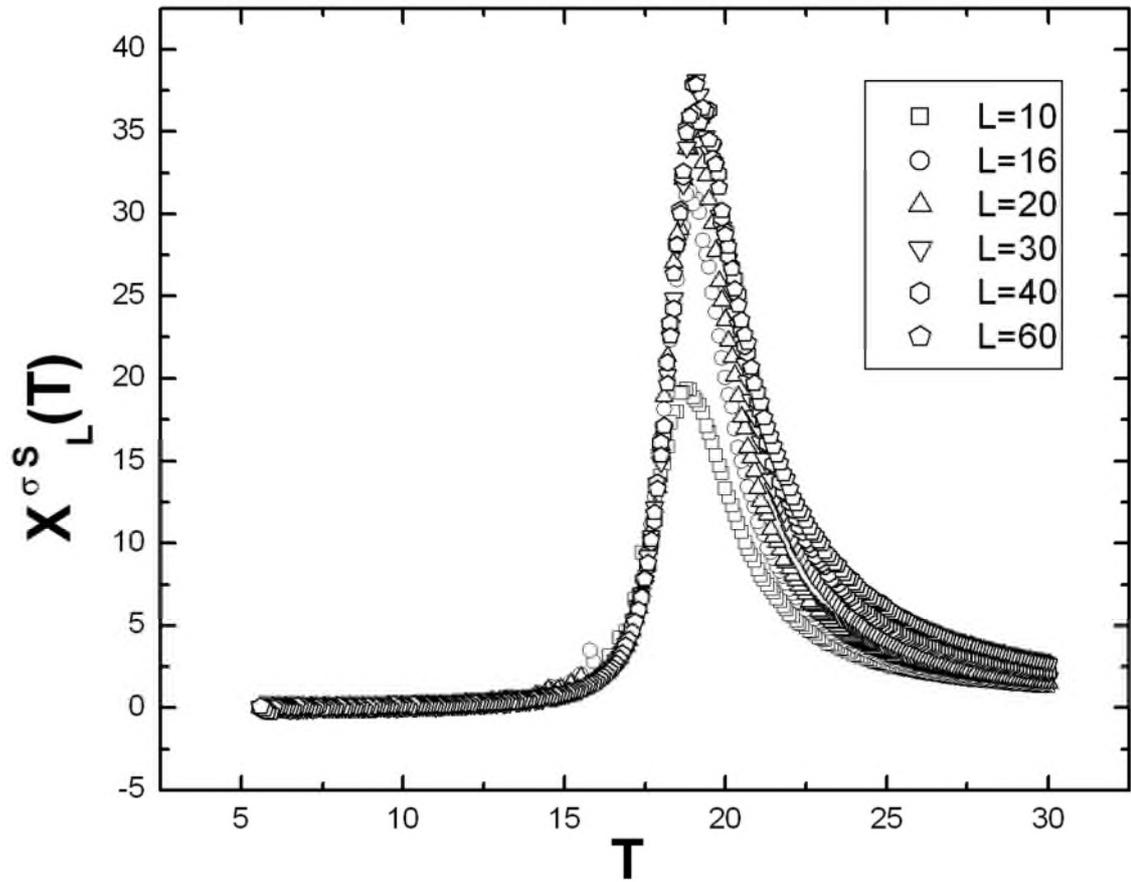


Figure (III, 12)- La susceptibilité $\chi_L^{\sigma S}(T)$, en fonction de la température T pour différents choix de la taille L .

Numerical study of the spin-3/2 Ashkin-Teller model

R. Boudefla^{1*}, S. Bekhechi¹, F. Hontinfinde²

¹ Laboratoire de Physique Théorique (LPT), B.P. 230, Université Abou Bekr Belkaïd, Tlemcen 13000, Algeria

² Département de Physique (FAST) et Institut des Mathématiques et de Sciences Physiques (IMSP), Université d'Abomey-Calavy, 01 B.P. 613, Porto-Novo, Benin

Received November 8, 2014, in final form May 10, 2015

The study of the Ashkin-Teller model (ATM) of spin-3/2 on a hypercubic lattice is undertaken via Monte Carlo simulation. The phase diagrams are displayed and discussed in the physical parameter space. Rich physical properties are recovered, namely the second order transition and multicritical points. The phase diagrams have been obtained by varying the strength describing the four spin interaction and the single ion potential. This model shows a new high temperature partially ordered phase, called $\langle S \rangle$ and a new Baxter 3/2 ground state which do not exist either in the spin-1/2 ATM or in the spin-1 ATM.

Key words: modelization, Ashkin-Teller, spin-3/2, Monte-Carlo, phase diagram, Baxter

PACS: 75.10.Hk

1. Introduction

In this work, we will analyze a magnetic model with three spin states known as Ashkin-Teller model [1] which is a superposition of two Ising models with spin variables σ and S . In every site i of the cubic lattice, two spin variables σ_i and S_i are associated. In each Ising model, there are two spin nearest-neighbors interaction with a strength K_2 [2]. In addition, different Ising models are coupled by a four-spin interaction with strength K_4 [3] and on each site there is a single ion potential D [2]. All these interactions are limited to the first nearest neighbors.

Recent researches of this Ising model and its phase diagrams with four spin interaction and some of its applications have been done [4–8].

The selenium compound adsorbed on a nickel surface [9] is a good physical picture for this model. Different methods have been used to understand the critical behaviour of this model. For the two dimensional case, all of mean-field approximation (MFA) [10–13] Monte Carlo simulations (MC) [11–14], series analysis [15], exact duality [16], transfer-matrix finite size scaling calculations [9, 14, 17], renormalization group [18, 19] and mean field renormalization group approach [20], yield three different phases: a paramagnetic phase in which neither σ nor S nor anything else is ordered ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$); Baxter phase in which σ and S independently order in ferromagnetic fashion, and also $\langle \sigma S \rangle \neq 0$; a third phase called PO_1 in which σS is ferromagnetically ordered $\langle \sigma S \rangle \neq 0$ but $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0$.

One of the most interesting and challenging phenomena is the appearance of other new partially ordered phases in the ATM. For example, MFA and MC simulations applied to the three-dimensional case yield first and second-order phase transitions and partially ferromagnetic ordered phase $\langle \sigma \rangle$ ($\langle \sigma \rangle \neq 0$ and $\langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$) [11]. By using exact duality transformations and symmetry considerations [17, 21], the anisotropic ATM in $d = 2$ also presents partially ordered phases called $\langle \sigma \rangle$ and $\langle S \rangle$ which are connected by symmetry operations to the $\langle \sigma S \rangle$ phase. These results are confirmed in $d = 2$ and $d = 3$ by MFA and MC simulations [12]. The PO_2 phase defined by ($\langle S \rangle = \langle \sigma \rangle \neq 0$; $\langle \sigma S \rangle = 0$) found in the spin-1 Ashkin-Teller model [14, 22] does not occur in the spin-1/2 Ashkin-Teller model [12].

*raniaboudefla@yahoo.com

Monte Carlo (MC) simulation can be shown as a powerful and successful tool to study critical phenomena [12] at reduced dimensionality ($d = 2$). So, it is of importance to fully understand the phase diagram obtained from this model through a nonperturbative method, such as Monte Carlo technique. The main problem which arises from this method is the existence of statistical errors.

In this paper, we mainly focused on the spin-3/2 Ashkin-Teller model using MC simulations. The paper is organized as follows: in the second section, the investigated model is introduced and the ground state diagram is presented. Section 3 contains the description of the methodology and formalism of the MC simulations. We collect our results and discussions in section 4. Finally, the summary and conclusions are drawn in section 5.

2. Model and ground state diagram

The Hamiltonian of the model can be expressed as:

$$H = -K_2 \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j + S_i S_j) - K_4 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j S_i S_j - D \sum_{\langle i \rangle} (S_i^2 + \sigma_i^2), \quad (2.1)$$

where the spins σ_i and S_i are located on sites of an hypercubic lattice and take both the values $\pm 3/2$ and $\pm 1/2$. The first term describes the bilinear interactions between the spins at sites i and j , with the interaction parameter K_2 . The second term describes the four-spins interaction with strength K_4 and on each site there is a single ion potential D . All these interactions are restricted to the z nearest neighbours pairs of spins.

In order to calculate the ground state energy, we express the hamiltonian as a sum of contributions of the nearest-neighbour spins. So, the contribution of a pair S_1, S_2 and σ_1, σ_2 is:

$$E_p = -K_2(\sigma_1 \sigma_2 + S_1 S_2) - K_4 \sigma_1 \sigma_2 S_1 S_2 - D(S_1^2 + S_2^2 + \sigma_1^2 + \sigma_2^2). \quad (2.2)$$

By comparing the values of E_p for different configurations, we obtain the following structure of phase diagram shown in figure 1:

- (i) For $K_4/K_2 < D/K_2$: if $K_4/K_2 < -0.4$, the spins σ_i are parallel while the spins S_i are antiparallel. Then we have: $\langle S \rangle_F = \langle \sigma \rangle_{AF} = \langle \sigma S \rangle_F = 0$ and $\langle S \rangle_{AF} = \langle \sigma \rangle_F = 3/2$ and $\langle \sigma S \rangle_{AF} \neq 0$ which characterize the phase called Baxter-3/2, otherwise if $K_4/K_2 > -0.4$ the Baxter-3/2 phase is stable since both spins σ_i and S_i are aligned and equal to 3/2.
- (ii) For $K_4/K_2 > D/K_2$: if $K_4/K_2 < -4$, the spins σ_i are parallel while the spins S_i are antiparallel. Then we have: $\langle S \rangle_F = \langle \sigma \rangle_{AF} = \langle \sigma S \rangle_F = 0$ and $\langle S \rangle_{AF} = \langle \sigma \rangle_F = 1/2$ and $\langle \sigma S \rangle_{AF} \neq 0$ which characterize the phase called Baxter-1/2. The symbols $\langle \dots \rangle_F$ and $\langle \dots \rangle_{AF}$ indicate the thermal average of spin variables respectively in the ferromagnetic and antiferromagnetic phases, or else if $K_4/K_2 > -4$, the Baxter-1/2 phase is stable since both spins σ_i and S_i are aligned and equal to 1/2.
- (iii) Except for $K_4/K_2 > D/K_2$, in the area $0 < D/K_2 < -1$, two Baxter mixed phases have been found, the first when $K_4/K_2 > -0.4$, all the spins σ_i and S_i are parallel, and the second one if $K_4/K_2 < -0.4$, the spins S_i are parallel while the spins σ_i are misaligned.

3. Monte-carlo simulations

The system studied here is a $L \times L$ square lattice with even values of L , containing $N = L^2$ spins. In order to update the lattice configurations, the well-known Metropolis algorithm [12] is used with periodic boundary conditions. Monte-Carlo (MC) simulations are performed for $d = 2$ with systems of sizes $L = 10, 16, 20, 30, 40$ and 60 . We use 100000 to 200000 MC steps to calculate the thermodynamic quantities after discarding 5000–50000 sweeps for thermal equilibrium. Most of the phase diagrams presented here are

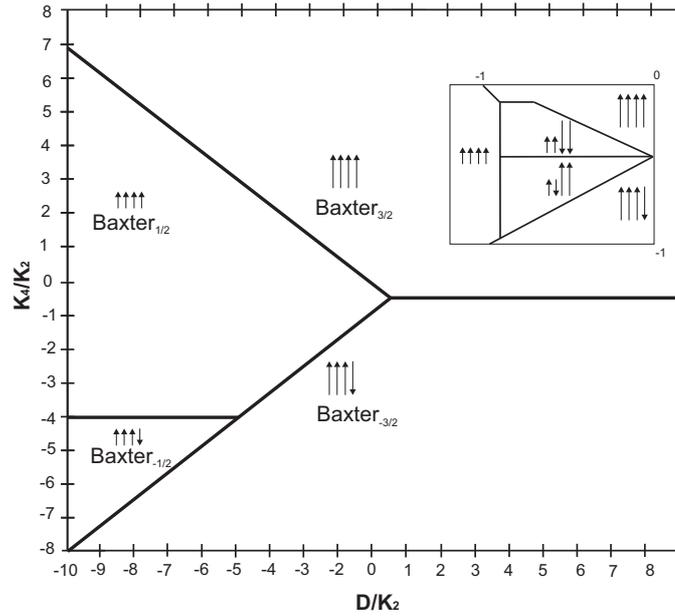


Figure 1. Ground state phase diagram.

obtained with $L = 30$. The physical quantities of use are the magnetizations $|M_\alpha|$ ($\alpha = \sigma, S, \sigma S$), and are estimated by:

$$|M_\alpha| = \langle |M_\alpha| \rangle = \frac{1}{Np} \sum_c \sum_i \alpha_i(c) \quad \text{with} \quad \alpha = \sigma, S, \sigma S, \quad (3.1)$$

where i runs over the lattice sites, c runs over the configurations obtained to update the lattice over one sweep of the N spins of the lattice [one Monte-Carlo step (MCS)] counted after the system reaches thermal equilibrium, and p is the number of the MCS. In order to measure the phase boundaries, we find useful the measurement of fluctuations (variance of the order-parameters) in M_α defined by the magnetic susceptibility:

$$\chi_\alpha = \frac{N}{k_B T} (\langle M_\alpha^2 \rangle - \langle |M_\alpha| \rangle^2) \quad \text{with} \quad \alpha = \sigma, S, \sigma S, \quad (3.2)$$

k_B is the Boltzmann's constant.

4. Results and discussion

The phase diagram obtained by Monte Carlo simulation is shown in figure 2 and presented in the plane $(k_B T/K_2, D/K_2)$. We have a paramagnetic phase, where $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$ and two ferromagnetic (Baxter) phases, where $\langle \sigma \rangle$ and $\langle S \rangle$ are ordered ferromagnetically and also $\langle \sigma S \rangle \neq 0$. The first is Baxter-1/2 and the second is the Baxter-3/2 which were not found in the earlier works [13, 14]. These phases are separated by critical lines, multicritical points and two partially ordered phases: the $\langle \sigma S \rangle$ phase where $(\langle \sigma S \rangle \neq 0$ and $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0)$ and the $\langle S \rangle$ phase where $(\langle \sigma \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0, \langle S \rangle \neq 0)$. However, the MC data are obtained from peaks in the susceptibilities [23] for $L = 30$. The nature of the transition is determined from discontinuities (continuities) in the order parameters for first (second) order transition by MC simulations [12]. In our paper, the nature of the transitions is always of second order for all values. We have located the phase boundaries by using the maximum of the susceptibility. This method has been successfully applied to other models [13] and has shown a good precision with the transfer matrix finite-size-scaling method [14].

The results of figure 2 are obtained for $K_4 = 0.25$. We also see the Baxter-1/2 phase separated from the paramagnetic phase by the partially ordered phase $\langle \sigma S \rangle$ at low values of D/K_2 , as seen in the figures 3, 4 and the Baxter-3/2 phase is separated from the paramagnetic phase by the new partially ordered phase

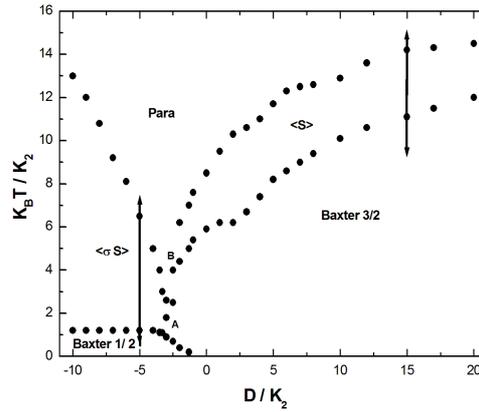


Figure 2. Phase diagram in the $(D/K_2, T/K_2)$ plane for $K_4 = 0.25$ from Monte Carlo simulation, data are shown with $L = 30$.

$\langle S \rangle$ at high values of D/K_2 , as seen in the figures 5, 6. This phase does not exist either in the spin-1/2 [12] or in the spin-1 [14] Ashkin-Teller model but is viewed in the mixed (ATM) [13]. The meeting of all critical lines is located at the multicritical points $A(-2.98 \pm 0.01; 0.77 \pm 0.01)$ and $B(-2.54 \pm 0.01; 3.97 \pm 0.01)$. The two phases $\langle \sigma S \rangle$ and $\langle S \rangle$ separate the disordered phase from the ferromagnetic Baxter phases by second order transition lines.

For error bars, we have made 300000 MCS and discarding 50000 and made measurements every 100 MCS, we plotted errors to the magnetizations and susceptibilities, as seen in the figures 3–6 which present plot of the three order-parameters σ , S and σS as function of temperature for $K_4 = 0.25$ and $D = -5$ (and $D = 15$) as obtained by MC simulations showing that the error bars are very small, the simulation was too long, it took a lot of computing time.

By increasing the four body interaction, K_4/K_2 , the two Baxter phases remain in the phase diagrams whereas depending on the strength of K_4 , as shown in figure 7 for $K_4 = 2$, the partially ordered phase $\langle \sigma S \rangle$ shrinks and the other one $\langle S \rangle$ disappears. But for strong K_4 , $K_4 = 6$, the partially ordered phase $\langle \sigma S \rangle$ disappears and the other partially phase $\langle S \rangle$ is recovered as shown in figure 8. Continuous lines are

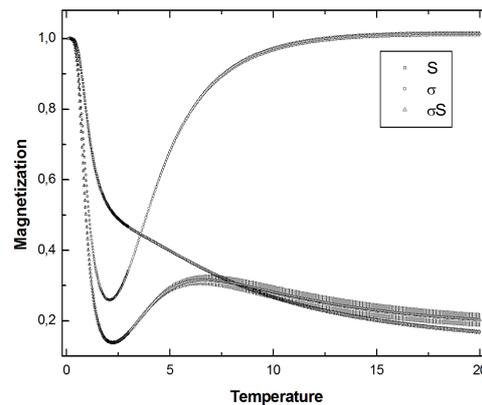


Figure 3. Plot of the three order-parameters $\langle \sigma S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ and $\langle S \rangle$ with error bars as function of temperature for $K_4 = 0.25$ and $D = -5$ as obtained by MC simulations for the square lattice showing that the phase transitions are of second-order.

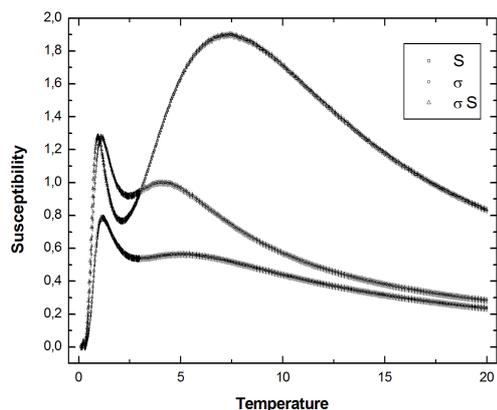


Figure 4. Plot of the susceptibility with error bars for $K_4 = 0.25$ and $D = -5$ as functions of temperature showing the existence of the phase $\langle \sigma S \rangle$, where at $T_1' = 1.20$, $\langle \sigma S \rangle \neq 0$ and $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0$, whereas at $T_1'' = 6.48$ we have $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$.

linked by multicritical points of higher order.

5. Conclusion

In this paper, by using MC simulations we have shown that the isotropic ferromagnetic Ashkin-Teller model presents a new partially ordered phase $\langle S \rangle$, which is very clear at high temperatures (also found infinitesimal in the Monte Carlo mixed ATM [13]), and other phases like Baxter-3/2 where all spins have the magnitude of 3/2. In the parameter space $(K_4/K_2, D/K_2$ and $T/K_2)$, the phase diagrams present rich varieties of phase transitions with surfaces of second order phase transitions, bounded by lines of multicritical points.

In conclusion, the study was carried out on the model of Ashkin-Teller spin-3/2. It has revealed the complexity of the model with very rich structures and gives a better understanding of the properties

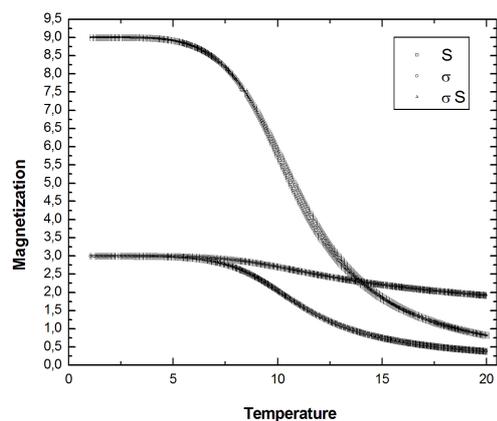


Figure 5. Plot of the three order-parameters $\langle \sigma S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ and $\langle S \rangle$ with error bars as function of temperature for $K_4 = 0.25$ and $D = 15$ as obtained by MC simulations for the square lattice showing that the phase transitions are of second-order.

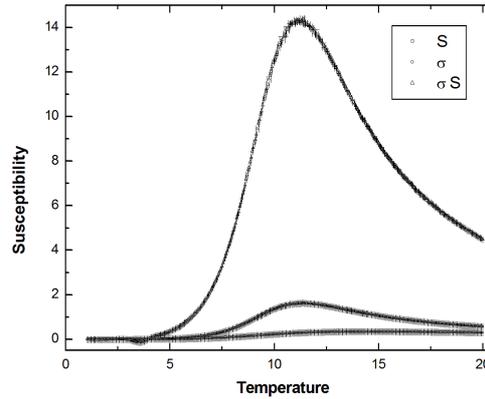


Figure 6. Plot of the susceptibility with error bars for $K_4 = 0.25$ and $D = 15$ as functions of temperature showing the existence of the phase $\langle S \rangle$, where at $T_2^I = 11.10$, $\langle \sigma \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$, $\langle S \rangle \neq 0$, whereas at $T_2^{II} = 14.21$ we have $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$.

of condensed matter, especially magnetic properties of the systems consisting of many atom molecules holders. It is on the basis of this study that we plan to study the magnetic properties of the Ashkin-Teller model with mixed spins on different types of lattices. The presence of many atoms with different magnetic moments on the same site can reveal some interesting properties. The model will also be analyzed in three dimensions including the crystal fields and long range interactions.

References

1. Ashkin J., Teller E., Phys. Rev., 1943, **64**, 178; doi:10.1103/PhysRev.64.178.
2. Kogut J.B., Rev. Mod. Phys., 1979, **51**, 659; doi:10.1103/RevModPhys.51.659.
3. Barreto F.C.S., Braz. J. Phys., 2013, **41**, 43; doi:10.1007/s13538-012-0104-z.
4. Chatelain C., Condens. Matter Phys., 2011, **17**, 33601; doi:10.5488/CMP.17.33601.
5. Huang Y., Deng Y., Jacobsen J.L., Salas J., Nucl. Phys. B, 2013, **868**, 492; doi:10.1016/j.nuclphysb.2012.11.015.
6. Chang Z., Wang P., Zheng Y.-H., Commun. Theor. Phys., 2008, **49**, 525; doi:10.1088/0253-6102/49/2/57.

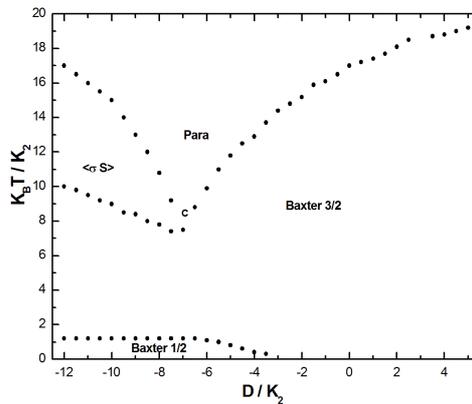


Figure 7. Phase diagram in the $(D/K_2, T/K_2)$ plane for $K_4 = 2$ from Monte Carlo simulation, data are shown with $L = 30$.

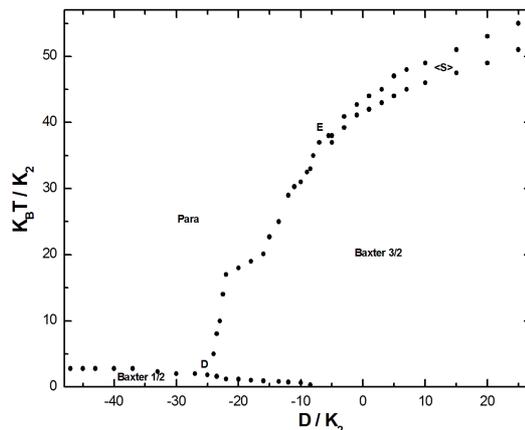


Figure 8. Phase diagram in the $(D/K_2, T/K_2)$ plane for $K_4 = 6$ from Monte Carlo simulation, data are shown with $L = 30$.

7. Le J.-X., Yang Zh.-R., Commun. Theor. Phys., 2005, **43**, 841; doi:10.1088/0253-6102/43/5/017.
8. Bezerra C.G., Mariza A.M., de Araújo J.M., da Costa F.A., Physica A, 2001, **292**, 429; doi:10.1016/S0378-4371(00)00568-9.
9. Bak P., Kleban P., Unertel W.N., Ochab J., Akinci G., Barlet N.C., Einstein T.L., Phys. Rev. Lett., 1985, **54**, 1542; doi:10.1103/PhysRevLett.54.1539.
10. Zhang G.M., Yang C.Z., Phys. Rev. B, 1993, **48**, 9452; doi:10.1103/PhysRevB.48.9452.
11. Ditzian R.V., Banavar J.R., Grest G.S., Kadano L.P., Phys. Rev. B, 1980, **22**, 2542; doi:10.1103/PhysRevB.22.2542.
12. Bekhechi S., Benyoussef A., Elkenz A., Ettaki B., Loulidi M., Physica A, 1999, **264**, 503; doi:10.1016/S0378-4371(98)00474-9.
13. Bekhechi S., Benyoussef A., Elkenz A., Ettaki B., Loulidi M., Eur. Phys. J. B, 2000, **18**, 278; doi:10.1007/s100510070058.
14. Badehdah M., Bekhechi S., Benyoussef A., Ettaki B., Phys. Rev. B, 1999, **59**, 6250; doi:10.1103/PhysRevB.59.6250.
15. Ditzian R.V., Phys. Lett. A, 1972, **38**, 451; doi:10.1016/0375-9601(72)90032-1.
16. Wegner F.J., J. Phys. C: Solid State Phys., 1972, **5**, L131; doi:10.1088/0022-3719/5/11/004.
17. Badehdah M., Bekhechi S., Benyoussef A., Touzani M., Physica B, 2000, **291**, 394; doi:10.1016/S0921-4526(00)00279-9.
18. Banavar J.R., Jasnow D., Landau D.P., Phys. Rev. B, 1979, **20**, 3820; doi:10.1103/PhysRevB.20.3820.
19. Knops H.J.F., J. Phys. A: Math. Gen., 1975, **8**, 1508; doi:10.1088/0305-4470/8/9/020.
20. Plascak J.A., Sa Barreto F.C., J. Phys. A: Math. Gen., 1986, **19**, 2195; doi:10.1088/0305-4470/19/11/027.
21. Wu F.Y., Lin K.Y., J. Phys. C: Solid State Phys., 1974, **7**, L181; doi:10.1088/0022-3719/7/9/002.
22. Loulidi M., Phys. Rev. B, 1997, **55**, 11611; doi:10.1103/PhysRevB.55.11611.
23. Ditzian R.V., J. Phys. C: Solid State Phys., 1972, **5**, L250; doi:10.1088/0022-3719/5/17/005.

Чисельне вивчення спінів-3/2 моделі Ашкіна-Теллера

Р. Будефля¹, С. Бекеші¹, Ф. Гонтінфінде²

¹ Лабораторія теоретичної фізики, В.Р. 230, Університет Абу Бакр Белькаїд, Тлемсен 13000, Алжир

² Відділення фізики (FAST) та інститут математики і фізичних наук (IMSP), Університет Абомей-Калаві, Бенін

Вивчення моделі Ашкіна-Теллера спінів-3/2 на гіперкубічній ґратці здійснюється методом Монте Карло. Продемонстровано фазові діаграми і обговорено простір фізичних параметрів. Виявлено багатство фізичних властивостей, а саме, перехід другого роду і мультикритичні точки. Фазові діаграми отримані шляхом зміни сили, що описує чотириспінову взаємодію та одноіонний потенціал. Дана модель демонструє нову високотемпературну частково впорядковану фазу, що називається $\langle S \rangle$, і новий основний 3/2 стан Бакстера, якого нема в моделях Ашкіна-Теллера спінів-1/2 і spin-1.

Ключові слова: моделювання, Ашкін-Теллер, спінів-3/2, Монте-Карло, фазова діаграма, Бакстер

CHAPITRE IV

Les modèles de spins nous ont permis une meilleure compréhension des transitions de phases dans les fluides et les systèmes magnétiques. Introduits pour la première fois par Ernst Ising, en 1929 [94], pour étudier les transitions magnétiques, la solution exacte du modèle d'Ising n'a été trouvée qu'en 1944 par Lars Onsager pour un réseau bidimensionnel. L'absence d'un formalisme mathématique rigoureux pour résoudre exactement ce modèle nous incite à utiliser d'autres méthodes de la mécanique statistique. Parmi ces méthodes, la méthode du champ moyen [95-96] découverte par Weiss en 1907 pour expliquer le ferromagnétisme. Cette méthode s'est avéré comme étant l'approximation d'ordre zéro des théories exactes (le groupe de renormalisation, le finite size scaling[84-86]). Dans ce chapitre nous présentons la méthode du champ moyen qui va nous permettre d'expliquer le modèle Ashkin Teller spin-1 sous champ transverse.

I. La méthode du champ moyen :

Vu les difficultés mathématiques qui se posent pour la résolution exactes des modèles théoriques, la plupart des transitions ne peuvent s'interpréter que dans le cadre des théories reposant sur des approximations. La majorité de ces théories ne sont que des transitions de la théorie du champ moléculaire de Pierre Weiss [97-98] ou de la théorie de Bragg de Williams qui lui est équivalente. Dans la théorie du champ moyen, chaque site du réseau est soumis à un champ moléculaire effectif créée par ces proches voisins. Dans le cas du modèle d'Ising décrit par l'Hamiltonien H :

$$H = -K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (\text{IV. 1})$$

Où la sommation porte sur tous les couples premiers voisins. La méthode du champ moyen stipule que chaque spin est dans le champ créée par ces voisins, soit :

$$H = - \sum_i h_i S_i \quad (\text{IV. 2})$$

Avec $h_i = - \sum_j J S_j$ est le champ moléculaire et la sommation est étendue sur tous les sites j premiers voisins du site i .

D'une façon générale, soit un système en équilibre thermodynamique. La valeur moyenne d'une grandeur physique, représentée par un opérateur A , est donnée par :

$$\langle A \rangle = Tr (\rho A) \quad (\text{IV. 3})$$

Chapitre IV : L'approximation du champ moyen et le modèle d'Ashkin-Teller à spin1 sous champ transverse.

Où Tr est l'opérateur trace, ρ désigne l'opérateur densité du système tel que : $Tr \rho = 1$

L'expression de l'opérateur densité s'obtient en minimisant l'énergie libre F du système. On a :

$$F = \beta Tr(\rho H) + Tr(\rho \text{Log} \rho) \quad (\text{IV. 4})$$

On en déduit :

$$\rho = e^{-\beta H} / Tr(e^{-\beta H}) \quad (\text{IV. 5})$$

Et :

$$F = (-1/\beta) \text{Log}(e^{-\beta H}) \quad (\text{IV. 6})$$

Comme, en général, on ne sait pas calculer exactement la fonction de partition $Z = Tr(e^{-\beta H})$, on ne doit se contenter d'une expression approchée \tilde{F} de l'énergie libre obtenue à partir d'un opérateur densité approximatif ρ_0 , on a :

$$\beta \tilde{F} = \beta Tr(\rho_0 H) + Tr(\rho_0 \text{Log} \rho_0) \quad (\text{IV. 7})$$

Très souvent, il est possible d'associer à ρ_0 un Hamiltonien d'essai H_0 tel que :

$$\rho_0 = e^{-\beta H_0} / Tr(e^{-\beta H_0}) \quad (\text{IV. 8})$$

Il est alors commode d'écrire (IV. 7) en faisant apparaître explicitement H_0 , on a :

$$\beta \tilde{F} = \beta Tr(\rho_0 H) + Tr(\rho_0 \text{Log} \rho_0) + \beta Tr(\rho_0 (H - H_0)) \quad (\text{IV. 9})$$

Et :

$$\tilde{F} = F_0 + Tr(\rho_0 (H - H_0)) \quad (\text{IV. 10})$$

Ou $F_0 = -\text{Log}(Tr(e^{-\beta H_0})) / \beta$ est l'énergie libre du système décrit par l'Hamiltonien H_0 . On peut montrer que quel que soit l'opérateur $\neq \rho_0$, l'énergie libre approchée est toujours supérieur à l'énergie libre exacte, soit :

$$F < F_0 + Tr(\rho_0 (H - H_0)) \quad (\text{IV. 11})$$

A chaque opérateur densité ρ_0 , appartenant à une certaine classe, correspond une énergie libre $\tilde{F}(\rho_0)$. A une température donnée, le meilleur opérateur densité de la classe est

celui qui minimise la fonctionnelle $\check{F}(\rho_0)$ de façon à approcher le plus possible l'énergie libre F . Dans la pratique, deux cas sont à distinguer ; soit que l'opérateur densité approximatif ρ_0 est défini à partir d'un Hamiltonien d'essai H_0 . Dans ce cas il faut minimiser la formule (IV. 10). Soit que l'opérateur densité ρ_0 est défini sans passer par l'intermédiaire d'un hamiltonien d'essai. Dans ce cas il faut alors minimiser :

$$\check{F} = \beta Tr(\rho_0 H) + Tr(\rho_0 \text{Log} \rho_0) / \beta \quad (\text{IV. 12})$$

La théorie du champ moyen, bien qu'elle ne tienne pas compte des fluctuations, donne des résultats qui sont qualitativement correctes.

II. Etude du modèle d'Ashkin-Teller spin-1 sous champ transverse par L'approximation champ moyen:

En exploitant la correspondance formelle existant entre la physique statistique et la mécanique quantique formulée par Feynman [99], il est possible d'associer à un système statistique classique à d dimensions, un système quantique à $d - 1$ dimensions spatiales, la dimension d'espace manquante correspondant à l'évolution temporelle de ce dernier.

Le modèle transverse a été initialement introduit par Gennes [100] pour la liaison-ferroélectriques d'hydrogène tels que dans le KH_2PO_4 . Depuis ça, ce modèle a été appliqué à plusieurs systèmes physiques, comme le $DyVO_2$, utilisant des techniques sophistiquées [101-102-103-104].

Notre objectif dans ce chapitre est d'étudier l'effet d'un champ magnétique transverse sur les diagrammes de phase et le comportement multicritique d'un modèle anisotrope Ashkin-Teller [71] en utilisant la théorie du champ moyen.

L'Hamiltonien qui décrit le modèle est donné par :

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - J_4 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z S_i^z S_j^z - D \sum_{\langle i \rangle} (S_i^{2z} + \sigma_i^{2z}) - \Omega \sum_{\langle i \rangle} (S_i^x + \sigma_i^x) \quad (\text{IV.13})$$

Chaque site d'un réseau cubique est occupée par les spins σ_i^α et S_i^α , $\alpha = z, x$, sont les matrices de Pauli du spin1.

Chapitre IV : L'approximation du champ moyen et le modèle d'Ashkin-Teller à spin1 sous champ transverse.

$$\text{Or : } \sigma_i^\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ et } S_i^\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ω est le champ transverse. Les interactions J_1 et J_2 supposés être différents dans le cas anisotrope, et sont les interactions bilinéaires entre les spins aux sites i et j . Le paramètre d'interaction J_4 décrit les interactions 4 spins et sur chaque site agit un champ cristallin D .

Un site i occupé par les spins et est décrit par l'hamiltonien correspondant à la matrice :

$$H_0^i = \begin{pmatrix} A & I & 0 & I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ I & E & I & 0 & I & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & B & 0 & 0 & I & 0 & 0 & 0 \\ \\ I & 0 & 0 & F & J & 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & J & 0 & J & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 & J & G & 0 & 0 & I \\ \\ 0 & 0 & 0 & I & 0 & 0 & C & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & I & 0 & I & H & I \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I & 0 & I & D \end{pmatrix} \quad (\text{IV. 14})$$

Avec :

$$A = -(h_1 + h_2 + h_4) - 2 * D, \quad B = -(-h_1 - h_2 - h_4) + 2 * D, \quad C = -(-h_1 + h_2 - h_4) + 2 * D, \quad D = -(-h_1 - h_2 + h_4), \quad E = -h_1, \quad F = -h_2, \quad G = +h_2, \quad H = +h_1, \quad I = -OMG/\sqrt{2}, \quad J = -OMG/RR.$$

Les paramètres h_1 , h_2 et h_4 étant les champs efficaces $h_1 = qJ_1 m_\sigma^z$, $h_2 = qJ_2 m_S^z$ et $h_4 = qJ_4 m_{\sigma S}^z$, et q est le numéro de coordination. On utilise les notations $m_\sigma^\alpha = \langle \sigma_i^\alpha \rangle$, $m_S^\alpha = \langle S_i^\alpha \rangle$ et $m_{\sigma S}^\alpha = \langle \sigma S_i^\alpha \rangle$, $\alpha = z, x$.

La fonction de partition est donnée par :

$$Z = e^{-\beta\lambda_1} + e^{-\beta\lambda_2} + e^{-\beta\lambda_3} + e^{-\beta\lambda_4} + e^{-\beta\lambda_5} + e^{-\beta\lambda_6} + e^{-\beta\lambda_7} + e^{-\beta\lambda_8} + e^{-\beta\lambda_9} \quad (\text{IV. 15})$$

Ou $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et les paramètres $\lambda_k, k = 1 \dots 9$, sont les valeurs propres de l'Hamiltonien H_0^i .

Chapitre IV : L'approximation du champ moyen et le modèle d'Ashkin-Teller à spin1 sous champ transverse.

Les aimantations sont :

$$m_{\sigma}^{\alpha} = \langle \sigma_i^{\alpha} \rangle = \text{Tr} \sigma_i^{\alpha} e^{-\beta H_0^i} / \text{Tr} e^{-\beta H_0^i} \quad (\text{IV. 16})$$

$$m_S^{\alpha} = \langle S_i^{\alpha} \rangle = \text{Tr} S_i^{\alpha} e^{-\beta H_0^i} / \text{Tr} e^{-\beta H_0^i} \quad (\text{IV. 17})$$

$$m_{\sigma S}^{\alpha} = \langle \sigma S_i^{\alpha} \rangle = \text{Tr} \sigma S_i^{\alpha} e^{-\beta H_0^i} / \text{Tr} e^{-\beta H_0^i} \quad (\text{IV. 18})$$

Les aimantations longitudinales correspondent à un $\alpha = z$, alors que les aimantations transversales sont obtenus lorsque $\alpha = x$. On peut écrire l'expansion de ces expressions comme suit :

$$\begin{aligned} m_{\sigma}^z &= A_1 e^{-\beta \lambda_1} + B_1 e^{-\beta \lambda_2} + C_1 e^{-\beta \lambda_3} + D_1 e^{-\beta \lambda_4} + E_1 e^{-\beta \lambda_5} + F_1 e^{-\beta \lambda_6} + G_1 e^{-\beta \lambda_7} + H_1 e^{-\beta \lambda_8} + I_1 e^{-\beta \lambda_9} / Z \\ & \quad (\text{IV. 19}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_S^z &= A_2 e^{-\beta \lambda_1} + B_2 e^{-\beta \lambda_2} + C_2 e^{-\beta \lambda_3} + D_2 e^{-\beta \lambda_4} + E_2 e^{-\beta \lambda_5} + F_2 e^{-\beta \lambda_6} + G_2 e^{-\beta \lambda_7} + H_2 e^{-\beta \lambda_8} + I_2 e^{-\beta \lambda_9} / Z \\ & \quad (\text{IV. 20}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{\sigma S}^z &= A_4 e^{-\beta \lambda_1} + B_4 e^{-\beta \lambda_2} + C_4 e^{-\beta \lambda_3} + D_4 e^{-\beta \lambda_4} + E_4 e^{-\beta \lambda_5} + F_4 e^{-\beta \lambda_6} + G_4 e^{-\beta \lambda_7} + H_4 e^{-\beta \lambda_8} + I_4 e^{-\beta \lambda_9} / Z \\ & \quad (\text{IV. 21}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{\sigma}^x &= J_1 e^{-\beta \lambda_1} + K_1 e^{-\beta \lambda_2} + L_1 e^{-\beta \lambda_3} + M_1 e^{-\beta \lambda_4} + N e^{-\beta \lambda_5} + O_1 e^{-\beta \lambda_6} + P_1 e^{-\beta \lambda_7} + Q_1 e^{-\beta \lambda_8} + R_1 e^{-\beta \lambda_9} / Z \\ & \quad (\text{IV. 22}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_S^x &= J_2 e^{-\beta \lambda_1} + K_2 e^{-\beta \lambda_2} + L_2 e^{-\beta \lambda_3} + M_2 e^{-\beta \lambda_4} + N_2 e^{-\beta \lambda_5} + O_2 e^{-\beta \lambda_6} + P_2 e^{-\beta \lambda_7} + Q_2 e^{-\beta \lambda_8} + R_2 e^{-\beta \lambda_9} / Z \\ & \quad (\text{IV. 23}) \end{aligned}$$

Chapitre IV : L'approximation du champ moyen et le modèle d'Ashkin-Teller à spin1 sous champ transverse.

Les coefficients $A_k, B_k, C_k, D_k, E_k, F_k, G_k, H_k, I_k, J_k, K_k, L_k, M_k, N_k, O_k, P_k, Q_k$ et R_k , $k = 1 \dots 9$ sont exprimés en :

$$\begin{aligned}
 A_1 &= a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 - a_7^2 - a_8^2 - a_9^2, \\
 B_1 &= b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 - b_7^2 - b_8^2 - b_9^2, \\
 C_1 &= c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 - c_7^2 - c_8^2 - c_9^2, \\
 D_1 &= d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 - d_7^2 - d_8^2 - d_9^2, \\
 E_1 &= e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 - e_7^2 - e_8^2 - e_9^2, \quad (\text{IV. 24}) \\
 F_1 &= f_1^2 + f_2^2 + f_3^2 - f_7^2 - f_8^2 - f_9^2, \\
 G_1 &= g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 - g_7^2 - g_8^2 - g_9^2, \\
 H_1 &= h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 - h_7^2 - h_8^2 - h_9^2, \\
 I_1 &= i_1^2 + i_2^2 + i_3^2 - i_7^2 - i_8^2 - i_9^2.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_2 &= a_1^2 - a_3^2 + a_4^2 - a_6^2 + a_7^2 - a_9^2, \\
 B_2 &= b_1^2 - b_3^2 + b_4^2 - b_6^2 + b_7^2 - b_9^2, \\
 C_2 &= c_1^2 - c_3^2 + c_4^2 - c_6^2 + c_7^2 - c_9^2, \\
 D_2 &= d_1^2 - d_3^2 + d_4^2 - d_6^2 + d_7^2 - d_9^2, \\
 E_2 &= e_1^2 - e_3^2 + e_4^2 - e_6^2 + e_7^2 - e_9^2, \quad (\text{IV. 25}) \\
 F_2 &= f_1^2 - f_3^2 + f_4^2 - f_6^2 + f_7^2 - f_9^2, \\
 G_2 &= g_1^2 - g_3^2 + g_4^2 - g_6^2 + g_7^2 - g_9^2, \\
 H_2 &= h_1^2 - h_3^2 + h_4^2 - h_6^2 + h_7^2 - h_9^2, \\
 I_2 &= i_1^2 - i_3^2 + i_4^2 - i_6^2 + i_7^2 - i_9^2.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_4 &= a_1^2 - a_3^2 - a_7^2 + a_9^2 , \\
 B_4 &= b_1^2 - b_3^2 - b_7^2 + b_9^2 , \\
 C_4 &= c_1^2 - c_3^2 - c_7^2 + c_9^2 , \\
 D_4 &= d_1^2 - d_3^2 - d_7^2 + d_9^2 , \\
 E_4 &= e_1^2 - e_3^2 - e_7^2 + e_9^2 , \quad (\text{IV. 26}) \\
 F_4 &= f_1^2 - f_3^2 - f_7^2 + f_9^2 , \\
 G_4 &= g_1^2 - g_3^2 - g_7^2 + g_9^2 , \\
 H_4 &= h_1^2 - h_3^2 - h_7^2 + h_9^2 , \\
 I_4 &= i_1^2 - i_3^2 - i_7^2 + i_9^2 .
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J_1 &= a_4(a_1 + a_7) + a_5(a_2 + a_8) + a_6(a_3 + a_9) , \\
 K_1 &= b_4(b_1 + b_7) + b_5(b_2 + b_8) + b_6(b_3 + b_9) , \\
 L_1 &= c_4(c_1 + c_7) + c_5(c_2 + c_8) + c_6(c_3 + c_9) , \\
 M_1 &= d_4(d_1 + d_7) + d_5(d_2 + d_8) + d_6(d_3 + d_9) , \\
 N_1 &= e_4(e_1 + e_7) + e_5(e_2 + e_8) + e_6(e_3 + e_9) , \quad (\text{IV. 27}) \\
 O_1 &= f_4(f_1 + f_7) + f_5(f_2 + f_8) + f_6(f_3 + f_9) , \\
 P_1 &= g_4(g_1 + g_7) + g_5(g_2 + g_8) + g_6(g_3 + g_9) , \\
 Q_1 &= h_4(h_1 + h_7) + h_5(h_2 + h_8) + h_6(h_3 + h_9) , \\
 R_1 &= i_4(i_1 + i_7) + i_5(i_2 + i_8) + i_6(i_3 + i_9) .
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J_2 &= a_1a_2 + a_2a_3 + a_4a_5 + a_5a_6 + a_7a_8+a_8a_9 , \\
 K_2 &= b_1b_2 + b_2b_3 + b_4b_5 + b_5b_6 + b_7b_8+b_8b_9 , \\
 L_2 &= c_1c_2 + c_2c_3 + c_4c_5 + c_5c_6 + c_7c_8+c_8c_9 , \\
 M_2 &= d_1d_2 + d_2d_3 + d_4d_5 + d_5d_6 + d_7d_8+d_8d_9 , \\
 N_2 &= e_1e_2 + e_2e_3 + e_4e_5 + e_5e_6 + e_7e_8+e_8e_9 , \quad (\text{IV. 28}) \\
 O_2 &= f_1f_2 + f_2f_3 + f_4f_5 + f_5f_6 + f_7f_8+f_8f_9 , \\
 P_2 &= g_1g_2 + g_2g_3 + g_4g_5 + g_5g_6 + g_7g_8+g_8g_9 , \\
 Q_2 &= h_1h_2 + h_2h_3 + h_4h_5 + h_5h_6 + h_7h_8+h_8h_9 , \\
 R_2 &= i_1i_2 + i_2i_3 + i_4i_5 + i_5i_6 + i_7i_8+i_8i_9 .
 \end{aligned}$$

Ils sont obtenus à partir des vecteurs propres de composants $(a_k, b_k, c_k, d_k, e_k, f_k, g_k, h_k, i_k)$, $k = 1 \dots 9$, correspondants aux valeurs propres λ_k , $k = 1 \dots 9$, de l'Hamiltonien H_0^i .

III. Résultats et discussion :

Bien que la théorie et les équations établis soient valables à la fois pour deux et trois dimensions, nous nous concentrons notre intérêt sur les résultats et les diagrammes de phase pour le cas bidimensionnelle infinie.

Pour de faibles j_4 , $j_4 = 1$, les diagrammes de phase obtenus par le champ moyen sont représentés sur les figures (IV, 1), (IV, 2) et (IV, 3). Nous avons seulement deux phases: une phase paramagnétique P et une ferromagnétique F , ces deux phases sont séparées par une ligne critique et une transition du premier ordre (figure (IV, 4) et figure (IV, 5))

.

Chapitre IV : L'approximation du champ moyen et le modèle d'Ashkin-Teller à spin1 sous champ transverse.

Quand j_4 augmente, $j_4 = 4$, différentes phases apparaissent dans les figures (IV, 6), (IV, 7) et (IV, 8) sont: la phase paramagnétique, ferromagnétique, PO_1 (figure (IV, 10)) et PO_2 (figure (IV, 9)).

Pour des valeurs déterminées du champ transverse Ω , ce modèle présente les six diagrammes de phase en fonction du coefficient $J_1/J_2 = 1$ et des valeurs spécifiques de la température T et du champ cristallin D .

Les figures illustrent que la phase ferromagnétique disparaît sous l'effet d'augmenter le champ transversal dans la région des basses températures T ou le champ cristallin D est élevé. On constate que l'effet de champ transversal croissant ne change pas non plus de l'ordre des transitions ni la nature des points multicritiques. En effet, pour des valeurs petites de Ω , le diagramme de phase est semblable à celui obtenu dans $\Omega = 0$ [70].

Dans la figure (IV, 3), les deux phases P et F sont séparées par une ligne de transition du second ordre. On constate aussi l'absence de la phase PO_2 dans la figure (IV, 8).

Le système se stabilise à la phase paramagnétique.

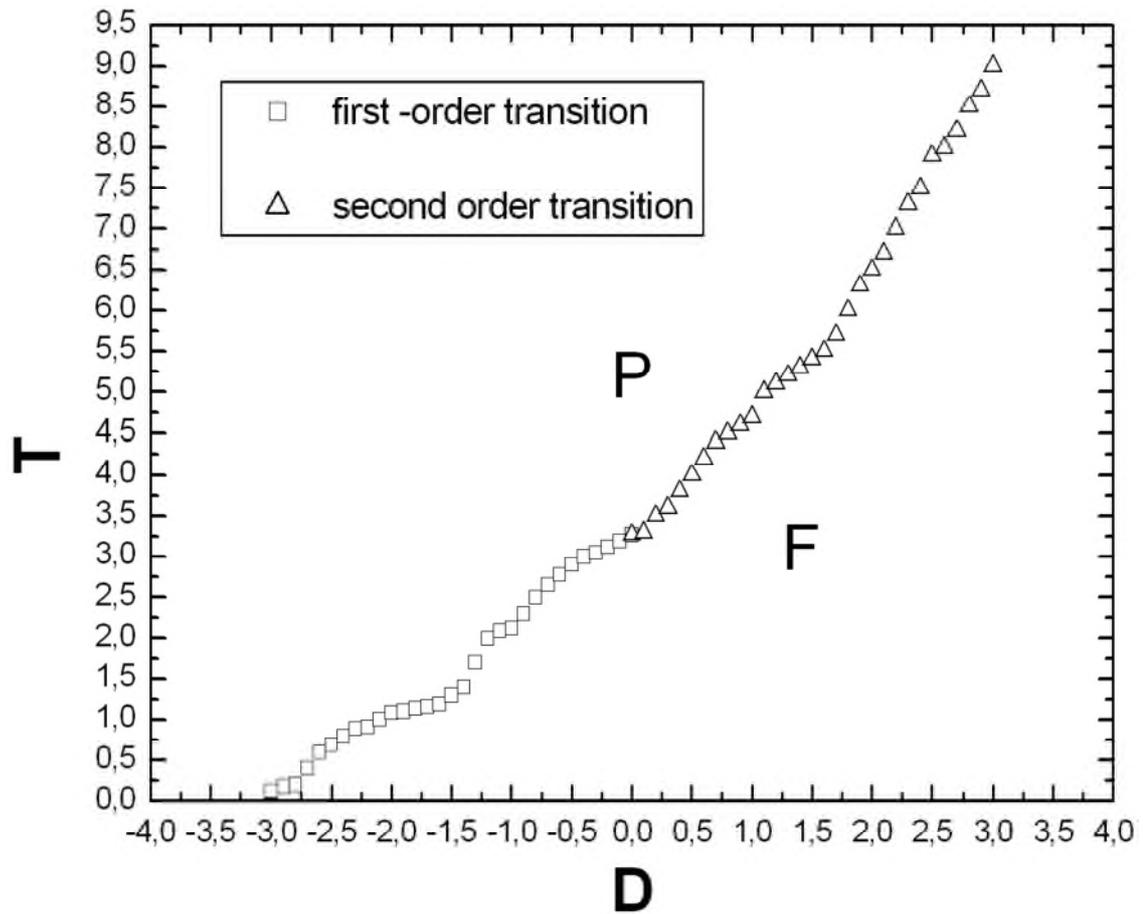


Figure (IV, 1)- Diagramme de phase dans le plan (D, T) pour $J_4 = 1$, $\Omega = 1$ et $J_1/J_2 = 1$ par la méthode du champ moyen. Ou les carrés montrent que la transition entre les deux phases paramagnétique et ferromagnétique est du premier ordre, tandis que les triangles montrent que la transition est du second ordre.

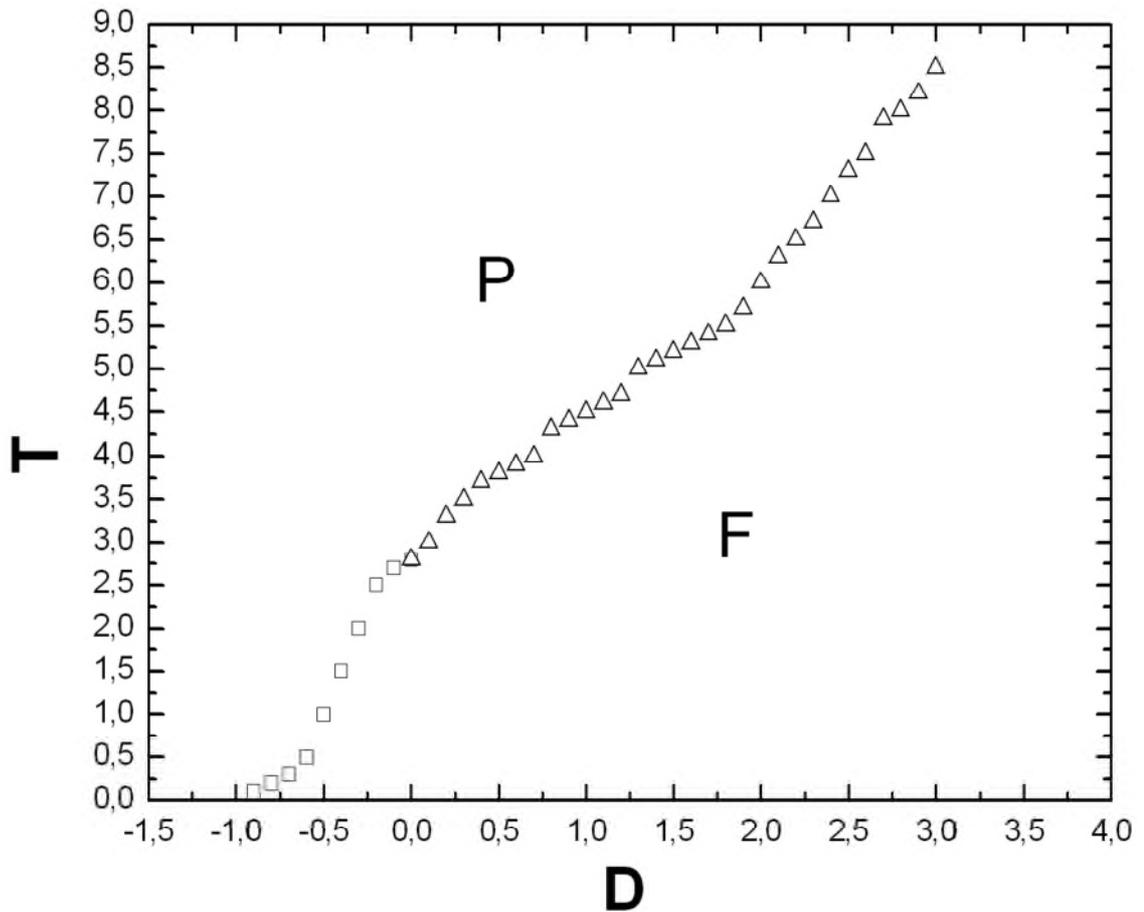


Figure (IV, 2)- Diagramme de phase dans le plan (D, T) pour $J_4 = 1$, $\Omega = 3$ et $J_1/J_2 = 1$ par la méthode du champ moyen. Ou les carrés montrent que la transition entre les deux phases paramagnétique et ferromagnétique est du premier ordre, tandis que les triangles montrent que la transition est du second ordre.

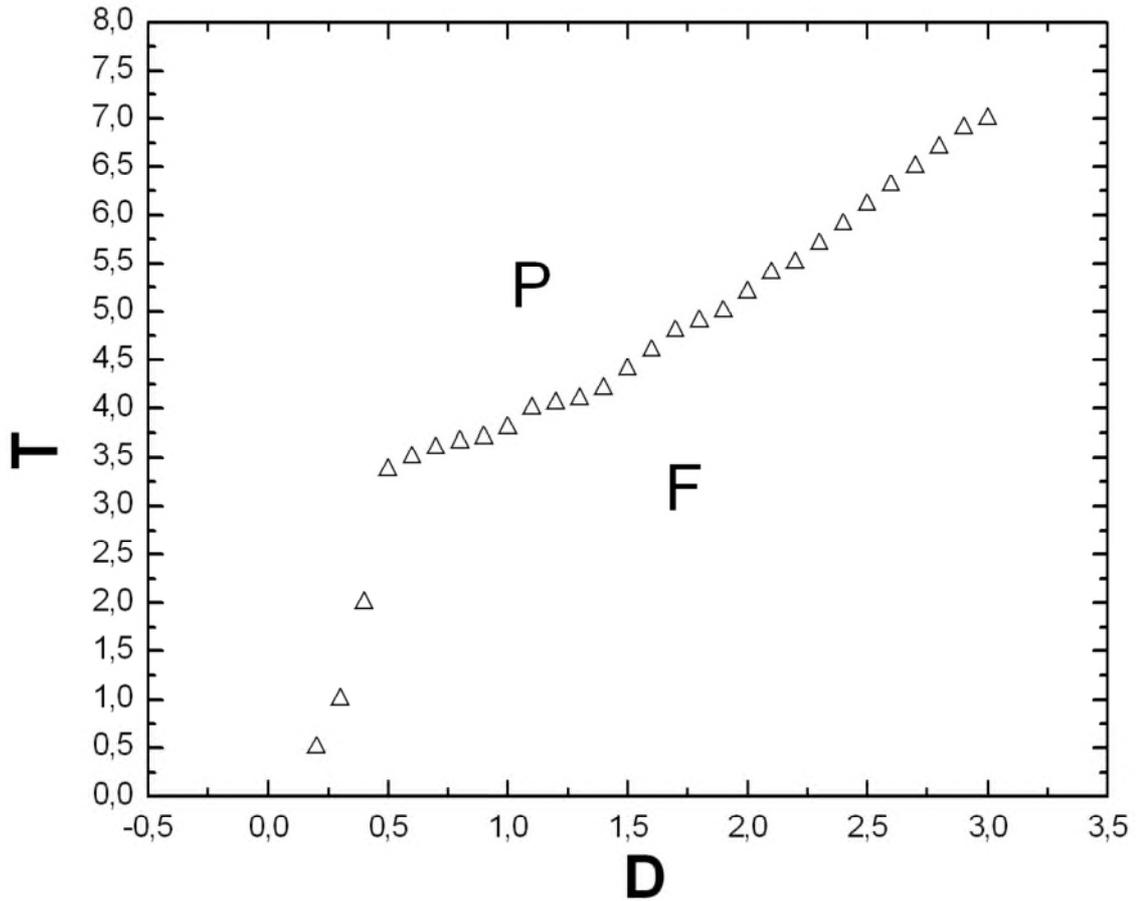


Figure (IV, 3)- Diagramme de phase dans le plan (D, T) pour $J_4 = 1$, $\Omega = 5$ et $J_1/J_2 = 1$ par la méthode du champ moyen. La transition entre les deux phases paramagnétique et ferromagnétique est du second ordre.

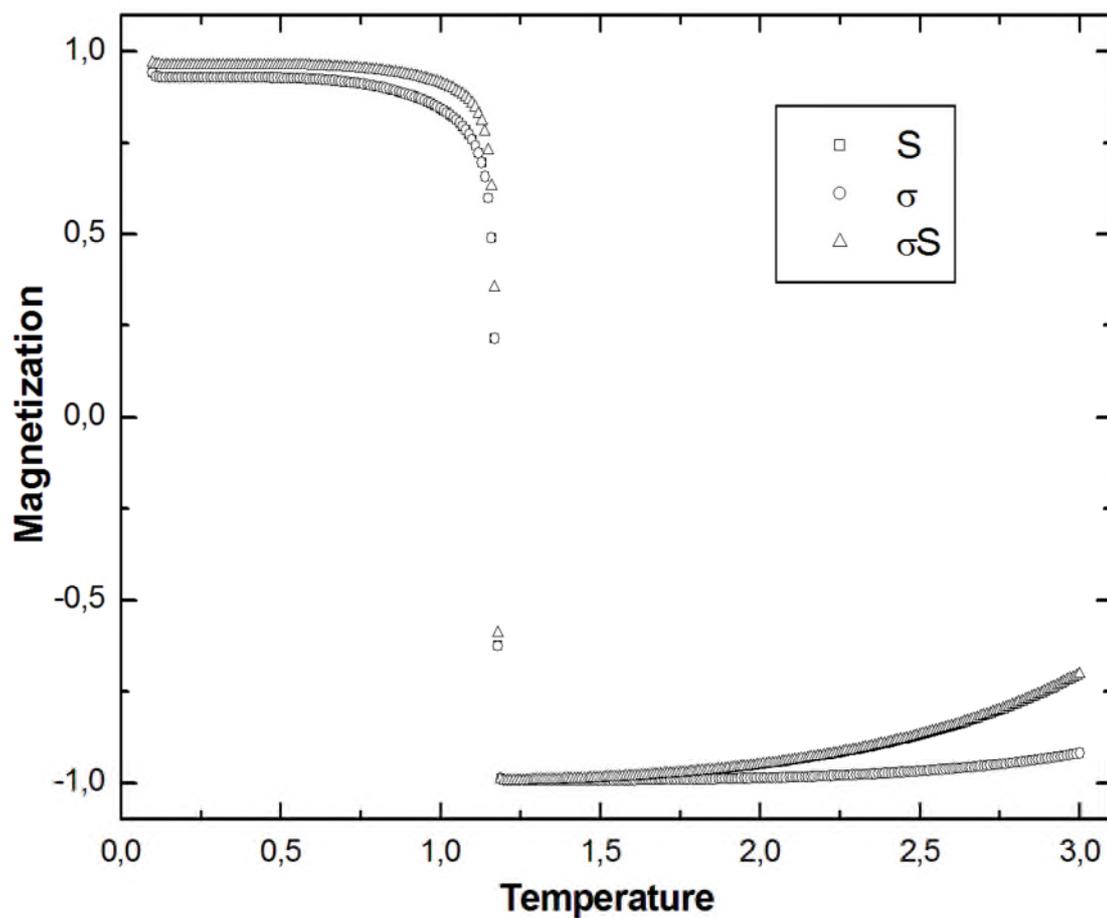


Figure (IV, 4)- Les aimantations en fonction de la température T pour $J_4 = 1$, $\Omega = 1$, $D = -1$ et $J_1/J_2 = 1$, donc la transition est du premier ordre.

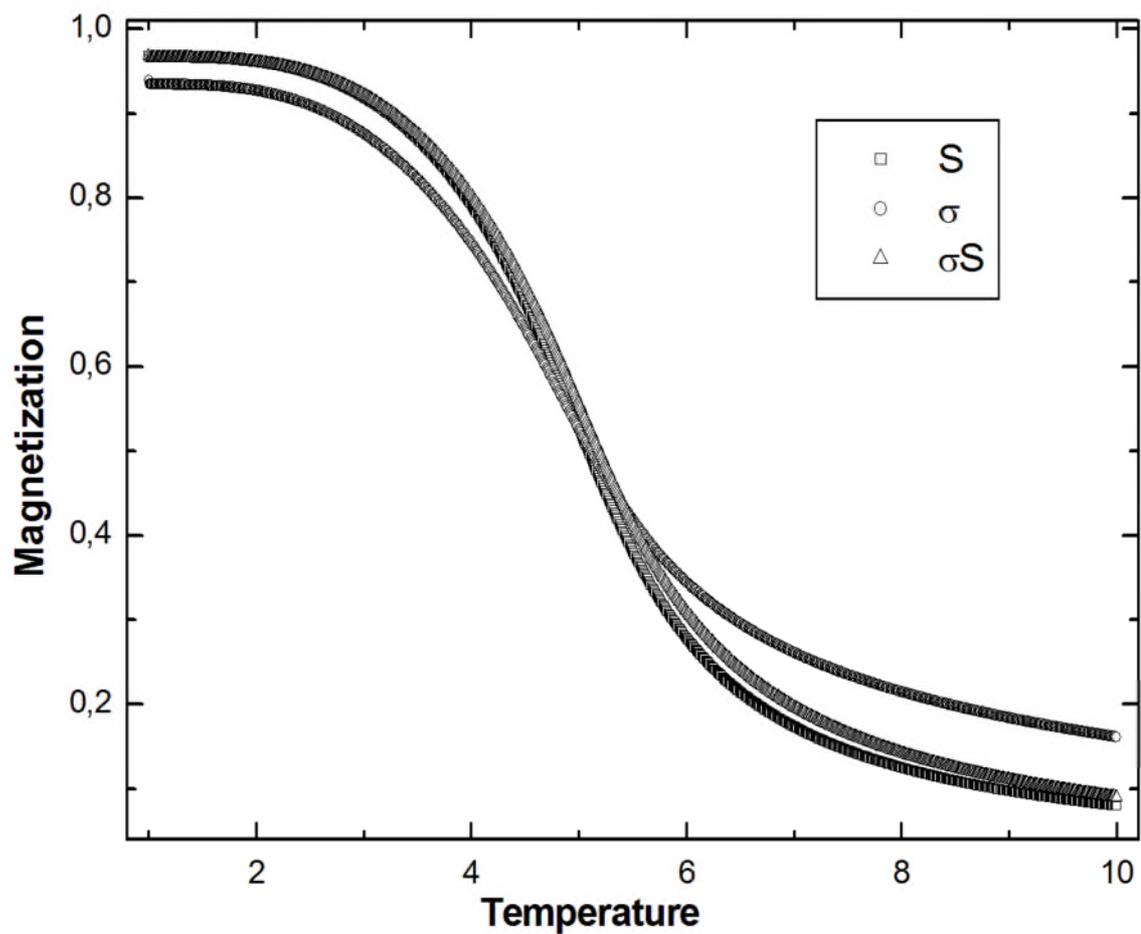


Figure (IV, 5)- Les aimantations en fonction de la température T pour $J_4 = 1$, $\Omega = 3$, $D = 2$ et $J_1/J_2 = 1$, donc la transition est du second ordre.

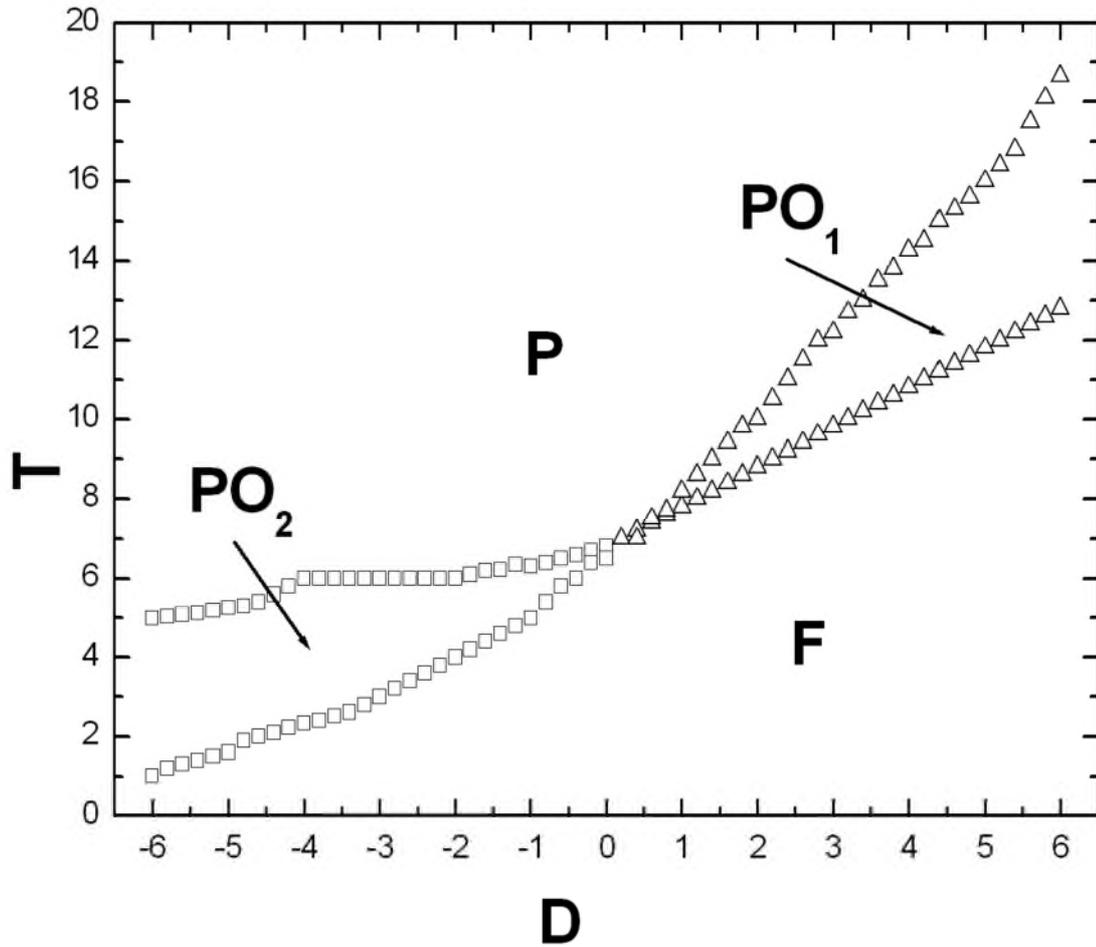


Figure (IV, 6)- Diagramme de phase dans le plan (D, T) pour $J_4 = 4$, $\Omega = 1$ et $J_1/J_2 = 1$ par la méthode du champ moyen. Ou les carrés montrent la transition du premier ordre et les triangles montrent la transition du second ordre en remarquant quatre phases : paramagnétique, ferromagnétique, PO_1 et PO_2 .

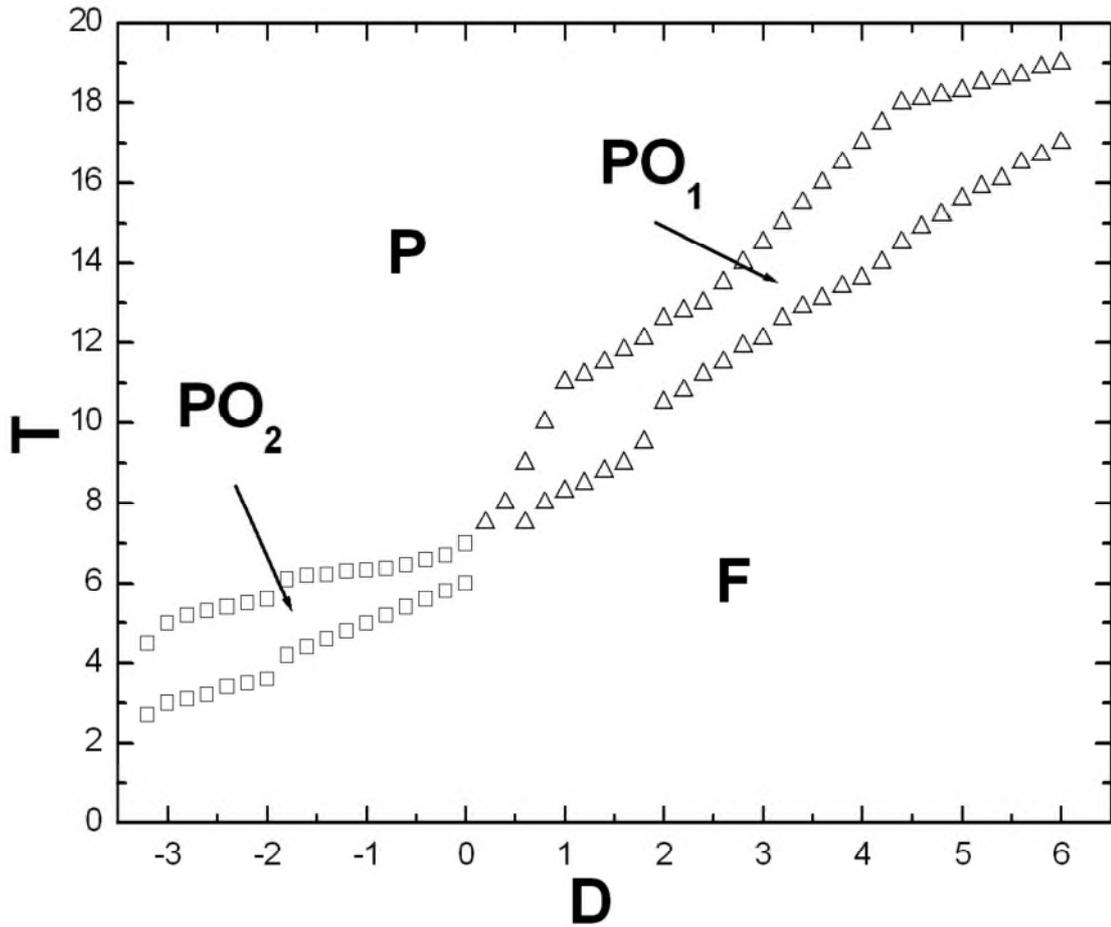


Figure (IV, 7)- Diagramme de phase dans le plan (D, T) pour $J_4 = 4$, $\Omega = 4$ et $J_1/J_2 = 1$ par la méthode du champ moyen. Ou les carrés montrent la transition du premier ordre et les triangles montrent la transition du second ordre en remarquant quatre phases : paramagnétique, ferromagnétique, PO_1 et PO_2 .

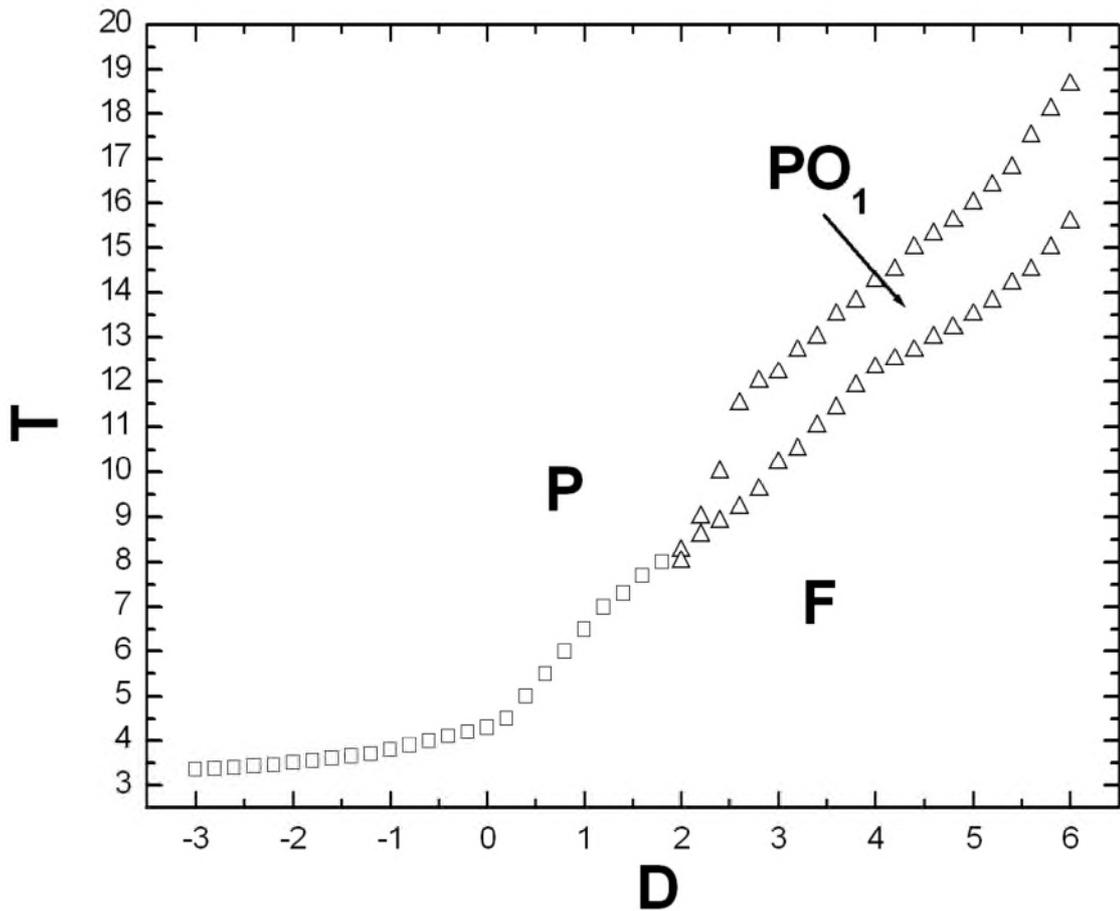


Figure (IV, 8)- Diagramme de phase dans le plan (D, T) pour $J_4 = 4$, $\Omega = 7$ et $J_1/J_2 = 1$ par la méthode du champ moyen. Ou les carrés montrent la transition du premier ordre et les triangles montrent la transition du second ordre en remarquant que trois phases : paramagnétique, ferromagnétique et la phase PO_1 .

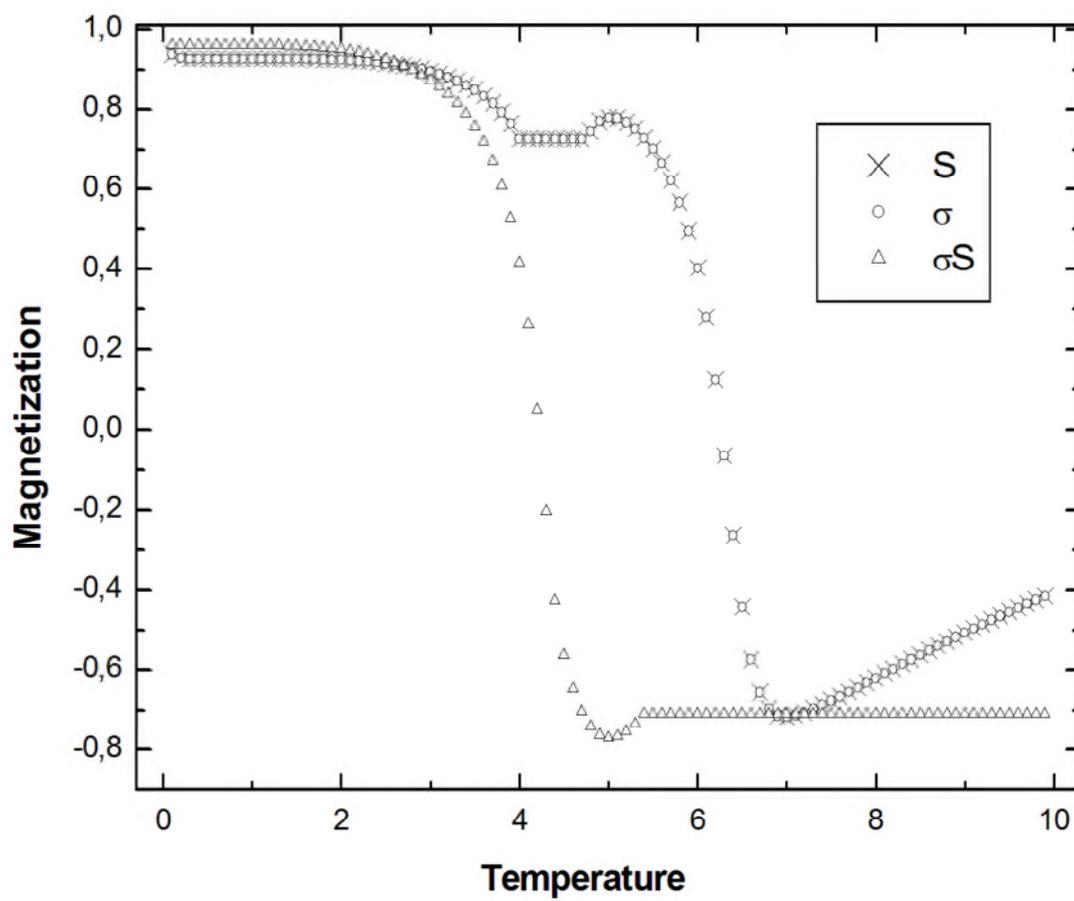


Figure (IV, 9)- Les aimantations en fonction de la température T pour $J_4 = 4$, $\Omega = 4$, $D = -1$ et $J_1/J_2 = 1$, existence de la phase PO_2 .

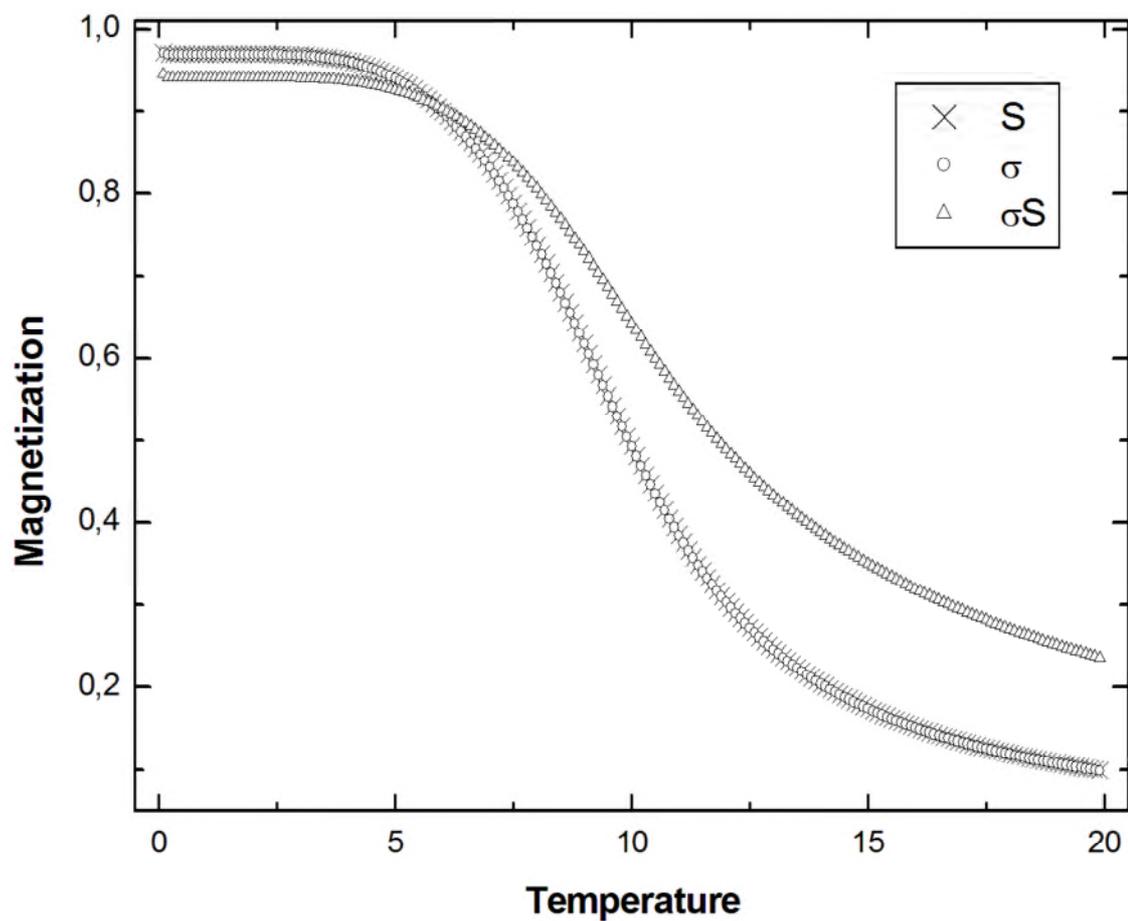


Figure (IV, 10)- Les aimantations en fonction de la température T pour $J_4 = 4$, $\Omega = 7$, $D = 5$ et $J_1/J_2 = 1$, existence de la phase PO_1 .

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

Dans cette thèse nous avons passé en revue l'origine du magnétisme ainsi que les différents comportements des matériaux magnétiques en fonction des paramètres extérieurs tels que la température et le champ magnétique. En d'autres mots, les matériaux magnétiques changent d'état en fonction de ces paramètres extérieurs, ils subissent donc des transitions de phase. C'est pourquoi, nous avons présenté les différentes sortes de transition selon Ehrenfest et Landau. Landau a introduit la notion de paramètre d'ordre pour classifier les transitions de phase. C'est cette théorie de Landau qui a été utilisée dans notre travail. Comme les transitions de phase se font dans des systèmes complexes qui nécessitent des simulations numériques, nous avons présenté également la méthode de simulation Monte Carlo qui nous a été utile dans nos calculs.

En utilisant des simulations Monte Carlo, nous avons montré que l'isotrope ferromagnétique Ashkin Teller modèle présente une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle S \rangle$ (également trouvé infinitésimale dans la simulation Monte Carlo du modèle Ashkin Teller mixte [77]), ce qui est très clair à des températures élevées, et d'autres phases comme Baxter $3/2$ où tous les spins sont égaux à $3/2$. Dans l'espace des paramètres K_4/K_2 , D/K_2 et T/K_2 les diagrammes sont riches de phases avec des transitions de phase du second ordre, délimitées par des lignes et des points multicritiques.

Dans le dernier chapitre nous avons réalisé le modèle d'Ashkin-Teller de spin 1 sous le champ transverse en utilisant l'approximation du champ moyen. Ces études ont révélé la complexité du modèle avec des structures très riches et donnent une meilleure compréhension des propriétés de la matière condensée, en particulier les propriétés magnétiques des systèmes composés de nombreux atomes des molécules.

Pour les recherches à venir, nous prévoyons d'étudier les propriétés magnétiques du modèle Ashkin-Teller avec des mélanges de spins sur différents types de réseaux. La présence de nombreux atomes avec différents moments magnétiques sur un même site peut révéler quelques propriétés intéressantes. Le modèle sera également analysé en trois dimensions, y compris les champs cristallins et les interactions à longue portée.

Conclusion générale

Comme perspective immédiate de notre travail, nous pensons reprendre le problème sur des tailles plus grande afin de déterminer avec précision les exposants critiques et aux classes d'universalité. Jusqu'à présent, nous avons considéré des interactions de courte portée entre proches voisins. Il serait aussi intéressant de considérer des interactions entre spins seconds voisins pour analyser leurs influences sur les résultats reportés dans ce travail.

Nous trouvons que le modèle d'Ashkin-Teller étudié dans ce travail de thèse est très riche de structures et de caractéristiques. Il présente plusieurs comportements suivant les valeurs des paramètres physiques et par conséquent, c'est un modèle très intéressant pour des études ultérieures.

REFERENCES

BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Nicolas Vandewalle, Stéphane Dorbolo, Introduction à la Physique Statistique, Institut de Physique B5a, Université de Liège, Belgique (2006).
- [2] J. W. Halley, Statistical Mechanics, From First Principles to Macroscopic Phenomena, Cambridge University Press (2007).
- [3] Christian Ngo, Héléne Ngo, Introduction à la Physique Statistique, Eds Dunod (1995).
- [4] Yi Liu, David J. Sellmyer, Daisuke Shindo, HandBook of Advanced Magnetic Materials, Tsinghua University Press (2006).
- [5] C. Kittel, Physique de l'état solide, Eds Dunod, Paris (1998).
- [6] Richard V. Solé, Phase transitions, Princeton-University Press (2011).
- [7] Raymond P. H.Wu, Veng-Cheong Lo and Haitao Huang, J. Appl. Phys.112 (2012) 063924.
- [8] Josiah Willard Gibbs, Elementary Principles in Statistical Mechanics, New York, Charles Scribner's Sons (1902).
- [9] Fundamentals of statistical and thermal physics, New York, Mc Graw Hill (1965).
- [10] Bernard Diu, Claudine Guthmann, Danielle Lederer et Bernard Roulet, Éléments de physique statistique (1996).
- [11] Lev Landau et Evguéni Lifchitz, Physique théorique, tome 5 : Physique statistique (1984).
- [12] Claude Itzykson, Jean-Michel Droué, Théorie statistique des champs 2, Edition du CNRS (1989).
- [13] Atkins, Elements of physical chemistry, New York, Freeman and company (1994).
- [14] E. T. Jaynes, Physical Review, 106 (1957) 620-630.
- [15] I. Herbut, A modern Approach to Critical phenomena, Cambridge University Press (2007).
- [16] D. J. Amit, Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena, World Scientific Publishing, (1984).

- [17] Georg R. Schreiber, Thèse de doctorat de l'Université Paris XI ORSAY, (1997).
- [18] N. Goldenfeld, Lecture on Phase Transitions and the Renormalization Group University of Illinois at Urbana-Champaign (1992).
- [19] H. T. Diep, Physique de la matière condensée, Dunod éditions (2003).
- [20] J. Clark, M. L. Ristig, Theory of Spin Lattices and lattice Gauge models, Springer-Verlag, Berlin (1997).
- [21] M. De Graef and Y. Zhu, Magnetic imaging and its applications to materials, Academic Press, New-york (2001).
- [22] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials (Cambridge-University Press, 2009).
- [23] P. F. Edward, Permanent Magnet and Electromechanical Devices: Materials, Analysis and Applications, Academic Press (2001).
- [24] A. Aharoni, Introduction to the Theory of Ferromagnetism, 2nd Ed. Oxford University Press (1996).
- [25] Tipler, Paul Physics for Scientists and Engineers: Electricity, Magnetism, Light, and Elementary Modern Physics (2004).
- [26] M. Getzla, Fundamentals of Magnetism, Springer-Verlag, Berlin (2008).
- [27] Daniel C. Mattis, The Theory of Magnetism II, Springer-Verlag, Berlin (1985).
- [28] Robert M. White, Quantum Theory of Magnetism, 3ème Ed, Carnegi Mello University (1970).
- [29] Carl L. Nave, Magnetic Properties of Solids, HyperPhysics (2008).
- [30] Michel Héritier, Physique de la matière condensée : des atomes froids aux supraconducteurs à haute température critique (2015).
- [31] José-Philippe Pérez, Robert Carles et Robert Fleckinger, Électromagnétisme fondements et applications, Liège, Dunod (2001).
- [32] José-Philippe Pérez, Robert Carles et Robert Fleckinger, Électromagnétisme Vide et milieux matériels, Paris, Masson (1990).
- [33] L. P. Lévy, Magnétisme et Supraconductivité, EDP Sciences (2000).
- [34] Louis Néel, Influence des fluctuations des champs moléculaires sur les propriétés magnétiques des corps, Université de Strasbourg (thèse de doctorat ès Sciences Physiques), Strasbourg (1932).
- [35] S. Vaclair, Eléments de Physique Statistique, InterEdition, Paris Hermann(1984).

- [36] P. Papon, J. Leblond et H. E. P. Meijer, Physique des transitions de phase: Concepts et applications, Ed. Dunod (1999).
- [37] A. K. Hartmann and M. Weigt, Phase Transitions in Combinatorial Optimization Problems, Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA (2005).
- [38] O. G. Mouritsen, Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena, Springer-Verlag, Berlin (1984).
- [39] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions, Oxford University Press, New York (1992).
- [40] Dictionnaire de Physique expérimentale, Quaranta - Tome II - Thermodynamique et applications, Pierron (1997).
- [41] Paul & Tatiana Ehrenfest, The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics, Dover, (1990).
- [42] Pierre Papon, Physique des transitions de phases, Dunod (2002).
- [43] M. Fujimoto, The Physics of Structural Phase Transitions, 2nd Ed, Springer, New-York (2005).
- [44] Malte Henkel, Heye Hinrichsen, Sven Lubeck, Non-equilibrium phase transitions, Springer (2008).
- [45] N. Boccara, La phys, des trans, P. U. F., Ed. 31 (1970) 091.
- [46] N. D. Landau and E. M. Lifshitz, Physique statistique (1970).
- [47] H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Oxford University Press, Oxford and New York (1971).
- [48] D. P. Landau, Shan-Ho Tsai, M. Exler, Am. J. Phys. 72 (2004) 1294.
- [49] N. Boccara, Symétrie Brisées., Hermann, Paris (1976).
- [50] Christian Ngo and Hélène Ngo, Introduction à la physique statistique, Eds Dunod (1995).
- [51] J. Z. Justin, Transitions de phase et groupe de renormalisation, EDP Sciences/ CNRS Editions, Paris (2005).
- [52] I. Herbut, A modern Approach to Critical phenomena, Cambridge University Press (2007).
- [53] J. Marro, R. Dickman, Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models, Cambridge University Press (1999).

- [54] H. Nishimori and G. Ortiz, *Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press (2011).
- [55] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, New-York (1999).
- [56] Christophe Chipot, *Molecular Dynamics. Observing Matter in Motion : Nanobiotechnology and Nanobiology*, Springer (2009).
- [57] Gerbrand Ceder & Nicola Marzari, *Atomistic Computer Modeling of Materials*, 5107 (Spring 2005).
- [58] K. Binder, *Application of Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Springer-Verlag, Berlin (1984).
- [59] Christian Robert et George Casella, *Monte Carlo Statistical Methods*, Springer-Verlag (2010).
- [60] Christian Robert et George Casella, *Introducing Monte Carlo Methods with R*, Springer-Verlag (2007).
- [61] D. I. Uzunov, *Introduction to the Theory Of Critical Phenomena*, The Bulgarian Academy of Sciences (1992).
- [62] D. Landau et K. Binder, *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press (2009).
- [63] J. Marrot, P. L. Garridoit, A. Labarta et R. Torall, *J. Phys.: Condens. Matter* 1 (1989) 8147-8154.
- [64] M. Badehdah, S. Bekhechi, A. Benyoussef, M. Touzani, *Physica B* 291 (2000) 394.
- [65] Y. Kawazoe, T. Kondow, K. Ohno, *Clusters and Nanomaterials, Theory and Experiment*, Spriger (2001).
- [66] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation From Algorithm to Applications*, AP (2002).
- [67] D. P. Landau, *Phys Rev B* 13 (1976) 2997.
- [68] M. S. Shell 2009, *Coarse graining and multiscale technique* (2012).
- [69] S. Bekhechi and A. Benyoussef, *Phys. Rev. B* 56 (1997) 13954.
- [70] M. Badehdah, S. Bekhechi, A. Benyoussef and B. Ettaki, *Phy Rev B* 59 (1999).
- [71] J. Ashkin and E. Teller, *Phys. Rev.*, 64 (1943) 178.
- [72] J. B. Kogut, *Reviews of modern physics*, 51 (1979) 659-713.
- [73] F. C. S. Barreto, *Braz J Phys.*, 41 (2013) 43.

- [74] P. Bak, P. Kleban, W. N. Unertel, J. Ochab, G. Akinci, N. C. Barlet, and T. L. Einstein, *Phys. Rev. Lett.*, 54 (1985) 1542.
- [75] G. M. Zhang, C. Z. Yang, *Phys. Rev. B.*, 48 (1993) 9452.
- [76] R.V. Ditzian, J.R. Banavar, G.S. Grest, L.P. Kadano, *Phys. Rev. B.*, 22 (1980) 2542.
- [77] S. Bekhechi, A. Benyoussef, A. Elkenz, B. Ettaki, and M. Loulidi, *Eur. Phys. J. B*, 18 (2000) 278.
- [78] S. Bekhechi, A. Benyoussef, A. Elkenz, B. Ettaki, M. Loulidi, *Physica A* 264 (1999) 503.
- [79] A. Bakchich, S. Bekhechi and A. Benyoussef, *Physica A*, 210 (1994) 415-423.
- [80] Gould Harvey, *Tobochnik Jan, An Introduction to Computer Simulation Methods* (1988).
- [81] R.V. Ditzian, *Phys. Lett A.*, 38 (1972) 451.
- [82] F.J. Wegner, *J. Phys. C.*, 5 (1972) L131 .
- [83] S. Wiesman, E. Domany, *Phys Rev. E.*, 48 (1993) 4080.
- [84] M. Loulidi, *Phys. Rev. B.*, 55 (1997) 611.
- [85] J. R. Banavar, D. Jasnow, D.P. Landau, *Phys. Rev. B.*, 20 (1979) 3820.
- [86] H. J. F. Knops, *J. Phys. A.*, 8(1975) 1508.
- [87] J. A. Plascak, F.C. Sa Barreto, *J. Phys. A.*, 19 (1986) 2195.
- [88] S. Bekhechi, *Théorie tricritique : Etude du phénomène de microémulsion et du modèle antiferromagnétique de BC à spin $3/2$ en présence d'un champ magnétique*, Thèse pour l'obtention du diplôme d'études supérieures de 3^{ème} cycle, Université Mohammed V, Rabat, MAROC (1996).
- [89] S. Bekhechi, *Contribution numérique à l'étude de quelques modèles sur réseaux et des solutions micellaires*, Thèse pour l'obtention du diplôme du doctorat d'état sciences physiques, Université Mohammed V, Rabat, MAROC (1999).
- [90] D. T. HOANG, *Phase transition and spin transport in complex systems : frustrated spin systems, molecular and liquid crystals*, Thèse pour l'obtention du diplôme du doctorat en sciences physiques, University of CERGY, PONTOISE (2012).

- [91] R. A. A. YESSOUFOU, Magnétisme de système de spins mélangés sur des réseaux ordinaires et récursifs, Thèse pour l'obtention du diplôme du doctorat unique, Université d'Abomey-Calavi, BENIN.
- [92] P. NDIZEYE, Le modèle d'Ashkin Teller spin-1 avec des interactions et dynamique compétitives, Thèse pour l'obtention du diplôme du doctorat unique, Université d'Abomey-Calavi, BENIN.
- [93] N. Goldenfeld, Lecture on Phase Transitions and the Renormalization Group, University of Illinois at Urbana-Champaign (1992).
- [94] Y. Velenik, Le modèle d'Ising (2009).
- [95] B. M. McCoy, The connection between statistical mechanics and quantum field theory (1994).
- [96] M. R. Gaberdiel, An Introduction to Conformal Field Theory (1999).
- [97] P. Weiss. J. Phys. Theor. Appl., 1(1907) 6.
- [98] A. Herpin. Journal de Physique Colloques (1971) 32.
- [99] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. 20 (1948).
- [100] P.G. de Gennes, Solid State Commun. 1, 132 (1963).
- [101] A. Benyoussef, H. Ez-Zahraouy, and M. Saber, Physica A 198 (1993) 593.
- [102] A. Benyoussef and H. Ez-Zahraouy, phys. stat. sol. (b) 180 (1993) 503.
- [103] T. Kaneyoshi, E. F. Sarmiento, and I. P. Fittipaldi, phys. stat. sol. (b) 150(1988) 261.
- [104] B. K. Chakrabarti, A. Dutta, and P. Sen, Lectures Notes in Physics, New Series M, Springer- Verlag, Berlin/Heidelberg (1996).

Abstract:

The study of the Ashkin-Teller model (ATM) of spin-3/2 on a cubic lattice is undertaken via Monte Carlo (MC) simulation. The phase diagrams are displayed and discussed in the physical parameter space. Rich physical properties are recovered, namely the second order transition and multicritical points. The phase diagrams have been obtained by varying the strength describing the four spin interaction and the single ion potential. This model shows a new high temperature partially ordered phase, called $\langle S \rangle$ and a new Baxter-3/2 round state which do not exist neither in the spin-1/2 ATM nor in the spin-1 ATM.

Keywords: modelization, Ashkin-Teller, Spin-3/2, Monte-Carlo, phase diagram and Baxter.

Résumé :

L'étude du modèle Ashkin-Teller (ATM) du spin-3/2 sur un réseau cubique est effectuée par la simulation de Monte Carlo (MC). Les diagrammes de phase sont affichés et discutés dans l'espace de paramètres physiques. Des propriétés physiques riches sont récupérées, comme la transition du second ordre et les points multicritiques. Les diagrammes de phase ont été obtenus en faisant varier l'interaction 4spins et le champ cristallin. Ce modèle montre une nouvelle phase partiellement ordonné à haute température, appelé $\langle S \rangle$ et une nouvelle phase Baxter 3/2 qui n'existe pas ni dans l'ATM de spin-1/2, ni dans le spin-1 ATM.

Mots clés: modelisation, modèle d'Ashkin-Teller, Spin-3/2, Monte-Carlo, diagramme de phase et Baxter.

المخلص

دراسة نموذج أشكان تيلر Ashkin-Teller ذو السبين 3/2 في الشبكة المكعبة البسيطة. تمت باستخدام محاكاة مونت كارلو (MC) فتحصلنا على مخططات غنية و متنوعة لتغيرات المراحل بدلالة رابطة الازدواجية والرباعية والحقل البلوري فقمنا بتحليلها و مناقشتها في المعلم الفضائي الفزيائي . تم استخراج الخصائص الفيزيائية الغنية، مثل الانتقال من الدرجة الثانية ونقاط متعددة المراحل... يظهر هذا النموذج مرحلة جديدة في درجات الحرارة المرتفعة $\langle S \rangle$ بالإضافة الى مرحلة باكستر Baxter الجديدة التي لم تكن موجودة لا في محاكاة Ashkin-Teller ذو السبين 1/2 ولا في نموذج Ashkin-Teller ذو السبين 1.

الكلمات الرئيسية: نماذج، نموذج أشكان تيلر Ashkin-Teller ، سبين 3/2، مونت كارلو، منحني، باكستر

