



**UNIVERSITE SULTAN  
MOULAY SLIMANE**  
**Faculté des Sciences et  
Techniques**  
**Béni-Mellal**



*Centre d'Études Doctorales : Sciences et Techniques*  
*Formation Doctorale : Mathématique et Physiques Appliquée*

**THÈSE**

Présentée par

**ZAHIR HASSAN**

Pour l'obtention du grade de  
**DOCTEUR**

*Spécialité : Physique*

*Option : Physique Théorique et Sciences des Matériaux*

---



---

*« Étude théorique de l'influence des paramètres intérieurs sur les systèmes de spins mixtes (1/2, 2) et (3/2, 3). »*

---



---

**Soutenue le Vendredi 03 Mars 2021 à 14h30 devant la commission d'examen :**

Pr. Mohamed SAJIEDDINE	Professeur, Université Sultan Moulay Slimane, ENSA Khouribga, Maroc	Président / Rapporteur
Pr. Rachid MASROUR	Professeur, Université Sidi Mohamed Ben Abdellah, F. S. Dhar El Mehraz Fès, Maroc	Rapporteur
Pr. Hassan CHAIB	Professeur, Université Ibn Zohr, F.P. Ouarzazate, Maroc	Rapporteur
Pr. Mohamed EL BOUZIANI	Professeur, Université Chouaib Doukkali. F. S. El Jadida, Maroc	Examineur
Pr. Mohamed MADANI	Professeur, CRMEF Meknès, Maroc	Examineur
Pr. Khalid SBIAA	Professeur, Université Sultan Moulay Slimane, F. P. Khouribga, Maroc	Codirecteur de Thèse
Pr. Abdellatif HASNAOUI	Professeur, Université Sultan Moulay Slimane, F. P. Khouribga, Maroc	Directeur de Thèse

*Je dédie ce modeste travail et ma profonde gratitude à tous  
celui qui a sacrifié pour m'offrir les conditions propices à ma  
réussite :*

*À l'âme de mon père,*

*À ma mère,*

*À ma chère femme AZIZA,*

*À mes chers enfants : Rania, Mohamed Rida, Roumaïssâa*

*À mes chers frères et sœurs*

*À l'âme de mon cher ami Tarik BAHLAGUI*

## Remerciements

Avant toute chose, je voudrais exprimer mes sincères remerciements à mon professeur **Mohamed EL BOUZIANI** de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de pouvoir terminer cette thèse. Il m'a aidé à faire mes premiers pas dans la recherche. Je le remercie pour m'avoir aidé à obtenir une formation rigide ainsi que pour son encadrement, ses qualités humaines et sa présence dans toutes les phases de la rédaction de ma thèse, de la bibliographie à la relecture de mes différents documents. Nul doute qu'il m'a fait grandement apprécier le monde de la recherche. Encore une fois, je le remercie du fond du cœur pour son soutien !

Ce manuscrit est l'occasion pour moi d'exprimer mes chaleureux remerciements au professeur **Abdellatif HASNAOUI** de l'université Sultan Moulay Slimane, mon directeur de thèse, pour m'avoir fait confiance et m'accepter au sein de son laboratoire « **LS3M** », de m'avoir guidé, encouragé, conseillé, par sa bonne compréhension, sa disponibilité, sa communication et ses précieuses intuitions. Son comportement sincère et exemplaire m'a permis d'apprendre beaucoup de choses dans tous les domaines utiles pour mes travaux académiques, sans oublier les qualités morales et professionnelles qui servent à mon développement personnel, ce qui m'a permis de terminer ma rédaction de thèse dans d'excellentes conditions.

Je suis également heureux de pouvoir exprimer mes chaleureux remerciements et ma gratitude à mon Co-Directeur **Khalid SBIAA**, professeur d'Université Sultan Moulay Slimane, pour la confiance qu'il m'a accordée durant ces trois années. Je le remercie entièrement pour sa disponibilité malgré la distance qui nous séparait, son grand soutien, ses conseils et pour ses précieuses directives. Un grand merci pour le temps qu'il m'a accordé, pour sa disponibilité et sa générosité.

Aux membres du jury,

Je tiens à remercier Monsieur **Mohamed SAJIEDDINE**, directeur de l'ENSA Khouribga, pour l'intérêt qu'elle a porté à mon travail et pour l'honneur qu'elle m'a fait de rapporter ma thèse et présider son jury.

Je suis reconnaissant à **Rachid MASROUR**, professeur d'Université Sidi Mohamed Ben Abdellah Fès et **Hassan CHAIB**, professeur d'Université Ibn Zohr d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse ainsi que de l'attention qu'ils ont consacrée à lire ce manuscrit. Je remercie également, **Mohamed MADANI**,

professeur de CRMEF Meknès pour avoir accepté de participer à ce jury en tant qu'examineur.

Je tiens à remercier les membres du groupe du laboratoire PMC à El Jadida et LS3M à Khouribga, mes ami(e)s ainsi que mes collègues, pour leurs discussions et contributions utiles, pour leur soutien, leurs conseils et leurs encouragements. En particulier : **N. Hachem ; A. Lafhal ; A. El Antari ; R. Aharrouch ; A. Alrajhi ; A. Bendaraa ; A. Khmich ; S. Zouhair ; M. Bourass ; Youness ; Karima ; Hasnae ; Oumaima ; Yahya**. J'aimerais aussi dire merci à tous ceux ou toutes celles qui de près ou de loin ont contribué à la bonne marche de ce projet de thèse.

Enfin je tiens à remercier au plus profond de mon cœur mes parents, mes frères et sœurs, ma femme et mes enfants auxquels je dédie totalement ce travail et leur exprime ma plus sincère reconnaissance. J'espère qu'ils trouveront dans l'aboutissement de cette thèse un objet de satisfaction et de fierté après leur soutien matériel et moral permanent à mon égard durant toutes mes années d'études.

## Résumé

Dans cette thèse, deux systèmes d'Ising à spins mixtes différents  $(1/2, 2)$  et  $(3/2, 3)$  sont étudiés en utilisant des méthodes familières de la physique statistique d'équilibre : la théorie du groupe de renormalisation de Migdal-Kadanoff (GRMK), la théorie du champ moyen (MFT) et la méthode de simulation numérique de Monte-Carlo (MCS).

Tout d'abord, les propriétés magnétiques d'un système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes  $\sigma = 1/2$  et  $S = 2$  sur un réseau carré sous l'effet d'un champ cristallin aléatoire sont étudiées par (MFT). L'état fondamental du système est déterminé et la magnétisation totale est tracée en fonction des paramètres du modèle. Différents comportements pour la dépendance thermique de l'aimantation sont mis en évidence avec un ou deux points de compensation et de nombreux types de diagrammes de phase avec des lignes de premier et second ordre ainsi que des points critiques isolés et tricritiques.

Dans la seconde étude, nous avons examiné le même système des spins mixtes dans le cadre de (GRMK). On obtient d'abord les diagrammes de phase à l'état fondamental du système à basse température sur le plan  $(J/\Delta, C/\Delta)$  pour  $d = 2$  et  $d = 3$ . Une analyse détaillée des points fixes est donnée et nous avons présenté des diagrammes de phases ( $T > 0K$ ) pour le modèle dans les plans  $(J, \Delta)$ . Enfin, les points critiques et l'existence des points tricritiques et du phénomène de réentrance sont examinés en traçant l'énergie libre et ses dérivées.

Dans la troisième étude, nous avons réalisé (MCS) de ce dernier système des spins mixtes sur un réseau en nid d'abeilles (honeycomb). Nous avons étudié la variation thermique des magnétisations en fonction du champ cristallin  $\Delta$ . De plus, le diagramme de phases est tracé dans le plan  $(\Delta, T)$  qui montre des lignes de transitions de phases de second ordre sans aucun point de compensation.

Enfin, nous avons étendu ces études au système des spins mixtes  $(3, 3/2)$  par (MFT) sur un réseau carré. Nous présentons les expressions de l'aimantation et de l'énergie libre avec différentes anisotropies monoioniques  $(\Delta_\sigma, \Delta_S)$ , les diagrammes de phase de l'état fondamental sont déterminés ainsi que les variations thermiques des aimantations des sous-réseaux et le diagramme de phases à température finie. Ce système donne un point tricritique, une partie réentrante et la possibilité de plusieurs températures de compensation.

**Mots clés** : Spins mixtes - Transition de phases - Champ moyen - Monte Carlo – Renormalisation - Diagramme de phases - compensation - tricritique - Ising - Blume Capel.

# Table des matières

---

Introduction générale.....	8
Références .....	15
<b><i>Chapitre 1 : Généralités sur les systèmes magnétiques, transitions de phase, modèles et méthodes .....</i></b>	<b><i>17</i></b>
1 Introduction.....	18
2 Quelques notions sur le magnétisme.....	18
2.1 Le magnétisme.....	18
2.2 Les différents comportements magnétiques de la matière.....	20
3 Interaction d'échange-Champ cristallin.....	22
3.1 Interaction d'échange .....	22
3.2 Champ cristallin.....	23
4 La géométrie des réseaux.....	24
5 Les modèles de spin dans la physique statistique .....	27
5.1 Modèle d'Heisenberg .....	28
5.2 Modèle d'Ising.....	28
5.3 Modèle de Potts .....	29
5.4 Modèle de Blume-Campbell.....	30
5.5 Modèle de Blume-Emery-Griffiths .....	31
5.6 Modèle d'Hubbard.....	31
5.7 Modèle de $t$ - $J$ .....	32
6 Transition de phase, phénomènes critiques .....	33
6.1 Transition de phase.....	33
6.2 Phénomènes critiques.....	35
6.2.1 Comportement critique.....	35
6.2.2 Exposants critiques et universalité .....	37
7 Les méthodes de la physique statistique .....	38
7.1 Méthodes approximatives.....	38
7.1.1 Approximation du champ moyen.....	38
7.1.2 Méthode variationnelle hamiltonien d'essai et inégalité de Bogoliubov .....	41
7.2 Le groupe de renormalisation dans l'espace réel (GR) .....	42
7.2.1 Définition de GR dans l'espace réel.....	42
7.2.2 Equation du GR dans l'espace des paramètres de l'Hamiltonien .....	44
7.2.3 Points fixes et linéarisation de la transformation du groupe de renormalisation.....	46
7.2.4 Champs pertinents et non pertinents .....	49
7.2.5 Les lois de similarité .....	52
7.2.6 Quelques méthodes de renormalisation dans l'espace réel .....	54
7.2.6.1 La renormalisation par décimation .....	54
7.2.6.2 La renormalisation variationnelle .....	55
7.2.6.3 La renormalisation de Migdal-Kadanoff.....	56
7.3 Simulation de Monte-Carlo .....	58
7.3.1 Echantillonnage Simple.....	59
7.3.2 Echantillonnage par Importance.....	59
7.3.3 Méthode de Metropolis .....	60
Références .....	62
<b><i>Chapitre 2 : Effets du champ cristallin aléatoire sur un système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (<math>1/2</math> ; <math>2</math>).....</i></b>	<b><i>64</i></b>

1	Introduction.....	65
2	Modèle et théorie .....	66
3	Résultats et discussion .....	68
3.1	L'état fondamental du système ( $T = 0K$ ) .....	68
3.2	Diagrammes de phase à la température finie ( $T > 0K$ ).....	69
3.3	Propriétés magnétiques.....	77
3.3.1	La variation thermique de la magnétisation .....	77
3.3.2	La dépendance de la magnétisation en fonction du champ cristallin, $t$ et $\alpha$ sont fixes.....	80
3.3.3	La dépendance de l'aimantation en fonction de $\alpha$ , avec $t$ et $d$ sont fixées.....	82
4	Conclusion .....	83
	Références .....	85
	<b><i>Chapitre 3 : Groupe de renormalisation de Migdal-Kadanoff appliqué au modèle mixte de spin-<math>\frac{1}{2}</math> et de spin-2 .....</i></b>	<b>88</b>
1	Introduction.....	89
2	Modèle et théorie .....	93
3	Résultats et discussions.....	97
3.1	Points fixes et diagrammes de phases.....	97
3.2	État fondamental.....	102
3.2.1	Le cas bidimensionnel.....	102
3.2.2	Le cas tridimensionnel .....	103
3.3	Énergie libre et entropie .....	104
4	Conclusion .....	106
	Références .....	107
	<b><i>Chapitre 4 : Etude du système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (1/2, 2) sur un réseau en nid d'abeille par la simulation de Monte Carlo.....</i></b>	<b>110</b>
1	Introduction.....	111
2	Modèle et simulation de Monte Carlo.....	112
3	Résultats et discussion .....	115
3.1	Le diagramme de phases de l'état fondamental.....	115
3.2	Résultats de Monte Carlo .....	118
4	Conclusion .....	127
	Références .....	128
	<b><i>Chapitre 5 : Etude théorique d'un système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (3/2 ; 3) par l'approximation du champ moyen .....</i></b>	<b>130</b>
1	Introduction.....	131
2	Modèle et théorie .....	133
3	Résultats et discussion .....	136
3.1	L'état fondamental du système .....	136
3.2	Propriétés magnétiques.....	139
3.3	Les diagrammes de phase à température finie ( $t > 0$ ).....	147
4	Conclusions.....	149
	Références .....	150
	Conclusion générale .....	152
	Annexe A.....	156
	Annexe B.....	157

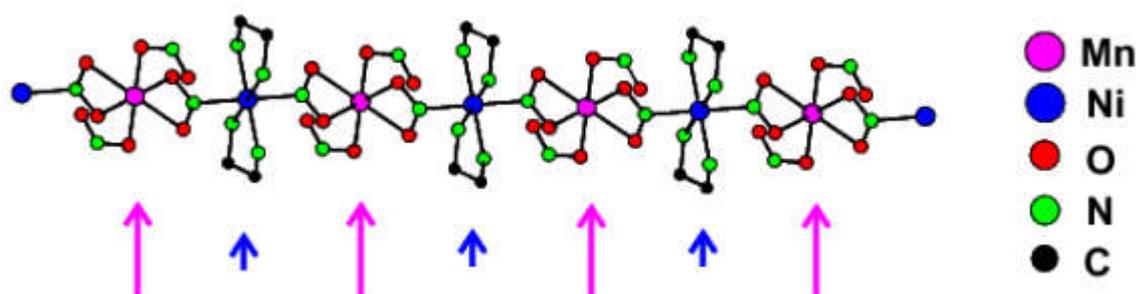
---

## Introduction générale

---

Au cours des dernières décennies, la recherche expérimentale et théorique sur les composés ferrimagnétiques a suscité un vif intérêt en raison de leurs vastes applications potentielles dans des matériaux d'importance technologiques telles que l'enregistrement magnéto-optique à haute densité [1, 2]. Aussi, leurs applications dans le développement des technologies de l'information et de la communication sont devenues largement utilisées.

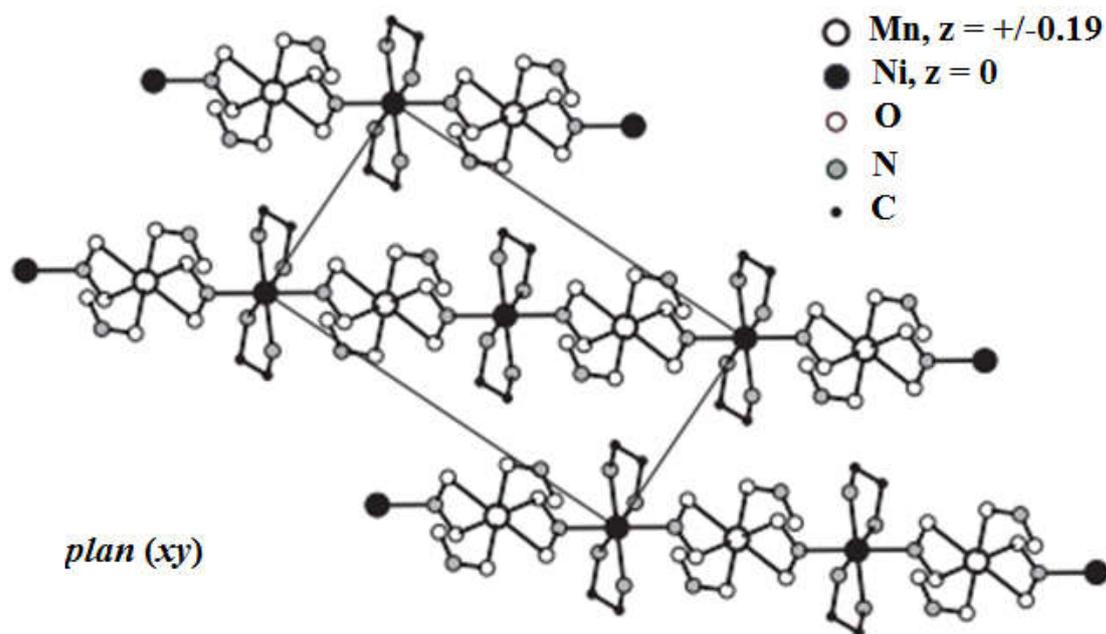
Partout dans le monde, il existe de nombreux laboratoires de science des matériaux qui concentrent leurs efforts sur la découverte et le développement de matériaux magnétiques nouveaux et améliorés. La plus célèbre traitait une approche à l'étude pour de nouveaux aimants basés sur des molécules en tant que blocs de construction. Les aimants de base moléculaire présentent plusieurs attributs et propriétés qui ne sont pas disponibles dans les aimants conventionnels métalliques / intermétalliques et oxydes de métaux. La dernière décennie a vu la découverte de plusieurs familles d'aimants moléculaires [3]. Les matériaux magnétiques moléculaires ont été étudiés de manière approfondie car la conception de leurs propriétés est plus facile que celle des matériaux magnétiques classiques tels que les alliages métalliques et les oxydes métalliques [4].



**Figure 0.1** : Un segment de chaîne de la structure de  $\text{MnNi}(\text{NO}_2)_4(\text{en})_2$  montrant l'arrangement alterné des ions  $\text{Mn}$  ( $S_{\text{Mn}} = 5/2$ ) et  $\text{Ni}$  ( $S_{\text{Ni}} = 1$ ). Une description complète de la structure est présentée dans Réf. [8].

Dans ce contexte, les systèmes à spins mixtes ont moins de symétrie de translation que leurs homologues de spins uniques et sont bien adaptés pour étudier ces types des matériaux magnétiques. Il existe plusieurs systèmes à spins mixtes, mais le système mixte des spins le plus simple consiste en deux types de spins  $S_A$  et  $S_B$  composés de deux sous-réseaux magnétiques  $A$  et  $B$  interpénétrants. Les spins  $S_A$  et  $S_B$  sont répartis en alternance sur le réseau avec un couplage d'échange antiferromagnétique entre les plus proches voisins; une

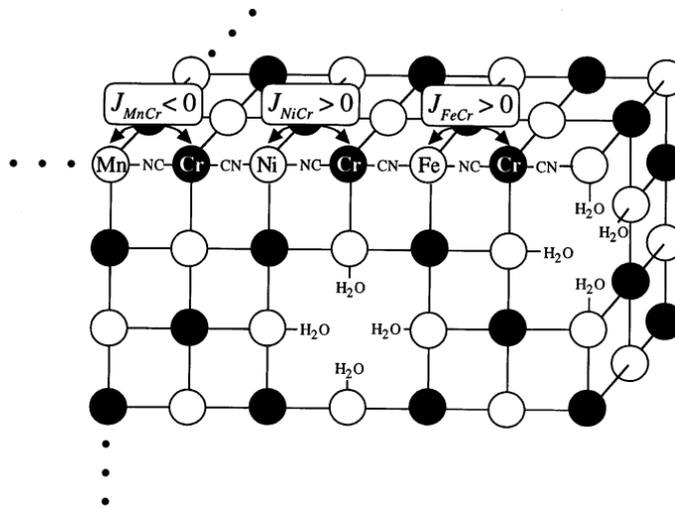
série de tels composés familiaux ont été largement synthétisés par Verdagner, Kahn, et leurs collègues [4]. Les travaux les plus cités sont les chaînes bimétalliques de formule générale  $ACu(pbaOH)(H_2O)_3nH_2O$  avec  $A = Ni, Co, Fe, Mn$ , qui ont les spins mixtes  $(1, 1/2)$ ,  $(3/2, 1/2)$ ,  $(2, 1/2)$  et  $(5/2, 1/2)$ , respectivement [5-6]. Ainsi, les propriétés magnétiques des systèmes mixtes sont très importantes pour l'étude de certains types de ferrimagnétisme, tels que les matériaux magnétiques à base moléculaire, le premier exemple était  $MnNi(EDT)6H_2O$  [4-11] et  $MnNi(NO_2)_4(en)_2$  ( $en$  = éthylènediamine) [7, 8, 11] (figure 0.1, 0.2), rapporté récemment par Kahn et al [5], les composés bimétalliques  $AMn(S_2C_2O_2)_2(H_2O)_{3,4,5}H_2O$  ( $A = Cu, Ni, Pd, Pt$ ) [7, 11] et les complexes purs et dilués  $A_k[B(CN)_6]_l \cdot nH_2O$  (où  $A$  et  $B$  sont des ions de métaux de transition avec différentes valeurs de spin) [12].



**Figure 0.2. :** Une feuille de la structure de  $MnNi(NO_2)_4(en)_2$  montrant les chaînes équidistantes d'ions  $Mn$  et  $Ni$  alternés, s'étendant le long d'une diagonale du plan  $(xy)$ . Dans la deuxième feuille d'atomes, située en  $(z = +1/2)$ , les chaînes  $Mn - Ni$  sur l'autre diagonale  $(xy)$ . Dans la phase magnétiquement ordonnée, tous les moments magnétiques de  $Mn$  et  $Ni$  dans une feuille sont orientés parallèlement les uns aux autres et antiparallèles aux moments des feuilles voisines. L'orientation du moment est perpendiculaire au le plan  $(xy)$  [7].

Les systèmes à spins mixtes avec des interactions ferromagnétiques et ferrimagnétiques [13] ont donné de nombreux résultats, comme la présence de boucles d'hystérésis à décalages multiples, de comportements de compensation et de phénomènes multicritiques, notamment des comportements tricritiques et de réentrance. En fait, les boucles d'hystérésis illustrant la dépendance de la magnétisation au champ magnétique appliqué constituent l'une des caractéristiques les plus importantes des systèmes magnétiques.

Contrairement aux ferromagnétiques, les matériaux ferrimagnétiques ont un point de température particulier auquel la magnétisation résultante disparaît en dessous de la température de transition  $T_C$  (Néel, 1948), en raison de la dépendance thermique de différentes magnétisations du sous-réseau qui composent le réseau principal. Comme ses aimantations de sous-réseau s'annulent exactement, ce point est appelé point de compensation notée par  $T_{comp}$ . Aux températures  $T > T_C$ , l'aimantation du système est proportionnelle au champ magnétique appliqué et disparaît avec lui. Cependant, pour les températures  $T$  tel que  $T < T_C$ , l'aimantation spontanée apparaît en l'absence de toute source externe et s'annule à la température de compensation  $T_{comp}$ . L'apparition de l'aimantation zéro avant la température critique résulte d'une compensation exacte des moments magnétiques des sous-réseaux souvent notés par  $A$  et  $B$ , qui forment le réseau principal à  $T=T_{comp}$ . Cela est dû à la compétition entre les interactions d'échange dans le système et la dépendance thermique des aimants du sous-réseau devient complexe. L'existence d'un tel point de compensation revêt une grande importance technologique car, à ce stade, seule une légère variation du champ est nécessaire pour changer le signe de l'aimantation résultante. Il a été démontré que le champ coercitif est très fort au point de compensation, ce qui favorise la création de petits domaines magnétiques stables [14-17].



**Figure 0.3. :** Illustration schématique de composé mixte ferri-ferromagnétiques  $(Ni_a^{II} Mn_b^{II} Fe_c^{II})_{1,5} [Cr^{III} (Cn)_6] 7.6H_2O$ . Les molécules d'eau zéolithiques dans la cellule unitaire sont omises pour plus de clarté. Les interactions de superéchange ferromagnétique ( $J_{NiCr} > 0$  et  $J_{FeCr} > 0$ ) et antiferromagnétique ( $J_{MnCr} < 0$ ) peuvent coexister sans frustration de spin, car les ions  $A^{II}$  ( $A = Ni, Mn$  ou  $Fe$ ) ( $\circ$ ) et  $Cr^{III}$  ( $\bullet$ ) de la structure du bleu de Prusse sont liés de manière alternée [39].

Dans les appareils d'enregistrement magnéto-optiques, la coercivité est modifiée par le chauffage local du support avec un faisceau focalisé. La dépendance de la coercivité en fonction de la température près du point de compensation peut être appliquée à l'écriture et à

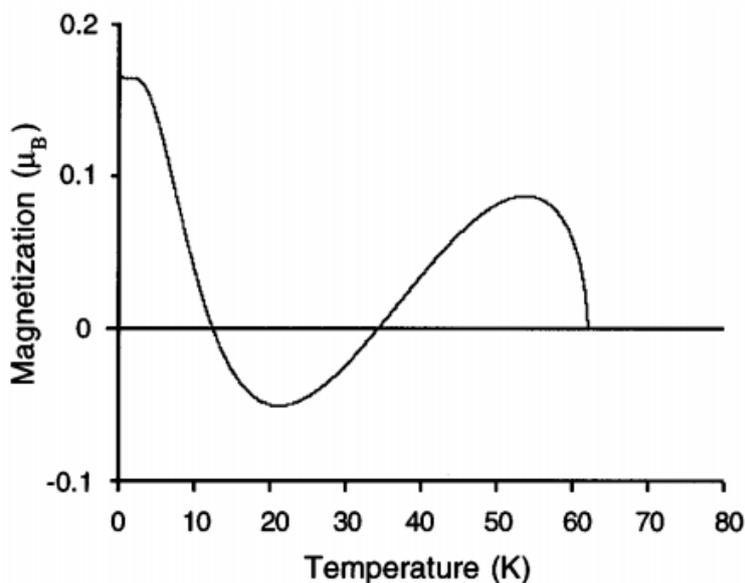
l'effacement sur des supports d'enregistrement magnéto-optiques à haute densité. Ainsi, cette propriété est très utile en enregistrement thermomagnétique. Le phénomène de compensation instable [17] dépend également des valeurs des spins  $S_A$  et  $S_B$ , de la structure du système, du champ magnétique appliqué ainsi que de la valeur de l'anisotropie  $\Delta_z$ . En règle générale, l'aimantation totale peut prendre différents types de formes selon les nomenclatures de Néel, tels que les types Q, R, S, P, N, W, M et X [18-27]. Les types N, W et X sont les cas pour lesquels il existe une, deux et trois températures de compensation, respectivement [25-27].

Diverses méthodes théoriques ont été utilisées pour étudier ces structures dont les méthodes exactes [28], les propriétés magnétiques dans des systèmes bidimensionnels à spin-1/2 décorés avec des spins  $S = 1$ . À l'aide de calculs micro-magnétiques tridimensionnels (3D) et unidimensionnels (1D), certaines études ont étudié l'effet du couplage de l'échange sur les propriétés magnétiques du système à couches **Sm – Co/a – Fe** [29]. Selon l'approche théorique généralisée LIU Zhao-Sen et al ont évalué la magnéto-résistivité négative de **ErBi** et ses niveaux de champ cristallin dans les champs magnétiques externes [30], l'application de l'approche du champ moyen aux propriétés magnétiques des antiferro-nanoparticules de terres rares [31], l'étude de deux sous-réseaux avec couches alternées [32], **TbNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C** avec un modèle à deux sous-réseaux [33] et le système bicouche [34] sont des exemples de systèmes étudiés. D'autre part, on trouve aussi dans la littérature, une étude utilisant la théorie du champ effectif donnant des diagrammes de phases et des propriétés magnétiques dans le système d'Ising mixte à deux couches alternées [35], le nanofil d'Ising hexagonal et ferrimagnétique [27, 36] et le système d'Ising ferrimagnétique à champ longitudinal aléatoire [36]. En outre, il existe des études détaillées utilisant des calculs de Monte Carlo, le comportement magnétique et les propriétés thermodynamiques de nano-ruban noyau/coquille (core/shell) [37] et de nanoparticules de graphène noyau/coquille [38]. Un certain nombre de comportements caractéristiques ont été observés, tels que la survenue de plusieurs températures de compensation. C'est-à-dire une courbe de magnétisation à champ nul qui passe par zéro deux fois ou plus avant d'atteindre finalement la phase paramagnétique.

Empiriquement en tant que prototype qui incarne cette idée, Shin-ichi Ohkoshi et d'autres ont préparé des membres d'une nouvelle classe de ferro-ferrimagnétique mixtes de la formule générique  $\left[ \left( Ni_a^{II} Mn_b^{II} Fe_c^{II} \right)_{1,5} \left[ Cr^{III} (Cn)_6 \right] 7.6H_2O \right]$  avec  $(a + b + c = 1)$ .

Au sein de ces composés, celui avec la composition  $a=0.2$ ,  $b=0.6$  et  $c =0.18$  qui a donné  $\left[ \left( Ni_{0.2}^{II} Mn_{0.6}^{II} Fe_{0.18}^{II} \right)_{1,5} \left[ Cr^{III} (Cn)_6 \right] 7.6H_2O \right]$  figures 0.3 et 0.4 [39]. Ce composé a montré

deux températures de compensation ( $T_{\text{comp1}} = 53 \text{ K}$  et  $T_{\text{comp2}} = 35 \text{ K}$ ). A notre connaissance, il s'agit du premier aimant présentant deux températures de compensation [39].



**Figure 0.4.:** Courbe des variations thermiques de l'aimantation totale ( $M_{\text{total}}$ ) de  $(\text{Ni}_{0.20}\text{Mn}_{0.61}\text{Fe}_{0.61})_{1.5}[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{Cn})_6]7.6\text{H}_2\text{O}$ , déterminée à l'aide de la théorie des champs moléculaires, avec quatre sites de sous-réseau ( $\text{Ni}$ ,  $\text{Mn}$ ,  $\text{Fe}$ ,  $\text{Cr}$ ), et les interactions d'échange  $J_{\text{NiCr}}=15,6 \text{ cm}^{-1}$ ,  $J_{\text{FeCr}}=10,9 \text{ cm}^{-1}$  et  $J_{\text{MnCr}}=22,5 \text{ cm}^{-1}$  [39].

Par ailleurs, parmi les modèles d'Ising des spins mixtes très étudiés, on trouve à titre d'exemple le système mixte des spins ( $S_A=1/2$ ,  $S_B=3/2$ ). En utilisant des techniques telles que : la théorie du champ effectif [40-45], la théorie du champ moyen (MFT) [46], les simulations de Monte Carlo (MCS) [47], l'approximation de paires [48], la théorie des groupes de renormalisation de l'espace réel [49], les diagrammes de phases et les propriétés magnétiques ont été étudiés. Les résultats obtenus présentent une variété de diagrammes de phases avec des transitions de phases du premier et du second ordre. Les auteurs ont constaté que le comportement tricritique existe et dépend fortement du nombre de coordination du réseau et du champ cristallin  $\Delta$ . De surcroît, les systèmes ferromagnétiques ont un et deux températures de compensation en présence d'un champ cristallin  $\Delta$  [50]. En mettant en œuvre la méthode EFT sur ce système en utilisant la technique de distribution de probabilité, l'effet du champ longitudinal aléatoire est également discuté [51-53]. C'est ainsi que, cette étude a montré que le comportement tricritique est très sensible aux valeurs négatives des champs cristallins  $\Delta_z^A/J$  et  $\Delta_z^B/J$ , ainsi pour les couplages d'interactions d'échange  $J$  spécifiques entre les atomes  $A$  et  $B$  [54]. C'est ainsi que, certains des résultats numériques obtenus concordent bien avec ceux rapportés dans le cadre du MFT [55]. Dernièrement, il a été rapporté

que trois points de compensation pouvaient être observés dans les systèmes à spins mixtes ( $S_A=1/2$ ,  $S_B=3/2$ ) avec un champ cristallin aléatoire [33].

D'ailleurs, une et trois boucles d'hystérésis avec différentes étapes et formes sont observées dans les composés à spins mixtes. Une boucle à triple hystérésis peut avoir des applications potentielles dans les dispositifs de mémoire multi-états [10]. À cet effet, des résultats intéressants sur les systèmes d'Ising ferro-ferrimagnétique mixtes bicouches ont été rapportés dans le cadre de la théorie du champ effectif (EFT) [26]. Il a été démontré expérimentalement que les boucles d'hystérésis peuvent être modifiées en fonction de la température et du signe de l'interaction d'échange entre les atomes  $A$  et  $B$  ainsi que par leurs champs cristallins monoatomiques.

En considération de ce qui précède, nous nous concentrerons dans cette thèse sur le cas du système d'Ising à deux spins mixtes ( $S_A$ ,  $S_B$ ). Ils sont répartis sur deux sous-réseaux magnétiques interpénétrés  $A$  et  $B$ , en présence d'anisotropie et sous l'effet des interactions d'échange entre  $A$  et  $B$ .

À cet égard, en réponse aux intérêts de nombreux chercheurs, nous avons étudié des différents systèmes d'Ising à spins mixtes sur deux sous-réseaux magnétiques inéquivalents et interpénétrés  $A$  et  $B$ . Notamment  $(1/2, 2)$ ,  $(3/2, 3)$ ,  $(1/2, 5/2)$  et  $(1, 2)$  en utilisant des méthodes bien connu dans la physique d'équilibre, en particulier l'approximation de champ moyen (MFA), le groupe de renormalisation (RG) et la simulation de Monte-Carlo (MCS).

Pour y parvenir, nous continuerons à concentrer notre attention sur les questions fréquemment posées par les auteurs telles que :

- Les transitions de phase sont-elles du deuxième ordre dans toute la gamme d'intensité d'anisotropie ou y a-t-il un point tricritique séparant les lignes des transitions du second et du premier ordre ?
- Y a-t-il un phénomène réentrant dans les limites de transitions de phases de premier et second ordre ?
- La ligne de transition du premier ordre est-elle située dans la région ordonnée ?
- Le système peut-il afficher un ou plusieurs points de compensation ou non ?

Cette thèse se compose de cinq chapitres. Tout d'abord, nous présentons au chapitre 1 les concepts de base, les définitions fondamentales, les théories et les techniques qui couvrent le reste de la thèse. Ensuite, nous étudions le système d'Ising à spins mixtes  $(1/2, 2)$  en présence d'un champ cristallin au chapitre 2. À cet effet, nous étudierons l'effet du champ cristallin aléatoire d'ions uniques par l'approximation du champ moyen. Dans le chapitre 3, nous allons

utiliser la technique du groupe de renormalisation Migdal–Kadanoff pour étudier le modèle de Blume-Capel (BC) à spins mixtes alternés ( $\sigma = 1/2$ ,  $S=2$ ) sur deux sous-réseaux ( $A$ ,  $B$ ) interpénétrant  $d$ -dimensionnels. Dans le chapitre 4, à l'aide de la simulation de Monte-Carlo, nous avons simulé le système d'Ising ferrimagnétique mixte des spin-1/2 et de spin-2 sur un réseau en nid d'abeilles (Honeycomb). Enfin, le chapitre 5 présente une étude théorique du système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes ( $3/2$  ; 3) par l'approximation du champ moyen.

## Références

- [1] F. Tanaka, S. Tanaka, & N. Imamura, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **26**(1) (1987) 231-235. “Magneto-Optical Recording Characteristic of TbFeCo Media by Magnetic Field Modulation Method”.
- [2] M. Alex, K. Shono, S. Kuroda, N. Koshino, & S. Ogawa, *J. Appl. Phys.*, **67** (1990) 4432-4434. “Ce-substituted Garnet Media for Magnetoptic Recording”.
- [3] J. S. Miller & A.J. Epstein (2000). “Molecule-Based Magnets-An Overview, Mrs Bulletin, November”.
- [4] O. Kahn, (1993). “Molecular Magnetism, VCH, New York”.
- [5] M. Drillon, E. Coronado, R. Georges, J. C. Gianduzzo, and J. Curely, *Physical Review B*, Vol. **40**, Number 16, (1989).
- [6] J. Petra, van Koningsbruggen et al, *inorganic Chemistry*, Vol. **29**, No. **18**, (1990).
- [7] R. Feyerherm, C. Mathoniere and O. Kahn, *J. Phys.: Condens. Matter* **13** (2001) 2639 – 2650.
- [8] T. Kaneyoshi, Y. A. Nakamura, *J. Phys. : Condens. Matter* **10** ([1998](#)) 3003.
- [9] Kaneyoshi T., Nakamura Y Shin S, *J. Phys.: Condens. Matter* **10** ([1998](#)) [7025](#).
- [10] W. Jiang, V. C. Lo, B. D. Bai, J. Yang, *J. Physica* **389** ([2010](#)) [2227](#).
- [11] M. Drillon, E. Coronado, D. Beltran, R. Georges, *J. Chem. Phys.* **79** (1983) 449-453.
- [12] Li Y Chen B, *J. Chin. Phys.* **24** ([2015](#)) [027502](#).
- [13] T. Mallah, S. Thiébaud, M. Verdaguer, P. Veillet, *J. Science* **262** (1993) [1554](#).
- [14] P. Hansen, *J. Appl. Phys.*, **62** (1987) 216. “Thermomagnetic Switching in Amorphous Rare-Earth Transition Metal Alloys”.
- [15] A. Hernando, & T. Kulik, *J. Phys. Rev. B*, **49** (1994) 7064-7067. “Exchange Interactions Through Amorphous Paramagnetic Layers in Ferromagnetic Nanocrystals”.
- [16] M. Multigner, S. Lakamp, G. Pourroy, A. Hernando & R. Valenzuela, *J. Appl. Phys. Lett.*, **69** (1996) 2761-2763. “Codoped Ferrite Single Domains and the Effect of Metallic Nano-inclusions”.
- [17] A., Bobák, M., A. Jurcisin, *Physica B: Condens. Matter* **233**(1997) 187.
- [18] A. Bobák, M. Jacur, *J. Phys. Rev.* **51** (1995) 11533.
- [19] M. Jascur, A. Bobák, *Acta Phys. Slovaca* **46**(1996) 113.
- [20] A. Bobák, M. Jurcisin, *Phys. Status Solidi* **204** (1997) 787.
- [21] J. W. Tucker, *J. Magn. Magn. Mater* **195** (1999) 733.
- [22] A. Bobák, D. Horváth, *Phys. Status Solidi* **213** (1999) 459.
- [23] GM Buendia, MA Novotny, *J. Phys. Condens. Matter* **9** (1997) 5951.
- [24] T. Kaneyoshi, *Solid State Commun.* **70** (1989) 975.
- [25] T. Kaneyoshi, J. C. Chen, *J. Magn. Magn. Mater.* **98** (1991) 201.
- [26] E. Kantar and M. Ertaş, *Solid State Commun.* **188** (2014) 71.
- [27] Y. Kocakaplan and E. Kantar, *Chin. Phys. B* **23** (2014) 046801.
- [28] A. Dakhama, *Physica A* **252** (1998) 225-237.
- [29] CX Sang, GP Zhao, WX Xia, XL Wan, FJ Morvan, XC Zhang, LH Xie, J Zhang, J Du, AR Yan, P Liu, *Chin. Phys.* **25** (2016) 037501.
- [30] Vladimir S Liu Z S Martin D, *Chin. Phys. Lett.* **26** (2009) [017201](#).

- [31] Z. Liu, S. Divis, [Chin. Phys. Lett. \*\*28\*\* \(2011\) 067302.](#)
- [32] U. Temizer, A. Ozkiloglu, [Chin. Phys. \*\*22\*\* \(2013\) 037501.](#)
- [33] Z. Liu, S. Vladimir and D. Martin, [Chin. Phys. Lett. \*\*26\*\* \(2009\) 107504.](#)
- [34] M. Ertas and M. Keskin, [Chin. Phys. \*\*22\*\* \(2013\) 120507.](#)
- [35] B. Deviren, Y. Polat and M. Keskin, [Chin. Phys. \*\*20\*\* \(2011\) 060507.](#)
- [36] M. Boughrara, M. Kerouad and A. Zaim, [J. Magn. Magn. Mater. \*\*360\*\* \(2014\) 222.](#)
- [37] LB. Drissi, S. Zriouel, L. Bahmad, [J. Magn. Magn. Mater. \*\*374\*\* \(2015\) 639.](#)
- [38] LB. Drissi and S. Zriouel, [J. Stat. Mech. \(2016\) 053206.](#)
- [39] SI Ohkoshi, Y Abe, A Fujishima, K Hashimoto, [Phys. Rev. Lett. \*\*82\*\* \(1999\) 1285.](#)
- [40] A Bobák, [Physica A \*\*258\*\* \(1998\) 140.](#)
- [41] A Bobák, [Physica A \*\*286\*\* \(2000\) 531.](#)
- [42] B Deviren, S Akbudak, M Keskin, [Solid State Commun. \*\*151\*\* \(2011\) 193.](#)
- [43] T S Liu, G Z Wei, Z H Xin, [J. Magn. Magn. Mater. \*\*173\*\* \(1997\) 179.](#)
- [44] Z H Xin, G Z Wei, T S Liu, [J. Magn. Magn. Mater. \*\*188\*\* \(1998\) 65.](#)
- [45] W Jiang, [Phys. Rev. \*\*68\*\* \(2003\) 134432.](#)
- [46] O F Abubrig, D Horvath, A Bobak, M Jascur, [J. Physica A \*\*296\*\* \(2001\) 437.](#)
- [47] G Wei, Q Zhang, Y Gu, [J. Magn. Magn. Mater. \*\*301\*\* \(2006\) 245.](#)
- [48] J W Tucker, [J. Magn. Magn. Mater. \*\*237\*\* \(2001\) 215.](#)
- [49] M Madani, A Gaye, M El Bouziani, A Alrajhi, [J. Physica A \*\*437\*\* \(2015\) 396.](#)
- [50] A. Bobák, [J. Physica A \*\*286\*\* \(2000\) 531.](#)
- [51] Y Imry, [J. Stat. Phys. \*\*34\*\* \(1984\) 849.](#)
- [52] G Grinstein, [J. Appl. Phys. \*\*55\*\* \(1984\) 2371.](#)
- [53] A Aharony, [J. Phys. Rev. \*\*18\*\* \(1978\) 3318.](#)
- [54] K Htoutou, A Oubelkecem, Y Benhouria, I Essaoudi, A Ainane, R Ahuja, [J. Supercond. Nov. Magn. \*\*30\*\* \(2017\) 1247.](#)
- [55] IJ Souza, PHZ de Arruda, M Godoy, L Craco, AS de Arruda, [J. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications \*\*444\*\* \(2016\) 589-600.](#)

# Chapitre **1**

---

*Généralités sur les systèmes  
magnétiques,  
transitions de phase, modèles et  
méthodes*

---

# 1 Introduction

Ce premier chapitre a pour objectif d'introduire les concepts et techniques de base requis pour la compréhension du manuscrit par le lecteur mais aussi nécessaires aux discussions qui seront abordées dans les chapitres suivants. Nos études étant principalement basées sur l'analyse des propriétés magnétiques, il nous a semblé utile de résumer brièvement les différents concepts de base du magnétisme. Dans ce cadre, le spin [1-3], le diamagnétisme, le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme, le ferrimagnétisme et le paramagnétisme [7-9] seront ainsi présentés. Nous introduirons ensuite les notions d'interaction d'échange, le champ cristallin et l'anisotropie suivie par la géométrie des réseaux utilisées dans un système de spins avant de présenter les différents modèles de spins sur réseau de physique statistique. Par la suite, on introduira la notion de phase, transition de phase et les phénomènes critique. Enfin, nous allons mentionner brièvement les méthodes approximatives et numériques pour étudier les transformations de phase que nous avons utilisées dans cette thèse. En particulier, l'approximation de champ moyen (MFA), Simulation de Monte-Carlo (SMC) et le groupe de renormalisation dans l'espace réel (GR).

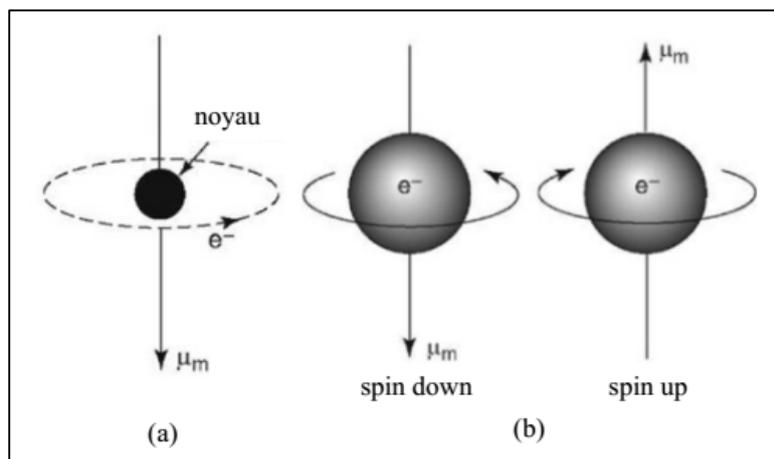
## 2 Quelques notions sur le magnétisme

### 2.1 Le magnétisme

Le magnétisme, phénomène associé aux champs magnétiques, qui proviennent du mouvement de charges électriques [1]. Cette motion peut prendre plusieurs formes. Il peut s'agir d'un courant électrique dans un conducteur ou des particules chargées se déplaçant dans l'espace, ou encore du mouvement d'un électron dans une orbitale atomique. Le magnétisme est également associé à des particules élémentaires, telles que l'électron, qui possèdent une propriété appelée le spin [2] (figure 1.1).

La plupart des électrons ont tendance à former des paires dans lesquelles l'un est spin up( $\uparrow$ ) et l'autre spin down( $\downarrow$ ), conformément au principe d'exclusion de Pauli [3], selon lequel deux électrons ne peuvent occuper le même état d'énergie en même temps. Dans ce cas, leurs champs magnétiques sont dans des directions opposées et s'annulent donc. La composante essentielle de tout matériau magnétique est la présence d'un électron non apparié ou plus précisément, du spin associé à un électron non apparié. En règle générale, les spins

électroniques non appariés sont situés dans l'orbitale **d** des métaux ; Cependant, les spins non appariés dans les orbitales **s** et **p** pour les produits organiques [4] et dans les orbitales **f** pour les éléments de terres rares [5] ont également contribué au magnétisme du matériau. Bien que, certains atomes contiennent un ou plusieurs électrons non appariés dont le spin peut produire un champ magnétique directionnel, la direction de leur rotation détermine la direction du champ magnétique. Lorsqu'une majorité significative d'électrons non appariés sont alignés avec leurs spins dans la même direction, ils se combinent pour produire un champ magnétique suffisamment puissant pour être perçu à l'échelle macroscopique.



**Figure 1.1:** représentation 'simpliste' des moments magnétiques orbital (a) et de spin (b) d'un électron.

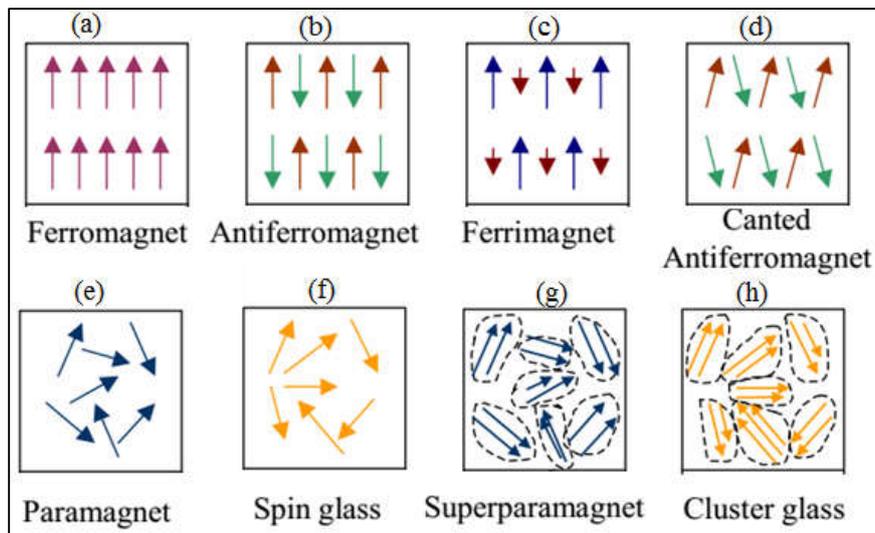
Les interactions magnétiques sont courantes pour les spins isolés, en particulier à basse température car l'énergie thermique ( $K_B T$ ) est faible. Lorsque la corrélation est suffisamment forte pour surmonter ( $K_B T$ ), un ordre à longue portée peut se produire et former un aimant. Les aimants classiques, tels que le fer, ont leurs spins alignés selon la direction du champ magnétique terrestre lors de leur formation. Ces spins deviennent « verrouillés » lors du refroidissement et le matériau devient un aimant. Lorsque tous les spins sont alignés et verrouillés, ils deviennent magnétiquement ordonnés (un phénomène qui se produit en dessous de la température critique notée  $T_C$ ) [6].

Ainsi, Tous les matériaux présentent un magnétisme, mais le comportement magnétique dépend de la configuration électronique des atomes et de la température. La configuration électronique peut provoquer l'annulation mutuelle des moments magnétiques (ce qui rend le matériau non magnétique) ou l'alignement (ce qui le rend plus magnétique). L'augmentation de la température augmente le mouvement thermique aléatoire,

ce qui rend plus difficile l'alignement des électrons et diminue généralement la force d'un aimant.

## 2.2 Les différents comportements magnétiques de la matière

Indépendamment de la position orbitale des spins des électrons, il existe différentes façons dont ils interagissent entre eux. Le magnétisme peut être classé en fonction de sa cause et de son comportement. Les principaux types de magnétisme sont : le paramagnétisme, le ferromagnétisme, le diamagnétisme, le ferrimagnétisme, l'antiferromagnétisme, l'hélimagnétisme, le métamagnétisme, les verres de spins, etc [7]. La figure 1.2 illustre les différentes configurations de spins correspondant aux différents types de classement magnétique à deux moments différents.

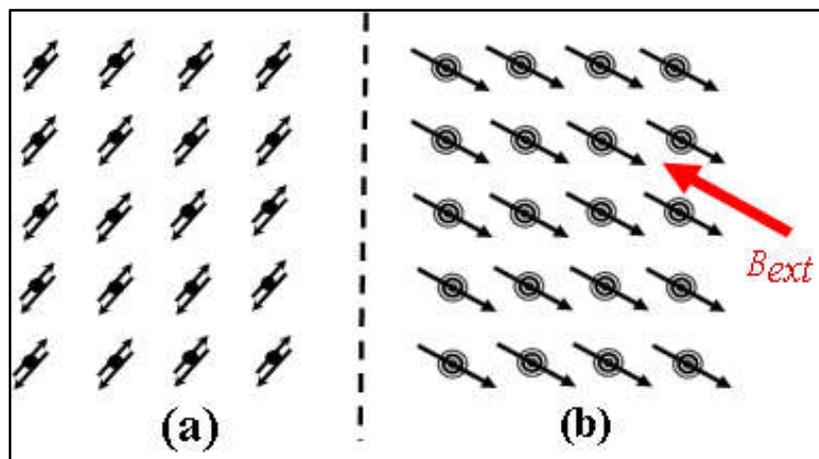


**Figure 1.2 :** Illustration de la configuration de spins de divers ordres magnétiques [8].

Dans les situations où il se produit un fort couplage à longue distance entre les sites de spins électroniques, il existe deux manières principales d'aligner les spins et de les considérer comme des aimants. Les ferromagnétiques sont formés lorsque les électrons adjacents tournent dans un matériau aligné parallèlement les uns aux autres dans des régions connues sous le nom de domaines. En l'absence d'un champ magnétique appliqué, les électrons dans la matière restent alors orientés dans le même sens que le champ les a mis, même quand on retire l'aimant. Dans ce cas, le matériau est devenu un aimant permanent lui-même et il conservera cette aimantation tant que l'on ne la supprime pas (en chauffant fortement le matériau, par exemple). Les antiferromagnétiques, sont formés lorsque les électrons adjacents dans un matériau

s'alignent antiparallèlement les uns aux autres et sont attribués à un degré plus élevé de chevauchement orbital où se trouvent les spins d'électrons non appariés. Ceci est une conséquence d'un effet lié au principe d'exclusion de Pauli. En raison de la disposition antiparallèle dans tous les domaines de spin, le moment magnétique net résultant de la matière sera de zéro.

Enfin, lorsque l'électron tourne dans un matériau de différentes amplitudes et est fortement couplé de manière antiferromagnétique dans tout le matériau en vrac, le système est alors appelé ferrimagnétique. Comme les spins sont d'un module inégal, ils ne se compensent pas complètement, ce qui donne un moment net fini pour le matériau en vrac. Par conséquent, un ferrimagnétique est un cas particulier d'antiferromagnétique ; Cependant, le matériau présente un comportement très semblable à celui d'un ferromagnétique [9].



**Figure 1.3:** Alignements de spins dans une substance diamagnétique en absence de champ magnétique (a) et en la présence du champ magnétique (b).

Outre le comportement ferrimagnétique et ferromagnétique, d'autres phénomènes d'ordre magnétique, tels que le métamagnétisme, l'antiferromagnétisme incliné et le comportement du verre de spin peuvent également se produire. La transformation d'un état antiferromagnétique en un état de moment élevé (c'est-à-dire que l'alignement de spin décrit à la figure 1.2b est transformé en celui illustré à la figure 1.2a par un champ magnétique appliqué) est appelée métamagnétisme. Un antiferromagnétique incliné (ou un ferromagnétique faible) résulte de l'inclinaison relative des spins couplés antiferromagnétiquement qui conduit à un moment net (figure 1.2d). Un verre de spin se produit lorsqu'il existe des corrélations spatiales locales avec des spins voisins sans ordre à longue distance. L'alignement de spin d'un verre de spin est celui d'un paramagnétique (figure 1.2e) ; Cependant, contrairement aux paramagnétiques, pour lesquels les directions de spin varient dans le temps, les orientations de

spin d'un verre de spin restent fixes ou ne varient que très lentement dans le temps. Des exemples d'aimants à base de molécules présentant chacun de ces comportements ont été rapportés [10].

Contrairement au cas paramagnétique, si l'orbite est remplie, elle présentera un diamagnétisme. Le diamagnétisme est un comportement des matériaux qui les conduit, lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique, à créer une très faible aimantation opposée au champ extérieur, et donc à générer un champ magnétique opposé au champ extérieur. Lorsque le champ n'est plus appliqué, l'aimantation disparaît (figure 1.3). Le diamagnétisme est un phénomène qui apparaît dans toute la matière atomique, mais il est masqué par les effets du paramagnétisme ou du ferromagnétisme lorsque ceux-ci coexistent avec lui dans le matériau. Les exemples de matériaux diamagnétiques incluent l'or, le quartz, l'eau, le cuivre et l'air.

### 3 Interaction d'échange-Champ cristallin

#### 3.1 Interaction d'échange

L'origine d'un état magnétique dans certains solides résulte de l'interaction entre les spins électroniques des atomes qui constituent ce solide. Cependant, bien qu'à chaque spin atomique on puisse associer un moment magnétique, cette interaction n'est pas le fruit du couplage entre ces dipôles magnétiques. Elle trouve son origine dans un processus quantique beaucoup plus subtile appelé l'interaction d'échange qui fait intervenir le principe d'exclusion de Pauli et la répulsion électrostatique entre les électrons [11]. Pour comprendre qualitativement ce phénomène, considérons deux atomes voisins possédant chacun un électron. La fonction d'onde  $\psi(1,2)$  des deux électrons est le produit d'une orbitale  $\phi(r_1, r_2)$ , construite par la superposition de deux orbitales atomiques localisées sur chaque atome, par une fonction d'onde de spin  $\chi(1,2)$ . Cette fonction d'onde devant être antisymétrique par échange des électrons, c'est à dire  $\psi(1, 2) = -\psi(2, 1)$ , deux situations apparaissent :

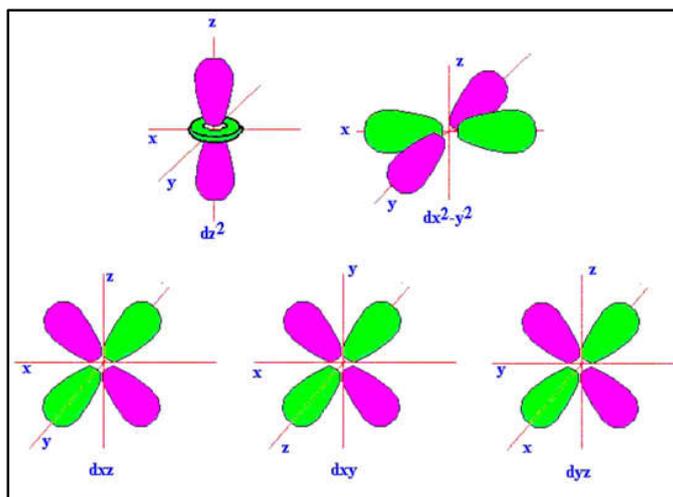
- i) Si les deux spins sont parallèles,  $\chi(1,2)$  est symétrique. Par conséquent l'orbitale  $\phi(r_1, r_2)$  est antisymétrique. Cela signifie que les électrons auront tendance à être loin l'un de l'autre et à rester localisé sur leur atome respectif. Ainsi, l'interaction électrostatique positive sera minimisée.
- ii) Inversement, si les deux spins sont antiparallèles l'orbitale  $\phi(r_1, r_2)$  est symétrique.

Les électrons pourront se rapprocher et l'interaction électrostatique sera plus forte. Ainsi, on peut s'attendre à ce que deux électrons de spins parallèles aient une énergie « moins positive » que deux électrons de spins antiparallèles. Cette différence d'énergie d'origine électrostatique revient à imposer un couplage entre deux spins de la forme :  $V = V_0 - JS_1S_2$  où  $J$  est appelé intégrale d'échange direct [12].

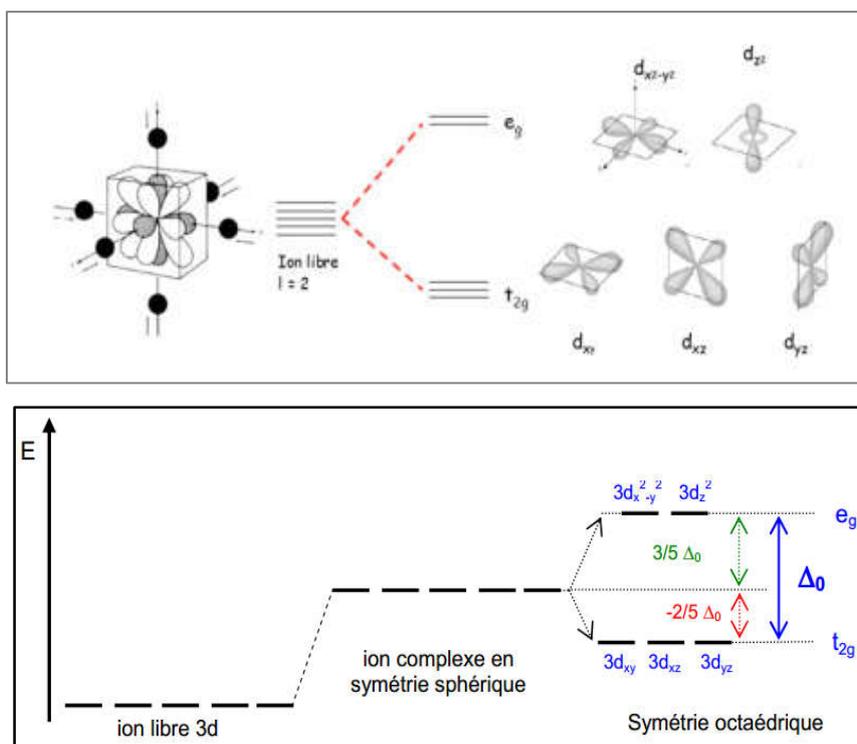
Les processus d'échange direct discutés ci-dessus ne concernent que les électrons localisés responsables des moments magnétiques des atomes. Cependant, le système contiendra de nombreux autres électrons, par exemple des électrons de conduction ou des électrons dans des atomes diamagnétiques. Dans ces cas, il est possible que les électrons du réseau magnétique puissent interagir via un échange partagé avec ces autres électrons. Dans ce cas, l'interaction est appelée échange indirect. Pour les matériaux isolants, cet échange indirect est appelé super-échange [13] et se produit généralement à travers les électrons dans l'orbite p des atomes voisins. Semblable à l'échange direct, il est possible pour le superéchange de permettre un alignement ferromagnétique et antiferromagnétique. Le signe et la force de l'échange peuvent être estimés par les règles de Goodenough-Kanamory [14]. En règle générale, l'échange ferromagnétique devrait être plus faible que l'échange antiferromagnétique. Un autre type d'échange indirect est présent dans les métaux. Dans les métaux, il est possible que les électrons magnétiques interagissent avec les électrons de conduction, donnant lieu à ce que l'on appelle le mécanisme RKKY (Ruderman et Kittel [15], Kasuya [16] et Yosida [17]).

## 3.2 Champ cristallin

Dans l'atome isolé, les niveaux d'énergie des cinq orbitales 3d (figure 1.4) sont dégénérés (même énergie). Sous l'effet d'un champ électrique sphérique, les orbitales sont déstabilisées d'une quantité  $\Delta E$ . En particulier, si le cation (atome central) est placé au centre d'un environnement octaédrique, les six ligands vont créer un champ électrostatique dont l'influence sur les 5 orbitales d du cation dépendra de l'orientation de celles-ci. Les cinq orbitales d ne sont donc plus équivalents vis-à-vis des six ligands : il y a levée de dégénérescence.



**Figure 1.4:** Une représentation des orbitales électroniques 3d dans l'ensemble des bases discutées dans le texte. Sur ces cinq, deux ( $d_{x^2-y^2}$  et  $d_{z^2}$ ) ont des lobes qui s'étendent le long des axes, tandis que les trois autres ont des lobes décalés par rapport aux axes.

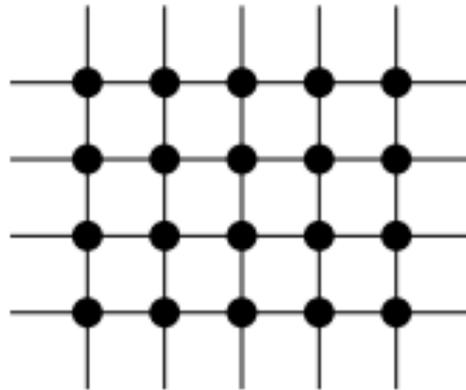


**Figure 1.5:** Influence du champ cristallin octaédrique sur les niveaux d'énergie des orbitales d

## 4 La géométrie des réseaux.

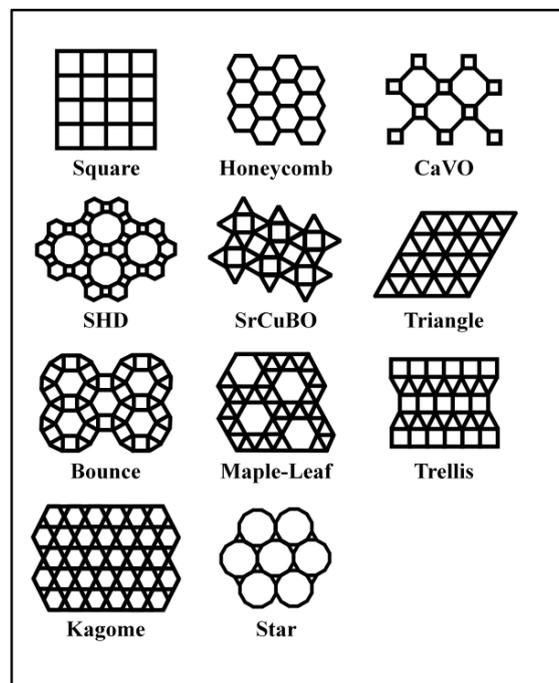
Les réseaux de spins ont un intérêt particulier en physique de la matière condensée et spécialement dans l'étude du magnétisme. Dans un système de spin, les spins doivent être localisés ou du moins reliés les uns aux autres afin de décider de l'interaction entre eux. Cela

peut se faire par un réseau régulier ; une structure de liens reliée à des sommets. Cependant la plupart des modèles en physique statistique sont définis par des variables de spins placées aux nœuds d'un réseau régulier, pris comme un ensemble de sites (ou nœuds) reliés par des liens. Ces réseaux peuvent avoir une variété de géométries différentes.



**Figure 1.6 :** *réseau carré*

L'exemple le plus simple de ce type de réseau à deux dimensions est le réseau carré (figure 1.6). L'analogue en trois dimensions est le réseau cubique et en quatre dimensions est connu sous le nom de réseau hypercubique.



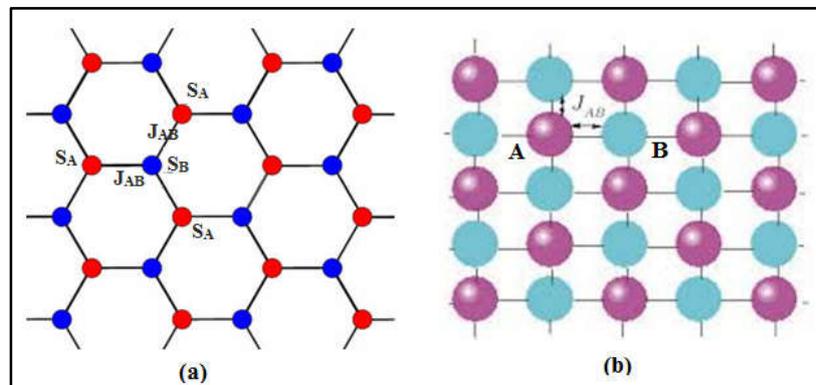
**Figure 1.7 :** *réseaux bidimensionnels réguliers*

D'autres réseaux sont utilisés dans les modèles de spin notamment réseau de nid d'abeille (honeycomb lattice), triangulaire, .... En général Il existe un seul réseau unidimensionnel appelé chaîne linéaire. En deux dimensions, il existe onze (11) réseaux réguliers appelés réseaux archimédiens dont la particularité est que tous les sites possèdent le même nombre de voisins et que toutes les liaisons sont identiques (figure 1.7). Il n'y a pas d'autres réseaux bidimensionnels réguliers en ce sens en dehors de ces onze.

**Tableau 1.1**– La coordinnce des différentes structures géométriques

Dimension	Réseau	Coordinnce
1	Chain linéaire	2
2	Nid d'abeille	3
2	Carré	4
2	Triangulaire	6
3	Diamant	4
3	Cubique	6
3	Tétraédrique	12
4	Hypercubique	8

L'une des propriétés caractéristiques de la géométrie d'un réseau est le nombre de sites directement connectes à un site donné. Ce nombre est connu comme la coordinnce du réseau ( $z$ ) comme montré dans le tableau 1.1.



**Figure 1.8 :** Deux systèmes de spins mixtes bidimensionnels constitués de deux types d'atomes magnétiques avec des valeurs de spin  $S_A$  et  $S_B$  sur deux sous réseaux **A** et **B** interpénètrant, (a) réseau de nid d'abeille (honeycomb lattice), (b) réseau carré,  $J_{AB}$  est l'interaction d'échange entre les premiers voisins les plus proches.

Par ailleurs, plusieurs études traitent de réseaux mixtes et hétérogènes. Tel que le réseau sous-jacent est composé de deux sous-réseaux constitués de deux types d'atomes magnétiques A et B interpénètrant, dont l'un est occupé par le spin- $S_A$  et l'autre par le spin- $S_B$ , situés dans une symétrie de sites de type carré, triangulaire, .... Les sous-réseaux A et B ont

une distribution uniforme. L'étude de ces réseaux nous permet de connaître les propriétés physiques du système ferrimagnétique. La [figure 1.8](#) présente des exemples qui ont été abondamment étudiés dans la littérature.

Dans les systèmes de spins mixtes hétérogènes (aléatoires), deux types différents d'ions magnétiques (désignés par A et B) sont répartis de manière aléatoire sur un réseau en fonction des concentrations relatives sur les matériaux magnétiques et trois interactions d'échange distinctes, à savoir  $J_{AA}$ ,  $J_{AB}$  et  $J_{BB}$  doivent être prises en compte, où  $J_{ij}$  est l'interaction d'échange entre les plus proches entre les ions de type  $i$  et de type  $j$ . Une longue histoire et de nombreuses études ont été consacrées à des matériaux magnétiques désordonnés à caractère aléatoire éteint où les variables aléatoires d'un système magnétique ne peuvent pas changer de valeur avec le temps. Du point de vue expérimental, de nombreuses études ont été menées sur les propriétés thermiques et magnétiques de systèmes d'alliages binaires désordonnés, comportant des interactions spin-spin ferromagnétiques et (ou) antiferromagnétiques, pour mieux comprendre les propriétés magnétiques de différents types de systèmes à réaction magnétique, tels que :  $\text{Rb}_2\text{Mn}_c\text{Mg}_{1-c}\text{F}_4$  [18],  $\text{Mn}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$  [19],  $\text{Fe}_p\text{Mg}_{1-p}\text{Cl}_2$  [20].

## 5 Les modèles de spin dans la physique statistique

Les modèles en réseaux ont été introduits en tant que modèles discrets pour des expériences réelles ensuite avérés utiles pour modéliser une grande variété de phénomènes et de systèmes allant des matériaux ferroélectriques aux transitions gaz-liquide. Ils fournissent également des discrétisations des théories des champs euclidiens et quantiques et sont donc importants du point de vue de la physique théorique. Bien que la motivation initiale vienne de la physique, ils sont apparus comme des objets mathématiques extrêmement complexes et riches, dont l'étude nécessitait le développement d'importants nouveaux outils qui trouvaient des applications dans de nombreux autres domaines des mathématiques. L'application des modèles de réseau est très diversifiée : il interprète des modèles de verres à spin, de chaînes quantiques, de surfaces aléatoires, de systèmes de spin, de modèles de percolation. Ici, nous nous concentrons sur une classe plus petite de modèles de réseau appelés systèmes de spin. Ces systèmes sont des ensembles aléatoires de variables de spin attribuées aux nœuds d'un réseau régulier.

La modélisation d'un système de spin est un aspect clé du magnétisme à température finie. Les modèles de spin permettent une description simple du comportement d'un spin dans un milieu magnétique. Une description de ces modèles est proposée ci-dessous.

## 5.1 Modèle d'Heisenberg

Très peu de temps après le développement de la mécanique quantique, Heisenberg et Dirac ont proposé indépendamment que le phénomène magnétique dans les solides peut être compris à la base d'un modèle d'échanges couplés de moment quantique angulaire (Spin), avec un hamiltonien dite hamiltonien de Heisenberg de la forme [21] :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \vec{h} \sum_i \vec{S}_i \quad (1.1)$$

Où  $J$  est le paramètre d'interaction d'échange entre les spins,  $\vec{h}$  est le champ magnétique externe,  $\vec{S}_i$  est un opérateur de spin,  $\langle i,j \rangle$  indique la somme sur les proches voisins, et le produit scalaire  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  est donné par  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z$ . Le modèle décrit un matériau ferromagnétique  $J > 0$  ou antiferromagnétique  $J < 0$ .

L'hamiltonien d'Heisenberg [22] peut être généralisé à

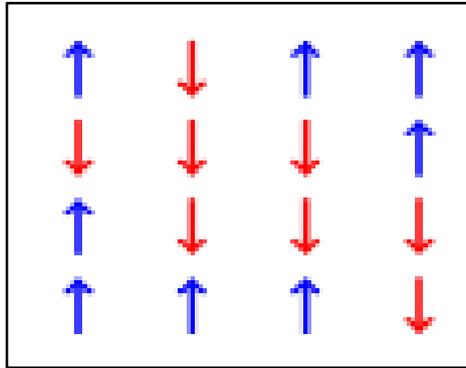
$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_x S_i^x S_j^x + J_y S_i^y S_j^y + J_z S_i^z S_j^z) + \vec{h} \sum_i \vec{S}_i \quad (1.2)$$

Il est aussi connu comme le modèle XYZ ou bien le modèle XXZ dans le cas  $J_x = J_y \neq J_z$ . Un cas particulier  $J_x = J_y, J_z = 0$  est connu sous le modèle XY qui a été utilisé comme un modèle de réseau de l'hélium superfluide. Le modèle de Heisenberg a également d'intéressantes propriétés dynamiques, y compris les excitations collectives d'ondes de spin, qui déterminent la thermodynamique à basse température.

## 5.2 Modèle d'Ising

Le modèle Ising [23] a été initialement proposé pour expliquer la structure et les propriétés des substances ferromagnétiques. Puisque le modèle permet de simplifier les interactions complexes. Depuis lors, il a été utilisé avec succès dans de nombreux domaines scientifiques pour modéliser différents phénomènes dans lesquels des effets collectifs sont produits par des interactions locales entre particules à deux états. Dans sa forme la plus générale, le modèle d'Ising s'applique à un ensemble de particules magnétiques interagissant les unes avec les autres en présence d'un champ magnétique externe, dans lequel les particules sont disposées sur un réseau carré et sont limitées à une interaction directe uniquement avec leurs voisins les plus proches. Le champ externe est un champ « point » agissant sur une particule donnée. À une position particulière ( $i$ ) sur le réseau, chaque particule a une valeur de spin +1

(spin up) ou -1 (spin down). Nous désignons cette valeur de spin par  $S_i$ . La configuration du réseau entière  $\{S_i\}$  est déterminée en spécifiant  $S_i$  à toutes les positions  $i$  (figure 1.9).



**Figure 1.9 :** Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches hautes (bleu) et basses (rouge) représentent des spins up et down respectivement.

L'Hamiltonien de ce modèle s'écrit :

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum_i S_i \quad (1.3)$$

Où  $\langle i,j \rangle$  désigne une somme sur les plus proches voisins,  $h$  est le champ magnétique extérieur,  $S_i$  représente le spin au site  $i$  et  $J$  est l'interaction d'échange.

### 5.3 Modèle de Potts

Le modèle de Potts est une généralisation du modèle d'Ising. Il a été introduit sous sa forme standard dans une thèse de Potts en 1954 [24] et joue depuis lors un rôle important dans la physique théorique. Le hamiltonien d'Ising ne dépend que des interactions entre les plus proches voisins (1,3). Cependant une généralisation naturelle consiste à autoriser un plus grand nombre de directions ou d'interactions de spin différentes entre spins qui ne sont pas les plus proches voisins. Dans le modèle de Potts à l'état  $q$  planaire, les directions des spins sont limitées à un plan perpendiculaire au réseau

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q}, \quad n = 1, 2, \dots, q-1 \quad (1.4)$$

L'interaction entre deux spins ne dépend que de leur direction relative

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} I(\theta_{ij}) \quad (1.5)$$

Où  $I$  est une fonction périodique de période  $2\pi$  :  $\forall x, I(x+2\pi) = I(x)$  et  $\theta_{ij} = \theta_i - \theta_j$ . Ainsi, la fonction de partition est  $Z_q$  symétrique. Le modèle de Potts standard est défini par :

$$I(\theta_{ij}) = J \delta_{S_i S_j} = \begin{cases} J, & \text{si } S_i = S_j \\ 0, & \text{si } S_i \neq S_j \end{cases} \quad (1.6)$$

L'Hamiltonien de Potts standard s'écrit :

$$H_{Potts} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{S_i S_j} \quad (1.7)$$

Le modèle de Potts est équivalent au modèle d'Ising pour  $q = 2$ . Il découle que l'équation (1.7) prend la forme suivante :

$$H_{Potts} = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} 2 \left( \delta_{S_i S_j} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{\langle i,j \rangle} J \frac{1}{2} \quad (1.8)$$

Avec  $2 \left( \delta_{S_i S_j} - \frac{1}{2} \right) = \pm 1$ , Ce hamiltonien est équivalent à celui d'Ising plus une constante

## 5.4 Modèle de Blume-Capell

Le modèle de Blume-Capel (BCM) est introduit en 1966[25], à l'origine pour expliquer qualitativement la transition de phases dans un mélange de  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  ; il s'agit d'une généralisation de l'équation (1.3) qui autorise trois valeurs  $S_i = \pm 1, 0$  avec l'énergie associée. L'Hamiltonien de modèle de Blume-Capel s'écrit :

$$H_{BC} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2 \quad (1.9)$$

Où  $\Delta$  est le champ cristallin. D'un point de vue qualitatif, le modèle de Blume-Capel permet des ( $S_i = 0$ ) l'absence de particule, sur un réseau en plus des moments magnétiques non nuls ( $S_i = \pm 1$ ). Le paramètre  $\Delta$  de l'équation (1.9) contrôle la densité de sites vacants. Pour  $\Delta \rightarrow -\infty$ ,  $S_i = 0$  est énergétiquement défavorable et le BCM se réduit au modèle d'Ising. Comme  $\Delta$  augmente, la transition de type aimant du deuxième ordre de ferromagnétique à paramagnétique devient de premier ordre au-dessus d'un point tricritique et se produit avec un saut discontinu en magnétisation et densité des états ( $S_i = 0$ ). Le modèle BC fournit une description des systèmes allant des métamagnétiques aux alliages ternaires, aux spins multicomposants et à la

dynamique des surfaces rugueuses. Il a également été étudié pour  $\Delta_i$  non uniforme afin de comprendre les situations où la densité de spin varie à travers le réseau.

## 5.5 Modèle de Blume-Emery-Griffiths

Le modèle Blume-Emery-Griffiths (BEG) est un modèle d'Ising à spin-1 qui décrit un mélange de composants non magnétiques ( $s = 0$ ) et magnétiques ( $s = 1$ ) [26]. Le modèle a été inspiré à l'origine par l'observation expérimentale selon laquelle la transition superfluide continue entre  $\text{He}^4$  et l'impureté  $\text{He}^3$  devient une transition de premier ordre vers la séparation de phases normale ( $\text{He}^3$ ) et superfluide ( $\text{He}^4$ ) au-dessus d'une concentration critique de  $\text{He}^3$ . Plus tard, il a été utilisé dans la description de nombreux phénomènes physiques différents : fluides multicomposants, microémulsions, alliages de semi-conducteurs, modèles de conduction électronique, etc. Blume, Emery et Griffiths ont ajouté une interaction biquadratique supplémentaire  $K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2$  au modèle BC. L'Hamiltonien de BEG s'écrit comme suit :

$$H_{BEG} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2 \quad (1.10)$$

Il est l'un des rares modèles simples qui donne à la fois la transition de phase du premier ordre et du second ordre.

## 5.6 Modèle d'Hubbard

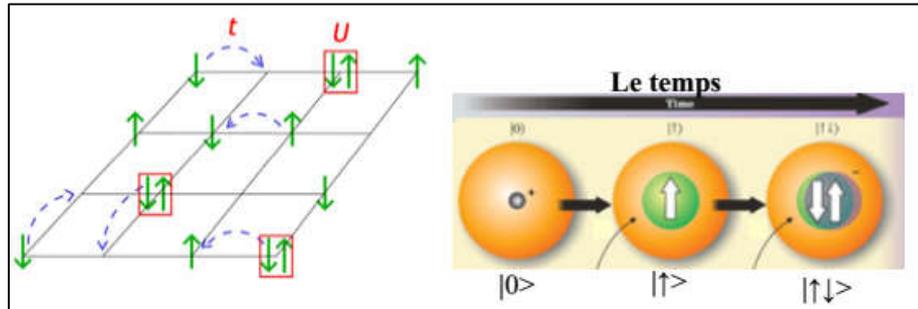
Le modèle d'Hubbard a été suggéré simultanément en 1963 par John Hubbard [27], Martin C. Gutzwiller [28] et Junjiro Kanamori [29]. Ce modèle traite l'interaction entre les électrons qui sont sur des sites différents à travers un potentiel moyen, mais garde explicitement l'interaction entre les électrons occupant le même site. Cette approche est illustrée par la [figure 1.10](#)

Le modèle d'Hubbard peut s'écrire sous la forme

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \mu \sum_i n_i \quad (1.11)$$

Le premier terme, qu'on nomme le terme de sauts, provient des contributions de l'énergie cinétique des électrons au hamiltonien. Où  $\mu$  est le potentiel chimique et  $i, j$  sont les indices des sites,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  représente le spin d'un électron,  $t_{i,j}$  représente l'amplitude de probabilité qu'un électron saute du site  $i$  au site  $j$  ou vice-versa,  $c^\dagger$  est l'opérateur de création pour un

fermion,  $c$  est l'opérateur d'annihilation; ces termes favorisent la délocalisation des électrons. Le second est le terme d'interaction coulombienne, limité aux électrons de spins opposés occupant le même site. Le coefficient  $U$  mesure la répulsion sur le site  $i$  et  $n_{i,\sigma}$  est l'opérateur nombre de particules de spin  $\sigma$  au site  $i$ .



**Figure 1.10 :** Illustration schématique des électrons en interaction dans un solide vue par le modèle d'Hubbard. Les électrons de charge négative et spin up ou down sautent d'un site à un site voisin avec une amplitude de saut  $t$ . La dynamique du système conduit à une variation du nombre d'occupation d'un site donné. Deux électrons sur un même site avec des spins opposés subissent l'interaction de Coulomb  $U$  [15].

On voit que le terme en  $t$  annihile un fermion de spin  $\sigma$  sur le site  $i$  et le recrée sur le site  $j$ . Le nombre total de fermions est donc conservé. Le terme en  $U$  n'est différent de zéro que si deux fermions de spin opposés se trouvent sur le même site. Pour  $U=0$ , l'Hamiltonien de Hubbard se réduit au modèle des liaisons fortes. Le modèle d'Hubbard nous permet principalement de mettre en évidence le rôle des corrélations entre électrons. Dans la limite de couplage fort, le modèle d'Hubbard s'identifie avec le modèle  $t$ - $J$  que nous allons discuter dans la suite.

## 5.7 Modèle de $t$ - $J$

Le modèle  $t$ - $J$  [30], introduit dans le cadre de la théorie des supraconducteurs à haute température critique, est généralement utilisé dans la description d'un isolant antiferromagnétique dopé en trous. Bien entendu le modèle  $t$ - $J$  décrit des électrons fortement corrélés sur un réseau en dimension  $d$ . Les interactions répulsives entre les électrons les empêchent d'occuper un site simultanément ; il ne peut donc y avoir qu'un ou zéro fermion sur un seul site. Les particules peuvent toujours se trouver dans deux états différents, en spin-up ou en spin-down. Le modèle  $t$ - $J$ , est dérivé du modèle de Hubbard, en prenant la limite de couplage

fort ( $U/t \gg 1$ ). Sur un réseau hypercubique de dimension  $d$ , le modèle  $t$ - $J$  est défini par l'hamiltonien

$$H = -\sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \mu \sum_i n_i \quad (1.12)$$

Où  $i$  et  $j$  sont les sites d'un réseau,  $J$  l'énergie d'échange de Heisenberg et  $S_i$  est l'opérateur de spin.

Dans la définition de ce modèle, la double occupation est interdite. Autrement dit, la limite  $J \rightarrow 0$  est non-triviale. Dans la limite de fort couplage,  $U \gg t$ , le modèle  $t$ - $J$  se déduit du modèle d'Hubbard de la section précédente. On trouve alors :

$$J \approx \frac{4t^2}{U} \quad (1.13)$$

Dans cette limite, la double occupation est négligeable dans le modèle de Hubbard.

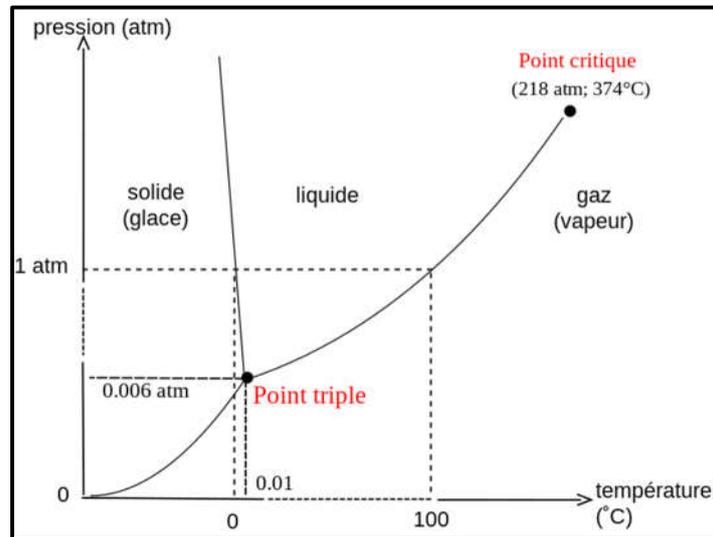
## 6 Transition de phase, phénomènes critiques

### 6.1 Transition de phase

Une phase est une région du système dans laquelle chaque propriété intensive (telle que la température et la pression) à chaque instant a la même valeur, ou une substance dont les propriétés physiques macroscopiques sont uniformes. La plupart des matériaux peuvent exister sous différentes phases. Chacune de ces phases se caractérise par des propriétés macroscopiques différentes, en fonction d'un ensemble de paramètres intensifs tels que la température, la pression, le champ électrique ou magnétique. Pour un système donné, on fait varier un certain nombre de ces paramètres intensifs pour mettre en évidence les diverses phases du système et en explorer les domaines d'existence, et on consigne les résultats sur une carte dénommée un diagramme de phase. La [figure 1.11](#) montre le diagramme de phases (pression, température) dans l'exemple de l'eau,  $H_2O$ , dans les trois phases, glace, eau liquide, vapeur d'eau.

La transformation d'un liquide en gaz, d'un matériau conducteur en supraconducteur, d'un état fluide à un état superfluide ou le passage du ferromagnétisme au paramagnétisme sont des phénomènes que l'on dénomme transition de phase. Ce changement d'état physique ou de phase à une autre se produit de manière abrupte pour une valeur critique d'un paramètre intensif (température, pression, champ électrique, champ magnétique, ...). Les transitions de phases ont

lieu lorsque l'énergie libre d'un système n'est pas une fonction analytique (par exemple non-continue ou non-dérivable) pour certaines variables thermodynamiques. Il existe deux classes principales de transitions de phase : les transitions de phase du premier ordre et les transitions de phase continues (également parfois appelées transitions de phase du second ordre).



**Figure 1.11:** Diagramme de phase solide-liquide-gaz.

On distingue deux manières de classer les transitions de phase. La première fut celle d'Ehrenfest en 1933 [31], qui proposait une classification des différentes transitions à partir du comportement du potentiel thermodynamique associé (enthalpie libre, énergie libre ...).

**i) Les transitions de phase du premier ordre** s'accompagnent de discontinuités des grandeurs thermodynamiques, comme l'entropie et la densité, associées à des dérivées premières de potentiels thermodynamiques. (C'est le cas de transitions normales subit par l'eau par exemple)

**ii) Les transitions de phase du second ordre** pour lesquelles les potentiels thermodynamiques et leur dérivées premières sont continués et qui s'accompagnent de certaines discontinuités des dérivées secondes de potentiels thermodynamiques (comme la capacité calorifique). Pour ces transitions, on passe de façon continue d'une phase à l'autre sans que l'on puisse parler de coexistence des deux phases. C'est le cas de beaucoup de transition en phase condensée comme le ferromagnétique.

En 1937, *Landau* proposa une autre classification des transitions de phases, basée sur le fait que certaines transitions (sans chaleur latente) s'accompagnent d'un changement de symétrie du système [32]. Ce qui a conduit *Landau* à introduire la notion de *paramètre d'ordre*,

cette grandeur est nulle dans la phase la plus symétrique (haute température) et différente de zéro ailleurs. *Landau* proposa 2 catégories de transitions :

- i. Les transitions sans paramètre d'ordre, ce sont des transitions du premier ordre au sens d'*Ehrenfest*. Elles se traduisent aussi par un saut du paramètre d'ordre (discontinuité).
- ii. Les transitions avec paramètre d'ordre, correspondent à une continuité du paramètre d'ordre ainsi qu'à des discontinuités des dérivées des fonctions thermodynamiques. Dans ce dernier cas elles peuvent être du 2<sup>e</sup> ordre si la dérivée seconde est discontinue, du 3<sup>e</sup> ordre si la dérivée troisième est discontinue, *etc...* Ces transitions sont qualifiées de **transitions continues** ou de **phénomènes critiques**. C'est le comportement des propriétés thermodynamiques d'un système au voisinage de la transition de phase.

## 6.2 Phénomènes critiques.

### 6.2.1 Comportement critique

Au voisinage d'un point de transition, un système possède deux phases de stabilité voisine. Ceci entraîne l'existence de fluctuations. Ces fluctuations gouvernent, en général, le comportement du système au voisinage de la transition. Ainsi, pour une transition liquide-gaz, se produit au voisinage immédiat du point critique, le phénomène caractéristique de l'opalescence critique.

Considérons le cas d'un corps ferromagnétique. Pour  $T > T_C$ , la phase stable est une phase désordonnée. Cependant si  $T$  est proche de  $T_C$ , la phase ordonnée a une stabilité comparable et il apparaît, par fluctuations, des zones localement ordonnées, pendant un certain laps de temps. On est alors tenté de définir, physiquement, pour ces fluctuations, une longueur de corrélation  $\zeta$ , donnant leur taille moyenne et un temps de corrélation  $\tau$ , donnant leur durée de vie moyenne.

Cette longueur  $\zeta$  et ce temps  $\tau$  deviennent de plus en plus grands au fur et à mesure que l'on s'approche du point de transition, et ceci entraîne l'importance de plus en plus marquée des phénomènes critiques associés à ces fluctuations. La longueur de corrélation  $\zeta$  gouverne les phénomènes critiques statiques, tandis que le temps  $\tau$  gouverne les phénomènes critiques dynamiques.

Nous discuterons d'abord les phénomènes statiques. Tous les autres paramètres étant fixés,  $\zeta$  est fonction de la température  $T$ .  $\zeta(T)$  croît lorsque  $T$  s'approche du point critique  $T_C$  ( $T \rightarrow T_C$ ). La question cruciale qu'il faut poser est la suivante : diverge-t-elle à  $T_C$  ? Si  $\zeta \rightarrow \infty$  quand  $T \rightarrow T_C$ , le régime de fluctuations se développe complètement près de  $T_C$ ; si ce n'est pas le cas, le régime avorte, la transition de phase se produisant prématurément. Cette classification recouvre très largement la classification à la Landau pour l'ordre des transitions. Si la transition est du second ordre à la Landau (pas de saut du paramètre d'ordre), la longueur de corrélation diverge à  $T_C$ , et il y a un régime de fluctuations complètement développé. Si la transition est du premier ordre à la Landau (saut du paramètre d'ordre), en règle générale, la longueur de corrélation est finie à  $T_C$ , et il y a avortement, plus ou moins prématuré, du régime de fluctuations. Il y a toutefois quelques cas particuliers où la correspondance entre classifications ne s'applique pas strictement : en fait, du point de vue de l'étude des phénomènes critiques, la classification la plus intéressante est celle fondée sur le comportement de la longueur de corrélation.

On peut distinguer deux types de mesures :

- les mesures thermodynamiques déterminant des grandeurs macroscopiques : chaleur spécifique, aimantation, susceptibilité uniforme, etc ...
- les mesures déterminant des grandeurs liées aux corrélations microscopiques entre différents points, telles que la fonction d'auto-corrélation du paramètre d'ordre  $\Gamma(r, t) = \langle m(r, t) m(0, 0) \rangle$ ,  $t = \frac{T - T_C}{T_C}$  ou des fonctions de corrélation d'ordre supérieur. Les expériences de diffusion de rayons X, de neutrons, etc. apportent des informations directes sur  $\Gamma(q, \omega)$  transformée de Fourier de  $\Gamma(r, t)$ .

Les singularités des grandeurs thermodynamiques et des fonctions de corrélations ont même origine physique dans le développement des fluctuations critiques. La connection entre les comportements de ces deux types de grandeurs est assurée par le théorème de fluctuation - dissipation.

Les propriétés critiques statiques concernent les grandeurs thermodynamiques et les fonctions de corrélation prises en temps égaux. Les propriétés critiques dynamiques comprennent les dépendances en temps (ou en fréquence) des fonctions de corrélation.

## 6.2.2 Exposants critiques et universalité

On observe au voisinage d'un point critique (donc dans le cas d'une transition du deuxième ordre) des comportements singuliers. Chaque grandeur thermodynamique  $A$  comprend, en règle générale, une partie régulière, qui est continue à la transition, et une partie singulière, qui se comporte en lois de puissance avec des exposants non nécessairement entiers.

$$A(T) = A_{reg}(T) + A_{sing}(T) \quad (1.14)$$

$$A_{sing}(T) = \begin{cases} A_+ t^{-a} & \text{pour } t > 0 \\ A_- t^{-a'} & \text{pour } t < 0 \end{cases} \quad (1.15)$$

On dit que  $a$  et  $a'$  sont les exposants critiques de la grandeur  $A$ . De façon plus précise, si quand  $x$  tend vers  $0^+$

$$a = \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{\text{Ln}f(x)}{\text{Ln}x} \quad (1.16)$$

existe, on dit que  $a$  est un exposant critique de  $f$ .

**Tableau 1.2**– Définition et signification des exposants critiques [33]

Exposant	Définition	Signification
$\alpha$	$C_v(T) \sim  T - T_c ^{-\alpha}$	Chaleur spécifique
$\beta$	$M(T) \sim  T - T_c ^\beta$	Aimantation
$\gamma$	$\chi(T) \sim  T - T_c ^{-\gamma}$	Susceptibilité
$\delta$	$M(T_c, B) \sim  B ^{1/\delta}$	Aimantation <i>vs</i> champ magnétique à $T_c$
$\nu$	$\xi \sim  T - T_c ^{-\nu}$	Longueur de corrélation
$\eta$	$g(R) \sim R^{-(d-2+\eta)}$	Fonction de corrélation ( $d$ dimensionnalité)

C'est ainsi qu'en-dessous de  $T_c$ , pour  $t < 0$  le paramètre d'ordre démarre en  $(T_c - T)^\beta$ , et qu'au-dessus de  $T_c$ , par exemple, la chaleur spécifique varie en  $(T - T_c)^{-\alpha}$ , la longueur de corrélation en  $(T_c - T)^{-\nu}$ , et la susceptibilité relative au paramètre d'ordre en  $(T_c - T)^{-\gamma}$ . Les exposants,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  et d'autres comme montré dans le [tableau 1.2](#), définis au voisinage d'un point critique, appelés exposants critiques, sont mesurés expérimentalement avec une précision qui exclut le doute : les valeurs sont non nécessairement entières. Il s'agit d'un comportement singulier, parce qu'il implique que les grandeurs thermodynamiques et les fonctions de

corrélations sont des fonctions non analytiques, non régulières, de leurs variables (température, champ conjugué au paramètre d'ordre, distances, etc.).

Ces exposants ne sont pas tous indépendants, ils sont reliés entre eux par relations dites lois d'échelle comme indiqué sur la table suivante :

**Tableau 1.3**– Principales relations entre les exposants critiques [34]

$$\begin{aligned}\alpha &= 2 - \nu d \\ \beta &= 1/2\nu(d - 2 + \eta) \\ \gamma &= \nu(2 - \eta) \\ \delta &= d + 2 - \eta/d - 2 + \eta\end{aligned}$$

**Tableau 1.4**– Quelques modèles et leurs exposants critiques [35]

Modèles	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\nu$	$\eta$
<b>2D Ising</b>	0	1/8	7/4	15	1	1/4
<b>3D Ising</b>	0.1	0.33	5/4	4.8	0.63	0.04
<b>3D Heisenberg</b>	-0.12	0.36	1.39	4.8	0.71	0.04
<b>3D XY</b>	0.01	0.34	1.3	4.8	0.66	0.04

Il est intéressant de noter que le même ensemble d'exposants critiques peut être observé pour des systèmes physiques très différents, ce qui signifie qu'ils ne dépendent que de quelques paramètres fondamentaux, par exemple la dimensionnalité de l'espace et la symétrie du paramètre d'ordre. Ce phénomène est appelé "universalité". Un exemple de quelques classes d'universalité est donné dans le [tableau 1.4](#).

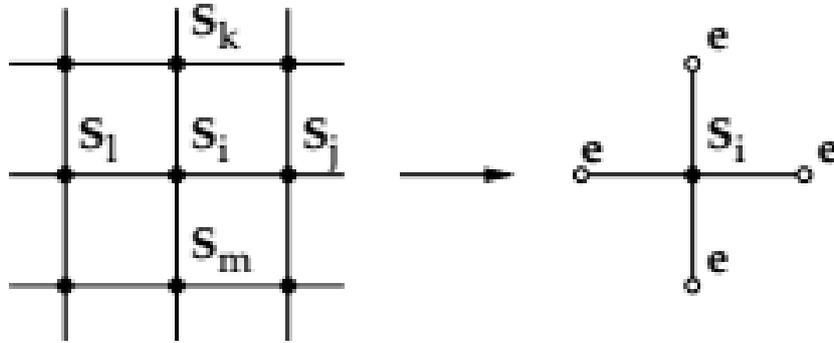
## 7 Les méthodes de la physique statistique

### 7.1 Méthodes approximatives

#### 7.1.1 Approximation du champ moyen

La méthode de champ moyen a été introduite par P. Weiss en 1907 [36], l'idée de base de cette méthode est de remplacer le problème des spins en interaction par un problème de spins indépendants placés dans un champ moyen produit par l'ensemble des autres spins. Cette approche est appelée modèle de particules indépendantes (appelé aussi champ moyen). En fait,

cette méthode consiste à découpler tous les spins ainsi de négliger toutes les fluctuations et à se concentrer sur un comportement moyen. Cependant, chaque site  $i$  du réseau est soumis à un champ moléculaire effectif créé par ses proches voisins, comme illustré à la figure. 1.12 dans le cas d'un réseau carrée.



**Figure. 1.12 :** Principe de l'approximation du champ moyen

En particulier, dans le modèle d'Ising (1.3), les termes de couplage de la forme  $S_i S_j$  seront remplacés par  $S_i \langle S_j \rangle$ . De plus, on suppose que la moyenne des spins  $\langle S_j \rangle = M$  est uniforme dans le réseau. Dans l'approximation du champ moyen, l'énergie du système est remplacée par des énergies des particules identiques, elle traduit l'interaction de chaque particule avec un champ moyen effectif. Dans ces conditions, l'hamiltonien pour le modèle d'Ising sans champ extérieur s'écrit :

$$H^{CM} = -J \sum_i z \langle S_j \rangle S_i + Cte = -JzM \sum_i S_i + Cte \quad (1.17)$$

Où  $z$  désigne le nombre de sites plus proches voisins entourant le site  $i$ . La constante est choisie de façon à égaliser les moyennes de l'Hamiltonien réel  $H$  et de  $H^{CM}$  afin de ne pas compter deux fois les interactions entre deux spins. En effet, on a

$$\langle H^{CM} \rangle = -NJzM^2 + Cte = H = -\frac{N}{2} JzM^2 \Rightarrow Cte = \frac{N}{2} JzM^2 \quad (1.18)$$

D'où

$$H^{CM} = -JzM \sum_i S_i + \frac{N}{2} JzM^2 \quad (1.19)$$

L'Hamiltonien devient donc égale à la somme de  $N$  termes indépendants. Par conséquent, la fonction de partition sera le produit de  $N$  fonctions de partition identiques, chacune faisant

référence à un unique spin placé dans le champ moyen exercé par ces voisins. La fonction de partition soit :

$$Z(M, T) = \left( 2e^{-1/2\beta zJM^2} \text{ch}(\beta zJM) \right)^2 \quad (1.20)$$

où  $z$  est le nombre des plus proches voisins,  $\beta = 1 / K_B T$  avec  $K_B$  constante de Boltzmann. Cette fonction de partition dépend en effet de la température  $T$  et de l'aimantation  $M$  si bien qu'elle est associée à l'énergie libre  $F(T, M)$ .

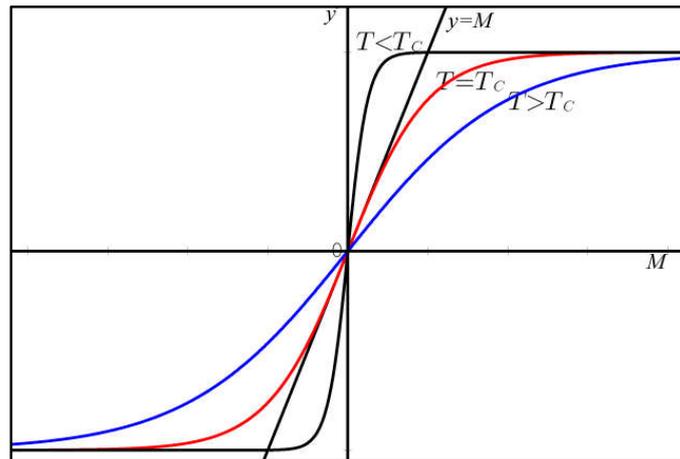
$$F(M, T) = N \left( \frac{Nz}{2} M^2 - K_B T \ln(2 \text{ch}(\beta zJM)) \right) \quad (1.21)$$

L'équilibre thermodynamique, caractérisé par le minimum de l'énergie libre  $F$ , conduit à l'équation fondamentale de la théorie de champ moyen fournissant l'équation d'état de la substance ferromagnétique :

$$\frac{\partial F}{\partial M} = 0 \Rightarrow M = th(\beta zJM) \quad (1.22)$$

Avec la condition d'équilibre stable :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \geq 0 \quad (1.23)$$



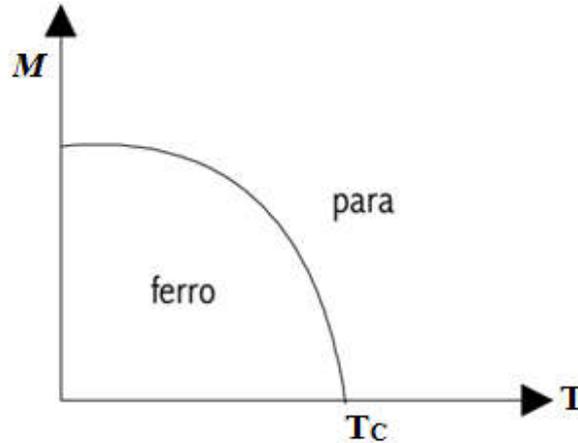
**Figure. 1.13 :** Résolution graphique de l'équation « auto-cohérente » donnant  $m$ , pour différentes températures ( $T$ )

L'équation (1.22) est la base de l'approximation du champ moyen, c'est une équation transcendante que l'on peut résoudre graphiquement. Ainsi, comme le montre la figure 1.13, les solutions de cette équation dépendent de la température et font apparaître l'existence d'une transition pour la température critique  $T_c$  définie par :

$$K_B T_C = zJ \quad (1.24)$$

Ainsi, si  $T > T_C$ , l'équation d'état admet une unique solution pour le paramètre d'ordre :  $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ .

A l'inverse, si  $T < T_C$ , l'équation d'état possède une solution nulle et deux solutions non nulles et opposées. Cependant, en utilisant la contrainte sur l'énergie libre, seule les deux solutions non nulles correspondent à une situation d'équilibre. L'évolution du paramètre d'ordre en fonction de la température est alors montrée sur la [figure 1.14](#) :



**Figure. 1.14** : Evolution de l'aimantation spontanée  $M$  en fonction de la température ( $T$ )

Ainsi, en champ extérieur nul, l'approximation de champ moyen prédit l'existence d'une transition de phase avec annulation du paramètre d'ordre au-dessus d'une température critique  $T_C$ . La transition sépare une phase basse température pour laquelle il existe une aimantation spontanée d'une phase haute température où il n'y a pas d'aimantation.

### 7.1.2 Méthode variationnelle hamiltonien d'essai et inégalité de Bogoliubov

L'idée de base de cette méthode consiste à remplacer l'Hamiltonien exact  $H$  par un autre Hamiltonien approché  $H_e$  appelé aussi hamiltonien d'essai [37]. Pour cela on réécrit d'abord la fonction de partition exacte en fonction de celle pour le Hamiltonien d'essai et d'une valeur moyenne  $\langle \dots \rangle_e$  avec  $H_e$  (c.à.d. avec le poids de Boltzmann  $\exp(-\beta H_e)$ ).

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H(s)} = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H_e(s)} e^{\beta H_e(s) - \beta H(s)} = Z_e \langle \exp \beta (H_e(s) - H(s)) \rangle_e \quad (1.25)$$

d'où

$$Z / Z_e = \left\langle \exp \beta (H_e(s) - H(s)) \right\rangle_e \quad (1.26)$$

avec

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H_e(s)} \quad , \quad \langle x \rangle_e = \frac{1}{Z_e} \sum_{\{s\}} x e^{-\beta H_e(s)} \quad (1.27)$$

La relation (1.26) est exacte ! On utilise maintenant le fait que la fonction exponentielle est convexe

$$\langle e^A \rangle_e \geq e^{\langle A \rangle_e} \quad (1.28)$$

Valable pour toute fonction  $A$  (réelle), donc en particulier pour  $A = \beta(H_e(s) - H(s))$

D'où l'équation (1.28) s'écrit :

$$\langle e^{-\beta(H-H_e)} \rangle_e \geq e^{\langle -\beta(H-H_e) \rangle_e} \quad (1.29)$$

Ou de façon équivalente :

$$\frac{Z}{Z_e} \geq e^{\langle -\beta(H-H_e) \rangle_e} \quad (1.30)$$

En prenant le logarithme on obtient une bonne approximation de l'énergie libre exacte  $F = -\beta^{-1} \ln(Z)$  en fonction de l'énergie libre approchée  $F_e = -\beta^{-1} \ln(Z_e)$

$$F \leq F_e + \beta \langle H - H_e \rangle_e \quad (1.31)$$

C'est l'inégalité de Gibbs-Bogoliubov [37], elle est à la base de la méthode variationnelle qui permet de déterminer l'énergie libre d'un système. Cette inégalité a été utilisée par Peierls pour le calcul approximatif de la fonction de partition de la fluctuation des spins. Une démonstration formelle de cette relation a été proposée par Feynman.

## 7.2 Le groupe de renormalisation dans l'espace réel (GR)

### 7.2.1 Définition de GR dans l'espace réel

On définit le groupe de renormalisation dans l'espace réel comme étant l'ensemble constitué par les transformations effectuées dans l'espace des paramètres de l'hamiltonien et qui laissent la fonction de partition du système invariante. Désignons par  $R_b$  la transformation du groupe de renormalisation, alors l'hamiltonien  $H$  se transforme en  $H'$  selon la relation :

$$R_b(H) = H' \quad (1.32)$$

On distingue deux étapes dans la transformation  $R_b$  :

- une contraction spatiale d'un facteur  $b$ , qui concerne l'aspect géométrique de la transformation.
- une action sur les variables de champ qui peut s'effectuer soit en éliminant certaines variables (comme dans le cas de la décimation), soit en les transformant en d'autres variables (comme dans le cas de la renormalisation par bloc).

Cette transformation obéit à la loi suivante :

$$R_{b_1} \cdot R_{b_2} = R_{b_2} \cdot R_{b_1} = R_{b_1 b_2} \quad (1.33)$$

avec  $b_1 b_2 \geq 1$ ,  $b_1$  et  $b_2$  sont des facteurs d'échelle.

Le groupe de renormalisation apparaît comme un semi-groupe abélien à un seul paramètre, car il est impossible de faire la construction de la transformation inverse de (1.32).

On a réduit le nombre de degrés de libertés dans la première étape. Si  $N$  et  $N'$  sont respectivement le nombre de particules du système (qui est supposé fini) avant et après la renormalisation, on a :

$$\frac{N}{N'} = b^d \quad (1.34)$$

où  $d$  est la dimension du système et  $b$  le facteur d'échelle de la transformation. La procédure de renormalisation est itérative, essentiellement. On applique à chaque étape les deux transformations précédentes, on change les caractéristiques du système et on revient ensuite à un système similaire au système de départ. En répétant cette procédure successivement, on obtient finalement un système dont la longueur de corrélation est du même ordre de grandeur que la distance (c'est le pas du réseau dans le cas d'un réseau hypercubique) entre les particules formant le réseau initial. L'énergie libre du système subit une transformation par le changement d'échelle suivant :

$$f(H') = b^d f(H) \quad (1.35)$$

La succession d'hamiltoniens que l'on obtient à la suite du processus de réduction du nombre de degrés de liberté est visualisée comme une trajectoire dans l'espace des paramètres, dont la température, les constantes de couplage et les champs extérieurs. On associe à chaque point de l'espace des paramètres

un hamiltonien. Il faut utiliser un espace des paramètres suffisamment grand pour contenir les trajectoires des points représentatifs.

## 7.2.2 Equation du GR dans l'espace des paramètres de l'Hamiltonien

Le phénomène de transition de phases est un processus qui est essentiellement collectif, ceci s'expliquant par la présence d'interactions entre les différents sous-systèmes qui constituent le réseau global. On peut exprimer l'Hamiltonien  $H$  en termes de ces interactions en plus des champs extérieurs éventuels. Autrement dit, il est possible de faire la paramétrisation de  $H$  en utilisant ces interactions. On peut donc exprimer explicitement la transformation (1.32) dans l'espace des paramètres de  $H$ , ce qui rend aisé le calcul direct des caractéristiques de la transition (température, ...).

Les interactions sont, dans les problèmes magnétiques, de type spin-spin et spin-champ magnétique externe. On notera  $\vec{K} = (K_1, K_2, \dots)$  un vecteur de l'espace des paramètres de l'Hamiltonien, où  $K_i = \beta j_i$  ( $\beta = \frac{1}{kT}$ ,  $k$  le facteur de Boltzmann, dans l'expression de  $H$ ,  $\beta$  est absorbé) désigne une interaction réduite particulière du système. Si toutes les interactions possibles dans le système sont contenues dans  $H$ , après renormalisation  $\vec{K}$  se transforme en  $\vec{K}'$  de sorte que :

$$\vec{K}' = (K_1', K_2', \dots) \quad (1.36)$$

On écrit alors l'hamiltonien renormalisé comme étant une fonction des interactions renormalisées  $K_i'$  et des spins renormalisés  $S_i'$  :

$$H' = H'(\vec{K}', S_i', \dots) \quad (1.37)$$

avec  $i = 1, \dots, N'$  et  $S_i'$  désigne un spin du système renormalisé placé au site  $i$  du nouveau système. L'équation du groupe de renormalisation s'écrit :

$$\exp\{-G + H'(S')\} = \text{Tr}_{\{S\}} P(S', S) \exp\{-H(S)\} \quad (1.38)$$

Où  $G$  est une constante qui est indépendante des spins  $S'$ ,  $P(S', S)$  est le facteur poids statistique qui dépend des spins  $S$  et  $S'$ , et  $\text{Tr}_{\{S\}}$  désigne la trace sur les spins. Le choix du facteur poids associé à la transformation du groupe de renormalisation est restreint par l'invariance de la fonction de partition. En effet, le système initial à  $N$  spins a pour fonction de partition :

$$Z_N = T r_{\{S\}} \exp - H(S) \quad (1.39)$$

tandis que celle du système renormalisé est :

$$Z_{N'} = T r_{\{S'\}} \exp - \{G + H'(S')\} \quad (1.40)$$

La fonction de partition étant invariante par renormalisation, on a :  $Z_N = Z_{N'}$

Par utilisation de (1.38), on obtient :

$$T r_{\{S'\}} \exp - \{G + H'(S')\} = T r_{\{S\}} T r_{\{S'\}} P(S', S) \exp - H(S) \quad (1.41)$$

soit :

$$Z_{N'} = T r_{\{S'\}} T r_{\{S\}} P(S', S) \exp - H(S) \quad (1.42)$$

Et de (1.39) on tire donc :

$$\sum_{\{S'\}} P(S', S) = 1 \quad (1.43)$$

La fonction de partition étant définie positive, une condition supplémentaire impose que le facteur poids statistique soit un réel positif :

$$P(S', S) \succ 0 \quad (1.44)$$

pour tous spins  $S$  et  $S'$ .

L'utilisation de la constante  $G$  permet le calcul de l'énergie libre du système ainsi que de toutes ses grandeurs thermodynamiques. Si, en effet, on note  $\vec{K}^{(n)}$  les interactions renormalisées après  $n$  itérations, l'équation (1.42) donne :

$$\frac{1}{N^{(1)}} G^{(1)} + \frac{1}{N^{(n)}} \log Z_{N^{(n)}} = \frac{1}{N} \log Z_N \quad (1.45)$$

On obtient, après  $n$  itérations :

$$\frac{1}{N^{(n)}} G^{(n)} + \frac{1}{N^{(n)}} \log Z_{N^{(n)}} = \frac{1}{N^{(n-1)}} \log Z_{N^{(n-1)}} \quad (1.46)$$

Par sommation membre à membre de ces  $n$  équations, il vient

$$\sum_{p=1}^n \frac{1}{N^{(p)}} G^{(p)} = \frac{1}{N} \log Z_N - \frac{1}{N^{(n)}} \log Z_{N^{(n)}} \quad (1.47)$$

avec :

$$\frac{N^{(p)}}{N} = b^{-pd}, \quad p \in N \quad (1.48)$$

En faisant tendre  $n$  vers l'infini, on retrouve le point fixe et le deuxième terme du second membre de (1.47) devient négligeable à cause de sa dépendance en  $b^{-nd}$ , d'où l'expression de l'énergie libre par particule notée  $f$ :

$$f = -kT \sum_{p=1}^{\infty} \frac{N}{b^{pd}} G^{(p)} \quad (1.49)$$

De cette sorte, à partir de la connaissance des relations de récurrence (1.36), il est possible de calculer toutes les grandeurs thermodynamiques grâce au groupe de renormalisation.

En dérivant (1.49), on peut calculer l'entropie et la chaleur spécifique, ce qui montre que le groupe de renormalisation permet de déterminer l'ordre d'une transition de phases.

### 7.2.3 Points fixes et linéarisation de la transformation du groupe de renormalisation

Un point fixe de l'équation du groupe de renormalisation se définit, dans l'espace des paramètres de l'hamiltonien, comme la solution de

$$\vec{K}' = \vec{K} = \vec{K}^* \quad (1.50)$$

avec  $K^* = (K_1^*, K_2^*, \dots)$  le point fixe.

On peut mettre (1.50) de manière équivalente sous la forme :

$$K'_\alpha(K) = K_\alpha = K_\alpha^* \quad (1.51)$$

Afin de pouvoir développer au voisinage de  $\vec{K}^*$ , on doit avoir l'assurance que  $K'_\alpha$  est une fonction régulière des paramètres  $K_\alpha$ . La notion de point fixe est d'une importance capitale dans le groupe de renormalisation, car elle permet de connaître les phases possibles et les surfaces critiques qui séparent les diverses phases. On distingue deux types de points fixes :

#### i) les points fixes triviaux ou stables

Après  $n$  itérations (1.36), chacun des points de l'espace des paramètres se déplacent vers l'un des points fixes stables existants. Les points  $\vec{K}$  qui convergent au même point fixe stable  $\vec{K}^*$  donné forment un ensemble de points appartenant au même domaine déterminant une phase bien précise.

## ii) les points fixes non triviaux ou instables

Pour qu'une transition de phases existe, il faut qu'il y ait au moins deux points stables – autrement dit deux phases - ; il existe alors des points fixes instables – non triviaux - situés sur les différentes séparations des phases. Les singularités des grandeurs thermodynamiques et le comportement critique du système sont déterminés par ces points.

On effectue la formulation mathématique de ce problème de stabilité des points de la manière suivante :  $\vec{K}^*$  étant un point fixe non trivial solution de l'équation (1.44) et  $\vec{K}$  un point de l'espace des paramètres au voisinage de  $\vec{K}^*$  (c'est-à-dire que  $\vec{K}$  est placé près de la séparation entre deux phases données), on peut alors effectuer un développement de (1.50) en puissances de  $\vec{K} - \vec{K}^*$  supposé infinitésimal, soit :

$$K'_\alpha = K_\alpha^* + \sum_\beta T_{\alpha\beta}^* (K_\beta - K_\beta^*) \quad (1.52)$$

où l'on a posé

$$T_{\alpha\beta}^* = \frac{1}{\beta!} \left\{ \frac{\partial K'_\alpha}{\partial K_\beta} \right\}_{\vec{K}=\vec{K}^*} \quad (1.53)$$

On a ainsi linéarisé la transformation du groupe de renormalisation au voisinage d'un point trivial. Soit  $e_j$  un vecteur propre à gauche de  $T_{\alpha\beta}^*$ , de valeur propre  $\lambda_j$ ; on a :

$$\left\{ \lambda_j \cdot (e_j)_\beta \right\} = \sum_\alpha (e_j)_\alpha T_{\alpha\beta}^* \quad (1.54)$$

Il convient d'introduire les coordonnées normales pour simplifier la forme de (1.52).

On effectue donc le changement :

$$e_j \rightarrow u_j = \sum_\alpha (e_j)_\alpha (K_\alpha - K_\alpha^*) \quad (1.55)$$

C'est la projection du vecteur  $\vec{K} - \vec{K}^*$  sur le vecteur gauche  $e_j$ .  $u_j$  est appelé champ d'échelle et a la même valeur propre  $\lambda_j$ ; en effet, par itération  $u_j$  se transforme en  $u'_j$  suivant :

$$u'_j = \sum_\alpha (e_j)_\alpha (K'_\alpha - K_\alpha^*) \quad (1.56)$$

L'équation (1.52) donne :

$$\begin{cases} u'_j = \sum_{\alpha} (e_j)_{\alpha} \sum_{\beta} T_{\alpha\beta}^* (K_{\beta} - K_{\beta}^*) \\ u'_j = \sum_{\beta} \left\{ \sum_{\alpha} (e_j)_{\alpha} T_{\alpha\beta}^* \right\} (K_{\beta} - K_{\beta}^*) \\ u'_j = \lambda_j \sum_{\beta} (e_j)_{\beta} (K'_{\beta} - K_{\beta}^*) \end{cases} \quad (1.57)$$

soit :

$$u'_j = \lambda_j u_j \quad (1.58)$$

Suivant les valeurs de  $\lambda_j$ , on distingue trois cas de champ d'échelle :

**i)** si  $|\lambda_j| > 1$ , on dit que le champ d'échelle  $u_j$  est pertinent, le point fixe  $\vec{K}^*$  est alors instable dans la direction déterminée par  $u_j$  dans l'espace des paramètres.

**ii)** si  $|\lambda_j| < 1$ , on dit que le champ d'échelle  $u_j$  est non pertinent et le point fixe  $\vec{K}^*$  est stable dans la direction de  $u_j$ .

**iii)** si  $|\lambda_j| = 1$  est marginal.

On considère deux facteurs  $b_1$  et  $b_2$  (supérieurs à 1) et soient  $T_{b_1}^*$  et  $T_{b_2}^*$  les transformations linéaires (données par (1.52) de facteurs respectivement  $b_1$  et  $b_2$ ). En appliquant successivement ces deux transformations à un champ d'échelle  $u_j$ , on peut écrire :

$$T_{b_1}^* \cdot \{ T_{b_2}^* u_j \} = \lambda_j(b_1) \cdot \lambda_j(b_2) \cdot u_j \quad (1.59)$$

où  $\lambda_j(b_i)$  est la valeur propre associée à  $u_j$  pour la transformation  $T_{b_i}^*$ . On a aussi :

$$T_{b_1 b_2}^* u_j = \lambda_j(b_1 b_2) u_j \quad (1.60)$$

La relation (4) impose alors :

$$\lambda_j(b_1) \lambda_j(b_2) = \lambda_j(b_1 b_2) \quad (1.61)$$

Il existe alors un réel  $\gamma_j$  tel que

$$\lambda_j(b) = b^{y_j} \quad (1.62)$$

La stabilité du point fixe est déterminée par les valeurs des  $y_j$ . Si  $y_j < 0$ ,  $y_j > 0$  ou  $y_j = 0$ , le point fixe sera dit respectivement stable, instable ou marginal dans la direction  $u_j$ .

#### 7.2.4 Champs pertinents et non pertinents

Généralement, le nombre de constantes de couplage à traiter est très grand, soient  $K_1, K_2, K_3, \dots$  ces constantes. On peut donc écrire l'énergie libre selon la relation :

$$f(K_1, K_2, \dots) = G(K_1, K_2, \dots) + \frac{1}{b^d} f(K'_1, K'_2, \dots) \quad (1.63)$$

où :

$$K'_\alpha = K'_\alpha(K_1, K_2, \dots) \quad \text{et} \quad \alpha = 1, 2, \dots \quad (1.64)$$

En supposant l'existence d'un point fixe  $K^* = (K_1^*, K_2^*, \dots)$ , on obtient :

$$K'_\alpha(K^*) = K_\alpha^* \quad (1.65)$$

En posant  $\delta K_\alpha = K_\alpha - K_\alpha^*$ , lorsque les  $\delta K_\alpha$  sont petits, la linéarisation de la relation (1.64) au voisinage du point fixe  $K^*$  donne :

$$\delta K'_\alpha = \sum_{\beta} (R_{\alpha\beta})_{K^*} \delta K_\beta \quad (1.66)$$

Il n'est pas certain que les valeurs propres de la matrice  $(R_{\alpha\beta})_{K^*}$ , qui sont directement en relation avec les exposants critiques, soient réels, étant donné que cette matrice n'est pas symétrique. Partant de l'équation (1.66), il serait commode d'introduire des coordonnées normales en écrivant :

$$\sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^i \delta K'_{\alpha} = \sum_{\alpha, \beta} \Psi_{\alpha}^i (R_{\alpha\beta})_{K^*} \delta K_{\beta} \quad (1.67)$$

En désignant par  $\Psi_{\alpha}^i$  le vecteur propre à gauche de  $R_{\alpha\beta}$  et par  $\lambda_i$  la valeur propre associée, on peut écrire :

$$\sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^i (R_{\alpha\beta})_{K^*} = \lambda_i \Psi_{\beta}^i \quad (1.68)$$

soit :

$$\sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^i \delta K_{\alpha}^i = \lambda_i \sum_{\beta} \Psi_{\beta}^i \delta K_{\beta} \quad (1.69)$$

avec  $\sum_{\beta} \Psi_{\beta}^i \delta K_{\beta}$  qui est la projection du vecteur  $\vec{K} - \vec{K}^*$  sur le vecteur propre  $\Psi_{\alpha}^i$  ; c'est cette projection qui constitue la coordonnée normale, encore appelée champ d'échelle, notée  $u_i$ . Lorsque la valeur du facteur de renormalisation  $\lambda_i$  de la transformation du champ d'échelle  $u_i$  est telle que  $|\lambda_i| > 1$ , le champ est dit pertinent. Dans le cas où  $|\lambda_i| < 1$ , le champ est non pertinent, et il est marginal lorsque  $|\lambda_i| = 1$ , ce qui correspond respectivement à  $y_i > 0$ ,  $y_i < 0$  et  $y_i = 0$ .

Le point fixe donné par la relation (1.65) correspond à  $u_i = 0$ , quel que soit  $i$  et on nomme domaine d'attraction de ce point l'ensemble des points qui échouent sur lui. Cet ensemble définit une hypersurface dans l'espace des paramètres d'interactions. La dimension de cette hypersurface, aussi appelée surface critique, est de  $n-m$  avec  $n$  le nombre d'interactions et  $m$  le nombre de variables pertinentes.

Afin de mieux saisir la signification des variables pertinentes et non pertinentes, on suppose que l'exposant  $y_1$  est positif et que tous les autres sont négatifs. En faisant tendre  $b$  vers l'infini, on remarque que  $\delta K'$  tend vers zéro lorsque  $\Psi_1 = 0$ , tandis qu'il n'en est pas ainsi si  $\Psi_1 \neq 0$ . Le point  $K$  ne tend pas vers le point fixe  $K^*$  si un champ pertinent n'est pas nul, et il est alors impossible d'observer les phénomènes critiques associé à ce point. On voit ainsi que pour observer ces phénomènes critiques, certaines conditions, appelées conditions de criticalité, doivent être satisfaites, ce qui se traduit par l'annulation des champs pertinents. Pour étudier l'influence des champs marginaux, qui, dans l'approximation linéaire déplacent le point fixe, il faut prendre en compte les termes d'ordres plus élevés.

Généralement, les champs pertinents sont peu nombreux. Les conditions de criticalité pour une transition du second ordre sont l'annulation du champ  $h$ , conjugué du paramètre d'ordre, et que l'écart de température soit proportionnel à  $\delta K$ . La symétrie du système est brisée par le champ  $h$ , alors qu'elle est respectée par le champ  $\delta K$ . On constate ainsi que les champs pertinents n'ont pas les mêmes propriétés de symétrie. Il existe d'autres champs qui brise la symétrie, en dehors du champ  $h$ , qu'il est toujours possible de définir et dont l'annulation constitue une condition de criticalité devant nécessairement être satisfaite. Une perturbation anisotrope introduite dans un système isotrope est un champ pertinent qui peut

provoquer l'apparition de nouveaux points fixes, modifiant ainsi le comportement critique du système. Les champs pertinents entraînent l'instabilité du point fixe. Les points fixes associés aux transitions de phases de deuxième ordre sont une fois instable en l'absence de champs brisant la symétrie, tandis que ceux associés aux points tricritiques sont deux fois instables. Le degré d'instabilité des points fixes augmente en présence de champs pertinents. Les exposants  $y_i$  ou les valeurs propres  $\lambda_i$  permettant de classer les champs et les variables conjugués sont en relation avec les exposants critiques.

La partie singulière de l'énergie libre par unité de volume, vu que l'hamiltonien effectif est déterminé par les champs  $u_i$  au voisinage du point fixe  $K^*$ , est fonction de ces champs :  $f(u_1, u_2, \dots)$ . En effectuant une transformation du groupe de renormalisation, on obtient :

$$f_{\text{sing}}(u_1, u_2, \dots) = b^{-d} f_{\text{sing}}(b^{y_1} u_1, b^{y_2} u_2, \dots) \quad (1.70)$$

Si l'on représente l'écart de température  $t$  par  $u_1$ , on obtient en choisissant  $b$  tel que  $bt = 1$  :

$$f_{\text{sing}}(t, u_2, \dots) = t^{d/y_1} f_{\text{sing}}(1, t^{-\Delta_2} u_2, \dots) \quad (1.71)$$

où  $\Delta_2 = y_2/y_1$ . Lorsque  $\Delta_2 < 0$  et  $t \rightarrow 0$ , ce qui implique  $t^{-\Delta_2} \rightarrow 0$ , alors il vient :

$$f_{\text{sing}}(t, \dots) \sim t^{d/y_1} \quad (1.72)$$

Etant donné que  $f_{\text{sing}}(t, \dots)$  se comporte au voisinage du point critique ( $t = 0$ ) selon la loi de puissance  $t^{2-\alpha}$ , on en déduit que :

$$2-\alpha = d/y_1 \quad (1.73)$$

Dans ce cas encore, la différence entre champs pertinents et champs non pertinents est claire. Lorsque  $u_2$  est un champ pertinent, alors  $y_2$  est positif ; puisque  $y_1$  est aussi positif, il en sera de même pour  $\Delta_2$ . Ainsi, si  $t \rightarrow 0$ , on aura  $t^{-\Delta_2} \rightarrow \infty$ . Il s'avère donc nécessaire d'annuler le champ  $u_2$  pour observer les phénomènes critiques.

Concernant la longueur de corrélation, en tenant compte de sa formule de transformation

$\xi' = b^{-d} \xi$ , on peut écrire :

$$\xi(t) = b \xi(b^{y_1} t) \quad (1.74)$$

On déduit de cette relation que :

$$\xi \sim t^{-1/\gamma_1} \quad (1.75)$$

ce qui veut dire

$$\gamma_1 = 1/\nu \quad (1.76)$$

Par combinaison de ce résultat avec celui établi pour l'exposant critique  $\alpha$ , on retrouve la loi d'échelle :

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (1.77)$$

Ainsi, il est possible de justifier les lois d'échelle dans le cadre du groupe de renormalisation.

### 7.2.5 Les lois de similarité

Les méthodes de renormalisation dans l'espace réel permettent, parmi plusieurs succès, de retrouver les lois d'échelles reliant les divers exposants critiques. On écrit l'énergie libre du système de spins comme une fonction des champs d'échelle  $u_j$ , obéissant à la transformation déduite de (1.49) :

$$f(\vec{K}) = G(\vec{K}) + \frac{1}{b^d} f(\vec{K}') \quad (1.78)$$

Nous supposons d'abord qu'il existe un seul champ d'échelle  $u_1$ , et soit  $a_1$  l'exposant associé à l'énergie libre défini par

$$f(u_1) \approx A |u_1|^{a_1} \quad (1.79)$$

où  $A$  est une constante. Il suffit, pour montrer l'existence d'un lien entre les exposants critiques des grandeurs thermodynamiques et les valeurs propres de la transformation  $T_{\text{eff}}^*$ , de le montrer pour le cas de l'énergie libre. En effet, par le changement d'échelle (1.56), on obtient :

$$f(u_1') = A |\lambda_1|^{a_1} |u_1|^{a_1} \quad (1.80)$$

implique que  $b^d \cdot A |u_1|^{a_1} = A |\lambda_1|^{a_1} |u_1|^{a_1}$ , soit :

$$d = a_1 \gamma_1 \quad (1.81)$$

La relation (1.81) fait le lien entre la transformation du groupe de renormalisation au point fixe non trivial – il s'agit de  $\gamma_1$  – et une caractéristique du comportement critique de l'énergie libre- $a_1$ -. On pourrait donc, par dérivation de (1.79, 80), faire la même chose pour toutes les grandeurs thermodynamiques.

Il est possible de montrer aussi que si  $f$  dépend de deux champs d'échelles  $u_1$  et  $u_2$ , une relation analogue à (1.81) existe, soit :

$$d = a_1 y_1 + a_2 y_2 \quad (1.82)$$

où  $a_1$  et  $a_2$  désignent les exposants relatifs successivement à  $u_1$  et  $u_2$  de l'énergie libre. On remarque à partir de la relation (1.80) que  $u_1$  est un champ pertinent. En effet, si à la transition  $u_1$  tend vers zéro, la condition pour que l'énergie libre soit finie est que  $a_1 > 0$ . La relation (1.81) impose alors que  $y_1 > 0$ , autrement dit le champ d'échelle associé à l'exposant critique  $a_1$  doit être pertinent. Il en va de même pour  $a_1$  et  $a_2$  donnés par l'équation (1.82)

On désigne par  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  les valeurs propres associées respectivement aux champs d'échelles  $u_1$  et  $u_2$ . L'énergie libre  $f$  obéit à la loi d'échelle suivante :

$$f(u_1', u_2') = b^d f(u_1, u_2) \quad (1.83)$$

avec :

$$\begin{cases} u_1' = \lambda_1 u_1 = b^{y_H} u_1 \\ u_2' = \lambda_2 u_2 = b^{y_T} u_2 \end{cases} \quad (1.84)$$

La susceptibilité magnétique est définie par  $\chi = \frac{\partial^2 f}{\partial u_1^2}$  tel que  $u_1$  désigne le champ d'échelle associé au champ externe ;  $u_2$  est le champ d'échelle associé à la température. En dérivant (1.83) deux fois par rapport à  $u_2$  on trouve :

$$\left( \frac{\partial u_1'}{\partial u_1} \right)^2 \frac{\partial^2 f(u_1', u_2')}{\partial u_1'^2} = b^d \frac{\partial^2 f(u_1, u_2)}{\partial u_1^2} \quad (1.85)$$

En utilisant (1.41) et (1.83), on trouve :

$$b^{2y_H} (u_2')^{-\gamma} = b^d (u_2)^{-\gamma} \quad (1.86)$$

avec  $\gamma$  l'exposant critique de la susceptibilité magnétique

Soit :

$$b^{-2y_H} b^{-\gamma y_T} (u_2)^{-\gamma} = b^d (u_2)^{-\gamma} \quad (1.87)$$

c'est-à-dire que :

$$\gamma = \frac{2y_H - d}{y_T} \quad (1.88)$$

De la même manière on pourrait relier les exposants critiques  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\delta$  respectivement de la chaleur spécifique, l'aimantation et du champ magnétique ; on trouve :

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_T}, \quad \beta = \frac{(d - y_H)}{y_T}, \quad \delta = \frac{y_H}{(d - y_H)} \quad (1.89)$$

Les relations (1.88) et (1.89) entraînent immédiatement que :

$$2\beta + \alpha + \gamma = 2 \quad \text{et} \quad \alpha + \beta(1 + \gamma) = 2 \quad (1.90)$$

qui sont des lois d'échelles relatives aux exposants critiques.

## 7.2.6 Quelques méthodes de renormalisation dans l'espace réel

### 7.2.6.1 La renormalisation par décimation

Les équations du groupe de renormalisation (1.38) laissent une certaine liberté pour le choix du poids  $P(s', s)$  et la transformation des variables de champ. La renormalisation par décimation est une méthode de nature récursive qui permet de réaliser une succession de transformations d'échelles sur un réseau périodique  $d$ -dimensionnel. Elle consiste à réduire le nombre de spins interagissant entre eux par élimination de certaines variables. Le schéma général de la décimation [38] peut être formulé comme suit :

Considérons un réseau périodique  $\Omega$  à  $d$  dimensions sur les sites duquel sont placés des spins. Supposons qu'il est possible de diviser  $\Omega$  en  $k$  sous-réseaux interpénétrants et ayant la même symétrie que  $\Omega$  tel que :

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^{i=k} \omega_i \quad (1.91)$$

$\omega_i$  désigne l'un des sous-réseaux de  $\Omega$ .

Le réseau renormalisé sera constitué d'un seul sous-réseau  $\omega_i$ , les variables de champ n'étant pas affectées par cette transformation. Si on désigne par  $S'_i$  un spin du réseau

renormalisé placé au site  $i$ , et  $S_i$  un spin placé au site  $i$  de réseau initial alors la renormalisation par décimation pour les variables du champ impose :

$$S'_i = S_i \quad (1.92)$$

Ce choix de la renormalisation des spins s'exprime au niveau du facteur poids par :

$$P(S', S) = 1 \quad (1.93)$$

pour tout  $S$  et  $S'$ .

En désignant par  $\{s_{\omega_i}\}$  une configuration donnée des spins de  $\omega_i$  et  $H\{s_{\omega_i}\}$  l'Hamiltonien associé, les relations (1.38) et (1.40) permettent d'écrire l'équation du groupe de renormalisation sous la forme :

$$Tr_{\{S_{\omega_i}\}} \exp\left(H(S_{\omega_i}, S_{\omega_i \neq 1})\right) = \exp\left(G + H'(S_{\omega_i})\right) \quad (1.94)$$

### 7.2.6.2 La renormalisation variationnelle

La renormalisation variationnelle est une méthode de renormalisation qui a été construite en se basant sur un principe variationnel. Nous allons considérer un système décrit par un Hamiltonien  $H$ ; l'introduction du paramètre variationnel  $\Delta(x)$  se fait en adoptant le changement suivant :

$$H \rightarrow H + \Delta(x) \quad (1.95)$$

Ainsi, la fonction de partition devient à son tour paramétrisée, et s'exprime comme suit :

$$\bar{Z}(\lambda, x) = Tr \exp(H + \lambda \Delta(x)) \quad (1.96)$$

$\lambda$  est un réel, et le facteur  $(-\beta)$  est absorbé.

Comme l'Hamiltonien est invariant par translation, on obtient donc :

$$\left. \frac{d\bar{Z}(\lambda, x)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = Tr(\Delta(x) \exp H) = 0 \quad (1.97)$$

Une seconde dérivation donne :

$$\left\{ \frac{d^2 \bar{Z}(\lambda, x)}{d\lambda^2} \right\}_{\lambda=0} = \text{Tr}(\Delta^2(x) \exp(H)) > 0 \quad (1.98)$$

Ceci montre que la fonction de partition  $Z = \bar{Z}(0, x) = \text{Tr}(e^H)$  correspond à un minimum de  $\bar{Z}(\lambda, x)$  ; en particulier, nous avons :

$$\bar{Z}(1, x) = \text{Tr} \exp(H + \Delta(x)) > Z \quad (1.99)$$

Autrement dit, la meilleure façon de choisir le paramètre  $\Delta(x)$ , et donc  $x$ , est de minimiser la fonction de partition d'après (1.99). Une autre démarche équivalente consisterait à maximiser l'énergie libre  $F = -Ln\bar{Z}(1, x)$ .

On fait dépendre l'hamiltonien  $H$  d'un paramètre  $x$  dans le but d'améliorer la précision des relations de récurrence ; de cette sorte, les interactions renormalisées deviennent des fonctions du paramètre  $x$ , en plus des paramètres d'interactions du réseau initial, soit :

$$K'_\alpha = f_\alpha(\vec{K}, x) \quad (1.100)$$

L'expression de l'énergie libre prend la forme :

$$f(\vec{K}, x) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{G^{(n)}(\vec{K}, x)}{b^{nd}} \quad (1.101)$$

On fait l'évaluation de  $f$  en faisant varier  $x$ , et cela pour chaque valeur des interactions  $K'_\alpha$ . Si  $x_0(K)$  est la valeur de  $x$  pour laquelle l'énergie est maximale, alors (1.100) devient :

$$K'_\alpha = f_\alpha(\vec{K}, x_0) \quad (1.102)$$

De manière générale,  $\Delta(x)$  est un réarrangement des liaisons dans un réseau donné.

### 7.2.6.3 La renormalisation de Migdal-Kadanoff

A présent nous allons traiter une méthode de renormalisation qui nous sera d'une très grande utilité par la suite ; c'est la renormalisation dite de Migdal-Kadanoff. En effet, en 1975, Migdal [39, 40] a proposé une méthode de renormalisation qui présente plusieurs avantages sur les autres méthodes de renormalisation dans l'espace réel. Cette méthode est applicable à des systèmes ayant n'importe quel type de symétrie interne, y compris les symétries de jauge locales et globales. Elle offre en plus de bons résultats pour une dimensionnalité de l'espace physique

$d$  proche de la dimensionnalité critique inférieure, au-dessous de laquelle on n'observe plus de transition. La méthode présentée par Migdal donne des relations de récurrence pour des valeurs entières du facteur d'échelle  $b$  ; il est cependant possible de la généraliser en faisant une extension aux valeurs non entières de  $b$ . Ainsi, en faisant tendre  $b$  vers 1, on transforme la renormalisation discrète en une renormalisation différentielle, dont l'application aux systèmes autoduaux (modèles d'Ising et de Potts à  $d = 2$ ) donne les résultats exacts de la température critique.

En 1976, Kadanoff [41] revoit et reformule la méthode de Migdal en utilisant la décimation et l'approximation du déplacement des potentiels, parvenant ainsi à obtenir des expressions similaires à celles de Migdal, mais qui sont anisotropes dans l'espace des couplages. Pour établir les équations de récurrence Migdal-Kadanoff, on réalise une contraction par un facteur d'échelle  $b$  suivant chacune des  $d$  directions cartésiennes, ce qui provoque une contraction de volume  $b^d$ . Au cours de chaque contraction, on procède au déplacement des liaisons perpendiculaires à la direction de contraction, et on décime ensuite dans cette dernière direction.

La renormalisation Migdal-Kadanoff est une méthode variationnelle basée sur une manière particulière de faire le choix du paramètre défini par la relation (1.95). On peut écrire l'équation du groupe de renormalisation sous la forme :

$$\exp H'(S') = Tr_{\{S\}} \exp(U(S', S) + H) \quad (1.103)$$

Pour introduire le paramètre variationnel  $\Delta(S', S)$ , on procède de la manière suivante :

$$\exp H'(S') = Tr_{\{S\}} \exp[U(S', S) + H(S) + \Delta(S', S)] \quad (1.104)$$

$H'(S')$  désigne l'Hamiltonien renormalisé approché.  $\Delta(S', S)$  est supposé faible et sera choisi avec la condition (1.97). La relation (1.97) montre que l'énergie libre approchée  $F'$  est inférieure à l'énergie réelle  $F$  et l'on choisira  $\Delta$  de telle sorte que  $F$  soit maximale. On considère un ensemble de variables locales  $a_r^i(S', S)$ ,  $i=1,2,\dots,m$ . On peut alors choisir  $\Delta$  sous la forme :

$$\Delta(S', S) = \sum_i \sum_r q^i(r) a_r^i(S', S) \quad (1.105)$$

Une condition supplémentaire est nécessaire pour que (68) demeure valide ; il faut donc que :

$$\sum_r q^i(r) = 0 \quad (1.106)$$

Pour faire l'interprétation géométrique de ces équations, on va supposer que le couplage local  $a_r^i(S', S)$  soit une interaction entre premiers voisins pour un système bidimensionnel, soit

$a_r^i(S', S) = S_{xy} S_{x+1y}$  dans la direction des  $x$ . La relation (1.106) révèle que pour chaque  $r$  tel que  $q_i(r) > 0$  il existe nécessairement une position  $r'$  telle que  $q_i(r') < 0$ . Autrement dit, l'intensité de l'interaction est renforcée au point  $r$  et diminuée au point  $r'$ .

Donc la méthode de renormalisation de Migdal-Kadanoff consiste en un déplacement des potentiels de  $r$  en  $r'$ , sans changement dans l'importance d'un type d'interaction. C'est une opération qui se fait avec un changement d'échelle, c'est-à-dire une décimation. Chaque fois qu'on effectue une décimation dans une direction  $x$ , on provoque un déplacement des potentiels dans la direction orthogonale  $y$  à  $x$ . L'opération inverse est possible. Ainsi, on distingue deux types de renormalisation de Migdal-Kadanoff suivant l'ordre  $XY$  ou  $YX$ .

Pour la transformation  $XY$  on fait d'abord une décimation de facteur  $b$  telle que

$$K_\alpha \rightarrow \tilde{K}_\alpha \quad (1.107)$$

On effectue ensuite un déplacement des  $b^{d-1}$  liaisons orthogonales à la direction de contraction spatiale, soit :

$$\tilde{K}_\alpha \rightarrow K'_\alpha = b^{d-1} \tilde{K}_\alpha \quad (1.108)$$

où  $d$  est la dimension du système.

$YX$  est la transformation inverse :

$$K_\alpha \rightarrow K_\alpha^d = b^{d-1} K_\alpha \quad (1.109)$$

$K_\alpha^d$  est la nouvelle interaction obtenue en se déplaçant sur  $(d-1)$  directions ; suivant la direction restante on fait une décimation :

$$K_\alpha^d \rightarrow K'_\alpha \quad (1.110)$$

Les relations de récurrence (1.108) et (1.110) auxquelles aboutissent les renormalisations de Migdal-Kadanoff ( $XY$ ) et ( $YX$ ) ne sont pas identiques.

### 7.3 Simulation de Monte-Carlo

Historiquement, la méthode de Monte Carlo était considérée comme une technique numérique basée sur le tirage de nombres aléatoires pour résoudre le modèle étudié. En 1953, dans un article de N. Metropolis *et al.* [42], les auteurs décrivent pour la première fois la technique de Monte Carlo appelée algorithme de Metropolis. Cet algorithme informatique a été cité en

science et en ingénierie comme l'un des 10 principaux algorithmes ayant "le plus grand impact sur le développement et la pratique de la science et de l'ingénierie au XXe siècle". Cette Méthode est basée sur des techniques d'échantillonnages statistiques, qui sont l'échantillonnage simple, et l'échantillonnage par importance.

### 7.3.1 Echantillonnage Simple

Cette technique consiste à générer un nombre  $N$  d'états microscopiques (configurations) d'une manière aléatoire. Dans le cas du modèle d'Ising cela revient à associer des valeurs +1 ou -1 aux spins du réseau. Soit  $A$  une grandeur physique et  $A_i$  sa valeur pour la configuration particulière du système  $i$ . La valeur moyenne de  $A$  est donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N A_i \exp(-\beta E_i)}{\sum_{i=1}^N \exp(-\beta E_i)} \quad (1.111)$$

Où  $\beta = 1/k_B T$ , et  $E_i$  l'énergie de la configuration  $i$ .

La précision sur la valeur moyenne de  $A$  augmenté avec l'augmentation de  $N$  (nombre de configurations générées) ; mais il y a une limite dûe au temps de calcul. Si on veut avoir une bonne précision, on doit augmenter le nombre de configurations  $N$ . En pratique le nombre de configurations qu'il faut générer pour avoir de bonne statistique nécessite de trop longs temps de calcul. Un autre problème physique majeur qui est plus important que le précédent est que cette technique génère les configurations avec une probabilité égale pour toutes les températures, et par conséquent, ces configurations ne correspondent pas aux états d'équilibres à la température considérée. Ceci conduit à faire une grande erreur sur les sommes. Les zones de l'espace des phases où le terme de Boltzmann est important sont échantillonnées de la même manière que le reste de l'espace des phases qui ne contribuent pratiquement à la valeur moyenne de  $A$ . Il faut une méthode qui génère les configurations qui ont des poids statistiques importants.

### 7.3.2 Echantillonnage par Importance

Le principe de la technique d'échantillonnage par importance, consiste à évaluer les sommes des grandeurs physiques sur les états microscopiques ayant une grande probabilité à la température  $T$  c'est à dire un grand  $\exp(-\beta E_\mu)$ . La valeur moyenne d'une grandeur  $A$  est donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N A(\mu) \quad (1.112)$$

Où  $A(\mu)$  est la valeur de  $A$  dans la configuration  $\mu$ , et  $N$  est le nombre de configurations choisi à la température  $T$ .

Nous présentons maintenant des algorithmes pour mettre en pratique la technique d'échantillonnage par importance utilisée pour l'étude des modèles magnétiques qui nous intéresse dans ce travail.

### 7.3.3 Méthode de Metropolis

L'algorithme de Metropolis consiste à générer une chaîne de Markov de configuration de spins. Pour générer la configuration de rang  $(n+1)$  à partir de la configuration de rang  $n$  on visite un site du réseau et on tente de changer son état :  $S_i \rightarrow -S_i$ . Ce changement est accepté avec une certaine probabilité. Avant de décrire les étapes de l'algorithme il est utile de définir quelques notions de bases et quelques variables, pour permettre au lecteur d'assimiler toutes les étapes.

- $\eta$  est une variable réelle aléatoire appartient à l'intervalle  $]0 ; 1]$ .
- $N$  est le nombre de spins du réseau,  $N = L^2$ (réseau carrée) ou  $L^3$  (réseau cubique) où  $L$  est le nombre de spins sur un coté (une direction).

- Le cycle Monte Carlo est une variable qui dépend de la taille du système ; il est égal à  $N$ . Dans un cycle Monte Carlo on parcourt en moyenne un site (spin) du réseau.

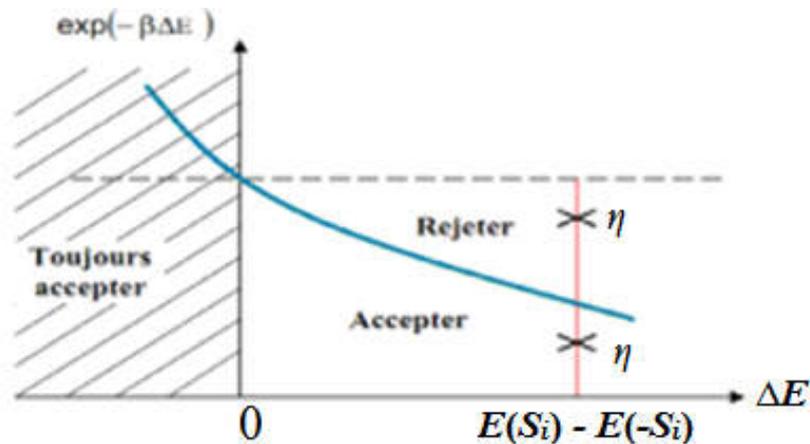
**i.** La première étape consiste à générer une configuration initiale de manière aléatoire. Pour réaliser cela on procède à un tirage équiprobable d'un nombre  $\eta$  sur un ensemble de nombres uniformément répartis sur l'intervalle  $]0 ; 1]$ . Si  $\eta$  appartient  $]0 ; 1/2]$  on associe un nombre  $+1$  (spin up) pour le premier élément du réseau. Si  $\eta$  appartient  $]1/2 ; 1]$  on associe  $-1$  (spin down) pour le premier élément du réseau ; on procède de la même manière jusqu'à parcourir tous les sites du réseau.

**ii.** La deuxième étape consiste à visiter un site au hasard. Pour cela on génère un nombre aléatoire  $\alpha$  dans l'intervalle  $]0 ; 1]$  et on le multiplie par  $N$  de telle sorte que  $N \times \alpha$  appartienne à  $[0 ; N-1]$ . On prend la partie entière de  $N \times \alpha$  pour que ce nombre coïncide avec un site du réseau.

**iii.** Une fois ce spin ( $S_i$ ) est choisi, on calcul son énergie d'interaction avec les premiers quatre voisins, on calcul la différence d'énergie  $\Delta E = E(S_i) - E(-S_i)$  entre l'état de spin actuel ( $S_i$ ) et l'état après son renversement ( $-S_i$ ). Si  $\Delta E < 0$  on accepte le changement de l'état de spin ;

ce qui est en accord avec le principe de minimisation de l'énergie. Si  $\Delta E > 0$  on génère un autre nombre aléatoire et on le compare au facteur de Boltzmann  $\exp(-\Delta E/k_B)$ . Si le nombre aléatoire est inférieur à ce facteur on accepte le changement de l'état du spin, sinon on laisse son état tel qu'il est (figure 1.15).

iv.



**Figure. 1.15 :** *Interprétation graphique de l'algorithme de MC Metropolis [43].*

On procède de la même manière jusqu'à terminer le premier cycle Monte Carlo ; on mesure et on cumule les valeurs de  $E$ ,  $M$ ,  $E^2$ ,  $M^2$ , ... etc. On commence le deuxième cycle Monte Carlo par la configuration finale du premier cycle. On opère de la même manière jusqu'à terminer tous les cycles Monte Carlo, on calcule les moyennes statistiques des grandeurs  $E$ ,  $M$ ,  $E^2$ ,  $M^2$ , ..., on sauvegarde les résultats dans un fichier pour les représenter. La précision sur les valeurs moyennes augmente avec l'augmentation du nombre de pas Monte Carlo.

## Références

- [1] Chris Rees, Magnets and Magnetism: A Brief History, Polaris Magnets, 8 janvier (2015).
- [2] David J. Griffiths. Introduction to Quantum Mechanics. Pearson Education, Inc., 2nd edition, (2005).
- [3] W. Pauli, Zeitschrift für Physik, vol. 31, pages 373-385 (1925).
- [4] Kahn O., "Magnetism of the Heteropolymetallic Systems", Struct Bonding, 68, 89 (1987).
- Miller J. S., Epstein A.J. & Reiff, W. M., "Molecular/Organic Ferromagnets", Science, 240, 40, (1988).
- [5] Kahn M. L., Sutter J. P., Golhen S., Guionneau P., Ouahab L., Kahn O. & Chasseau D., "Systemic Investigation of the Nature of the Coupling between a Ln(III) Ion (Ln=Ce(III) to Dy(III)) and Its Aminoxly Radical Ligands", J. Am. Chem. Soc., 122, 3413, (2000).
- [6] Shum W. W., "Magnetic Interactions in Novel Molecule-Based Materials", PhD thesis, University of Utah, (2008).
- [7] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University Press (2010).
- [8] Etkorn, S. J., "Magnetic Relaxation in Organic-Based Magnets.", PhD thesis, The Ohio State University (2003).
- [9] Nelson, K. J., "Nonaqueous synthesis of Prussian Blue Structured Materials" PhD thesis, University of Utah (2007).
- [10] Miller J. S. & Epstein A.J., "Molecule-Based Magnets-An Overview", Mrs Bulletin, November (2000).
- [11] L. P., Levy, Magnetism and Superconductivity. Berlin: Springer (2000).
- [12] W. Nolting et A. Ramakanth, Quantum Theory of Magnetism, Springer (2009).
- [13] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University Press (2010).
- [14] P. W. Anderson, in Solid State Physics, edited by F. Seitz and D. Turnbull, Academic Press, New York, Vol. 14, pp. 99–214 (1963).
- [15] M. A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. 96, 99 (1954).
- [16] T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. 16, 45 (1956).
- [17] K. Yosida, Phys. Rev. 106, 893 (1957).
- [18] R.J. Birgeneau, R.A. Cowley, G. Shirane, H.J. Guggenheim, Spin correlations near the percolation concentration in two dimensions, Phys. Rev. Lett. 37, 940–943 (1976).
- [19] J.M. Baker, J.A. Lourens, R.W.H. Stevenson, Antiferromagnetism of mixed crystals of zinc and manganese fluoride, Proc. Phys. Soc. 77,1038–1041 (1961).
- [20] T.E. Wood, P. Day, Magneto-optical study of the magnetic phase diagram of the dilute metamagnet Fep Mg<sub>1-p</sub> Cl<sub>2</sub>, J. Phys. C 10, L333–L335 (1977).
- [21] W. Heisenberg, "Zur theorie der ferromagnetismus", Zeitschrift für Physik., vol. 49, pp. 619-636 (1928).
- [22] B. A. Berg, Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis, World Scientific (2004).
- [23] E. Ising, "Beitrag zur theorie des ferromagnetismus/contribution to the theory of ferromagnetism", Zeitschrift für Physik., vol. 31, pp. 253-258 (1925).

- [24] R. B. Potts and C. Domb, Some generalized order-disorder transformations, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, vol. 48, p. 106 (1952).
- [25] M. Blume, "Theory of the first-order magnetic phase change in  $\text{UO}_2$ ", Phys. Rev., vol. 141, pp. 517-524 (1966).
- H. W. Capel, "On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting", Physica, vol. 32, pp. 966-988 (1966).
- [26] M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths, "Ising model for the  $\lambda$  transition and phase separation in He-He mixtures", Phys. Rev., vol. A4, pp. 1071-1077 (1971).
- [27] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A 276, 238 (1963).
- [28] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963).
- [29] J. Kanamori, Prog. Theo. Phys. 30, 275 (1963).
- [30] P. W. Anderson Science 235, 1196 (1987).
- [31] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher et M. E. J. Newman, The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group, Oxford University Press (1992).
- [32] F. Jedrzejewski, Modèles Aléatoires et Physique Probabiliste, Springer (2009).
- [33] H. Nishimori and G. Ortiz, Elements of phase transitions and critical phenomena, p. 1. Oxford: Oxford University Press (2015).
- [34] Essam, J. W. and Fischer, M. E. J. Chem and Phys 842, 39 (1963).
- [35] Daniel C. Mattis, Statistical Mechanics made simple. 1st ed. Singapore: World Scientific (2003).
- [36] P. Weiss, "L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique," J. Phys. Theor. Appl., vol. 6, no. 1, pp. 661-690 (1907).
- [37] N. N. Bogoliubov, "On the theory of superfluidity", J. Phys (USSR), vol. 11, pp. 23-32 (1947).
- R. P. Feynman, "Slow electrons in a polar crystal", Phys. Rev., vol. 97, no. 3, pp. 660-665 (1955).
- [38] T. Tatsumi, Prog. Theor. Phys. 58, 1058 (1977).
- [39] T. Tatsumi, Prog. Theor. Phys. 59, 714 (1978).
- [40] A. A. Migdal, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69, 810 (1975).
- A. A. Migdal, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69, 1457 (1975).
- [41] L. P. Kadanoff, Ann. Phys. (N.Y.) 100, 359 (1976).
- [42] Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H. and Teller, E., "Equations of State Calculations by Fast Computing Machines", Journal Chemical Physics, 21, 1087-1091 (1953).

## Chapitre 2

---

*Effets du champ cristallin  
aléatoire sur un système d'Ising  
ferrimagnétique à spins mixtes  
(1/2 ; 2)*

---

Dans ce chapitre, on se propose d'étudier l'effet du champ cristallin aléatoire d'ions uniques sur les propriétés magnétiques d'un système ferrimagnétique à spin mixte  $\sigma = 1/2$  et  $S = 2$  distribués sur un réseau carré. Cette étude sera effectuée à l'aide de l'approximation du champ moyen en utilisant le principe variationnel qui est basé sur l'inégalité de Gibbs-Bogoliubov pour l'énergie libre. Nous allons déterminer l'état fondamental du système et la magnétisation totale en fonction des paramètres du modèle. Ensuite, nous mettrons en évidence la dépendance thermique du magnétisme afin de diffuser des informations sur le comportement magnétique du système. En particulier, on verra apparaître un ou deux points de compensation et de nombreux types de diagrammes de phase avec des lignes de transition de phase du premier et du second ordre, ainsi que des points critiques et tricritiques.

## 1 Introduction

Habituellement, la notion de phénomène critique est associée aux systèmes physiques qui subissent des transitions de phase à des températures et / ou des pressions particulières ou d'autres paramètres physiques. Cette transition est un phénomène macroscopique entraîné par des changements ayant lieu dans la manière à l'échelle microscopique. Ce raisonnement peut également être appliqué à toutes sortes de systèmes [1, 2, 3], en particulier à des modèles sur réseau tels que le modèle d'Ising.

Récemment, des efforts expérimentaux et théoriques ont été fournis pour comprendre le comportement critique et magnétique des systèmes ferrimagnétiques des spins mixtes (alternés)  $\sigma = 1/2$  et  $S > 1/2$  alterné sur deux sous-réseaux interpénétrants, sous l'influence d'un champ cristallin. L'intérêt croissant pour les systèmes ferrimagnétiques est principalement lié aux applications technologiques potentielles, telles que les technologies magnéto-optique [4], thermo-magnétique [5, 6], micro-électromécaniques (MEMS) [7], l'optoélectronique et les mémoires magnéto-électroniques [8]. Un bon exemple expérimental de système à spin mixte alterné est le système complexe  $ACu(pbaOH)(H_2O)_3nH_2O$  [9-10], avec  $A = Ni, Co, Fe, Mn$ , qui ont des spins alternés  $(1, 1/2)$ ,  $(3/2, 1/2)$ ,  $(2, 1/2)$  et  $(5/2, 1/2)$ , respectivement. En outre, les effets du champ cristallin sur le comportement critique et magnétique des systèmes à spins mixtes  $(1/2, 1)$ ,  $(1/2, 3/2)$ ,  $(1/2, 5/2)$  et  $(2, 5/2)$  ont été étudiés théoriquement en détail par plusieurs méthodes de la physique statistique à l'équilibre ou hors équilibre telles que la méthode du groupe de renormalisation de Migdal-Kadanoff [11, 48], la théorie du champ effectif [12-15], la théorie du champ moyen [16-19] et la simulation de Monte Carlo [10-25]. Par contre, le système de spins mixtes  $\sigma = 1/2$  et  $S = 2$  a reçu moins d'attention. Une première

tentative d'étude du comportement tricritique de ce système a été effectuée à l'aide de la théorie du champ effectif (EFT) [26] qui met en évidence un point tricritique lorsque le nombre de coordination  $z \geq 4$ , alors que l'étude par la simulation de Monte Carlo [27] sur un réseau carré à spins mixtes spin-1/2 et spin-2 montre l'absence d'un point tricritique. Les résultats exacts sur un réseau carré ont montré l'existence de températures de compensation. Dans la technique des équations de récursions exactes sur le réseau de Bethe [28, 49], les auteurs constatent que le système a des points de compensations et des points tricritiques lorsque  $z \geq 5$ . De plus, une formulation exacte du système à spins mixtes spin-1/2 et spin-2 du modèle d'Ising sur le réseau de carreaux (4, 8) a été réalisé pour établir des diagrammes de phases précis [29]. En interagissant avec ces résultats, nous suggérons d'étudier le système ferrimagnétique à spins mixtes  $\sigma = 1/2$  et  $S = 2$  modélisé par le modèle de Blume-Capel sur un réseau carré sous l'effet d'un champ cristallin aléatoire. Dans cette étude, on utilisera l'approche du champ moyen, basée sur l'inégalité de Bogoliubov pour l'énergie libre [30], pour étudier l'influence du champ cristallin aléatoire sur les diagrammes de phases et l'aimantation.

Ce chapitre est organisé comme suit : dans la section II, nous présenterons le modèle et les détails de l'approximation. Dans la section III, nous présenterons et discutons nos résultats. Enfin, dans la section IV, nous donnerons notre conclusion.

## 2 Modèle et théorie

Le système que nous allons étudier est constitué de deux sous-réseaux interpénétrant (A) et (B) avec les valeurs de spin  $\sigma_i = \pm 1/2$  et  $S_j = 0 ; \pm 1 ; \pm 2$  respectivement

L'Hamiltonien de ce modèle est décrit par :

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + \sum_{j=1}^{N/2} \Delta_j S_j^2 \quad (2.1)$$

Où  $N$  est le nombre total de sites du réseau,  $J$  est le paramètre d'interaction d'échange, la première sommation est effectuée sur les couples de sites voisins  $\langle i, j \rangle$  et  $\Delta_j$  est un champ cristallin aléatoire réparti selon la distribution de probabilité bimodale [31-36] :

$$p(\Delta_j) = \frac{1}{2} \left[ \delta(\Delta_j - \Delta(1+\alpha)) + \delta(\Delta_j - \Delta(1-\alpha)) \right] \quad (2.2)$$

Où  $\alpha$  est une constante positive et la moitié des sites du réseau sont soumise à un champ cristallin  $\Delta(1+\alpha)$  et le reste ont un champ cristallin  $\Delta(1-\alpha)$ .

Le principe variationnel basé sur l'inégalité de Gibbs-Bogoliubov pour l'énergie libre [37-40] est décrit par :

$$F(H) \leq \mathcal{O} = F_0(H_0) + \langle H - H_0 \rangle_0 \quad (2.3)$$

où  $F(H)$  est l'énergie libre de l'Hamiltonien défini par l'équation (2.1),  $F_0(H_0)$  est l'énergie libre d'un Hamiltonien d'essai  $H_0 = H_0(\eta)$ , avec  $\eta$  désignant des paramètres de variation et  $\langle \dots \rangle_0$  désigne une moyenne thermique sur l'ensemble défini par  $H_0$  comme suit :

$$H_0 = \underbrace{\eta_\sigma \sum_i^{N/2} \sigma_i}_{\text{sublattice A}} + \underbrace{\eta_S \sum_j^{N/2} S_j + \sum_j^{N/2} \Delta_j S_j^2}_{\text{sublattice B}} \quad (2.4)$$

où  $\eta_\sigma$  et  $\eta_S$  sont les deux paramètres de variation liés au champ moyen agissant sur les deux sous-réseaux, exprimés par :

$$\eta_\sigma = J \sum_{i=1}^z \langle S_i \rangle_0 = zJM_S \quad \text{et} \quad \eta_S = J \sum_{i=1}^z \langle \sigma_i \rangle_0 = zJM_\sigma \quad (2.5-a)$$

où  $z$  est le numéro de coordination ;  $M_\sigma$  et  $M_S$  sont les aimantations par site définies par :

$$M_\sigma = \langle \sigma \rangle_0 \quad \text{et} \quad M_S = \langle S \rangle_0 \quad (2.5-b)$$

La fonction de partition générée par l'Hamiltonien  $H_0$  est définie par:  $Z_0 = \text{tr}(\exp(-\beta H_0))$  avec  $\beta = 1/k_B T$  et  $k_B$  est la constante de Boltzmann. D'où

$$Z_0 = \left[ 2 \text{ch} \left( \frac{\beta \eta_A}{2} \right) \right]^{N/2} \times \left[ 2 \exp(-4\beta \Delta_j) \text{ch}(2\beta \eta_B) + 2 \exp(-\beta \Delta_j) \text{ch}(\beta \eta_B) + 1 \right]^{N/2} \quad (2.6)$$

L'énergie libre par site est donnée par :

$$f = \left( \frac{zJM_\sigma M_S}{2} - \frac{\eta_A M_\sigma}{2} - \frac{\eta_B M_S}{2} \right) - \frac{1}{N\beta} \int \ln(Z_0) p(\Delta_j) d\Delta_j \quad (2.7)$$

Après avoir intégré la distribution de probabilité, il est facile d'obtenir l'expression de l'énergie libre par site,

$$-2\beta f = \ln 4 + \frac{zM_\sigma M_S}{t} + \ln \left[ \text{ch} \left( \frac{zM_S}{2t} \right) \right] + \frac{1}{2} \ln [B \times E] \quad (2.8-a)$$

$$\text{où:} \quad \begin{cases} A = 2 e^{-\frac{4d}{t}(1+\alpha)} \text{sh} \left( \frac{2zM_\sigma}{t} \right) + e^{-\frac{d}{t}(1+\alpha)} \text{sh} \left( \frac{zM_\sigma}{t} \right) \\ B = e^{-\frac{4d}{t}(1+\alpha)} \text{ch} \left( \frac{2zM_\sigma}{t} \right) + e^{-\frac{d}{t}(1+\alpha)} \text{ch} \left( \frac{zM_\sigma}{t} \right) + \frac{1}{2} \\ C = 2 e^{-\frac{4d}{t}(1-\alpha)} \text{sh} \left( \frac{2zM_\sigma}{t} \right) + e^{-\frac{d}{t}(1-\alpha)} \text{sh} \left( \frac{zM_\sigma}{t} \right) \\ E = e^{-\frac{4d}{t}(1-\alpha)} \text{ch} \left( \frac{2zM_\sigma}{t} \right) + e^{-\frac{d}{t}(1-\alpha)} \text{ch} \left( \frac{zM_\sigma}{t} \right) + \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2.8-b)$$

Où  $z=4$  (réseau carré),  $t$  et  $d$  désignent respectivement la température réduite  $k_B T/J$  et le champ cristallin réduit  $\Delta/J$ . Pour étudier l'aimantation du système, les paramètres d'ordre  $M_\sigma$  et  $M_s$  sont définis en minimisant l'énergie libre. Les équations des aimantations sont données par :

$$M_\sigma = -\frac{1}{2}th\left(\frac{zM_s}{2t}\right) \quad \text{et} \quad M_s = -\frac{1}{2}\left[\frac{A}{B} + \frac{C}{E}\right] \quad (2.9)$$

En minimisant l'énergie libre (2.8), nous déterminons les solutions stables des équations (2.9).

### 3 Résultats et discussion

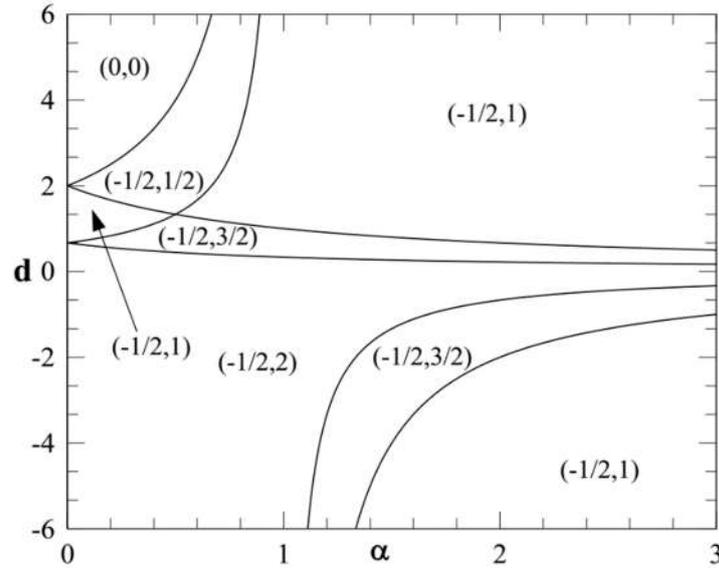
#### 3.1 L'état fondamental du système ( $T = 0K$ )

Les diagrammes de phase de l'état fondamental, utiles pour l'étude des diagrammes en phases finies, sont également un outil d'identification des régions dans lesquelles les modèles peuvent présenter un comportement magnétique intéressant, notamment autour de points où plus de deux phases peuvent coexister. Par conséquent, nous commençons par la structure de l'état fondamental du système, qui dérive facilement des équations (2.8) et (2.9), comme illustré à la figure 2.1. Ce diagramme de phase est dessiné dans le plan ( $d, \alpha$ ). En effet, ces équations conduisent à cinq solutions de type  $(M_{1/2}, M_2)$  :  $(-1/2, 2)$ ,  $(-1/2, 1)$ ,  $(-1/2, 1/2)$ ,  $(-1/2, 3/2)$  et  $(0, 0)$ .

A partir de ces résultats, nous dégagons les observations suivantes :

- i. Pour  $\alpha = 0$ , ce qui correspond au modèle pur, apparaissent deux points de transition du premier ordre : l'un se produit à  $d = 2/3$  entre les phases  $(-1/2, 1)$ ,  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 2)$  et l'autre entre les phases  $(-1/2, 1)$ ,  $(-1/2, 1/2)$  et  $(0, 0)$  se produit à  $d = 2$ .
- ii. Pour  $0 < \alpha < 1/2$  et  $1/2 < \alpha < 1$  : cela correspond aux deux pics du champ cristallin ne sont pas symétriques et les deux anisotropies sont positives, quatre lignes de transition du premier ordre apparaissent: une entre les phases  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$ , la deuxième entre les phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$ , la troisième entre les phases  $(-1/2, 1)$  et  $(-1/2, 1/2)$  et la dernière entre les phases  $(-1/2, 1/2)$  et  $(0, 0)$ .
- iii. Pour  $\alpha = 1/2$ , trois situations critiques apparaissent : un point de transition multi-critique entre les phases  $(-1/2, 1/2)$ ,  $(-1/2, 1)$  et  $(-1/2, 3/2)$  à  $d = 4/3$ , une ligne de transition du premier ordre entre les phases  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$  et la troisième du premier ordre entre les phases  $(-1/2, 1/2)$  et  $(0, 0)$ .

- iv. Pour  $\alpha = 1$  : un cas particulier où l'un des pics de distribution n'a pas d'anisotropie, deux lignes de transition du premier ordre apparaissent. L'une entre les phases  $(-1/2, 1)$  et  $(-1/2, 3/2)$  et l'autre entre les phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$ .
- v. Pour  $1 < \alpha$ , cela correspond à deux pics de distribution asymétriques et deux anisotropes sont de signes opposés, les transitions de phase du premier ordre possibles se produisent entre les phases :  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$ ,  $(-1/2, 3/2)$  et  $(1/2, 2)$ ,  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$  ou  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$ .



**Figure 2.1.** Diagramme de phase de l'état fondamental du système établi dans le plan  $(d, \alpha)$ . Les seules phases stables sont.  $(-1/2, 2)$ ,  $(-1/2, 3/2)$ ,  $(-1/2, 1)$ ,  $(-1/2, 1/2)$  et  $(0, 0)$

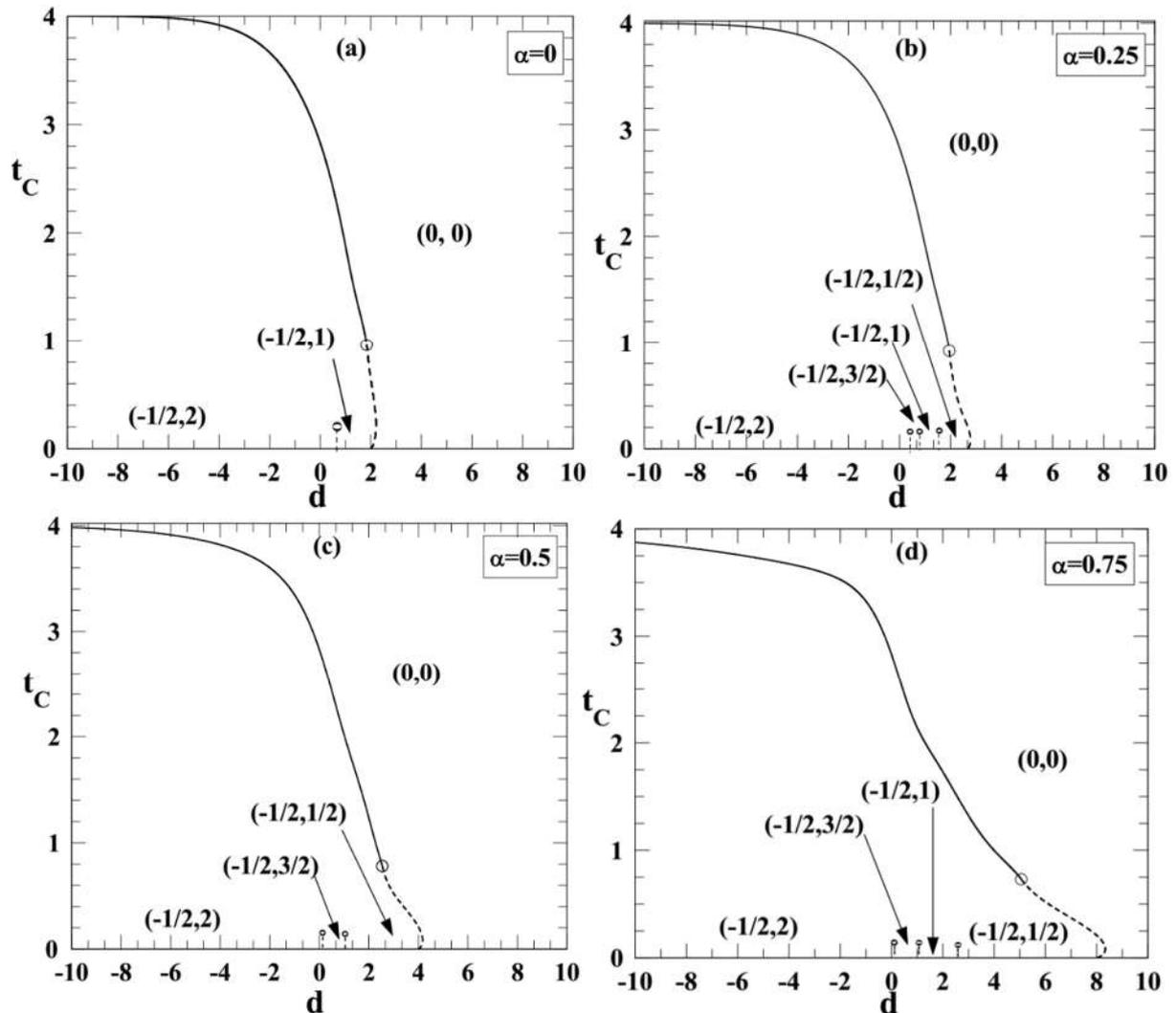
Enfin, quelques cas triviaux spéciaux peuvent être mis en évidence :

- $d = 0$  : cela correspond à l'absence du champ cristallin, le modèle se réduit à celui d'Ising. Seule la phase  $(-1/2, 2)$  est stable dans toute la gamme de  $\alpha$ .
- $\alpha = 0$  : Cela correspond à un champ cristallin homogène, la phase  $(-1/2, 1)$  est entourée de deux autres phases, à savoir  $(0, 0)$  et  $(-1/2, 2)$ . Les points de coexistence des phases  $[(-1/2, 1), (-1/2, 2)]$  et  $[(-1/2, 1), (0, 0)]$  sont pour  $d = 2/3$  et  $d = 2$  respectivement.

### 3.2 Diagrammes de phase à la température finie ( $T > 0K$ )

Dans cette sous-section, nous analysons et discutons les diagrammes de phase globaux à température finie. Le point de départ est la résolution numérique des équations (2.8) et (2.9) en choisissant la solution qui minimise l'énergie libre. En variant  $\alpha$  ou  $d$ , nous obtenons divers diagrammes de phases dans le plan  $(t, d)$  ou  $(t, \alpha)$  respectivement. Les topologies obtenues

sont illustrées dans les figures 2.1 et 2.2 pour les valeurs sélectionnées de  $\alpha = (0.0, 0.25, 0.5 \text{ et } 0.75)$ .



**Figure 2.2.** Diagrammes de la température critique en fonction de  $d$  tracés pour :  $\alpha = 0$  (a),  $\alpha = 0.25$  (b),  $\alpha = 0.5$  (c),  $\alpha = 0.75$  (d). Les lignes continues correspondent aux transitions du second ordre, tandis que les lignes en pointillées représentent les transitions du premier ordre. Les grands cercles indiquent les points tricritiques, tandis que les petits cercles désignent les points critiques isolés.

Pour  $\alpha = 0$  (figure 2.2a), à haute température, une ligne de transition du second ordre séparant la phase ordonnée  $(-1/2, 1)$  et la phase désordonnée  $(0, 0)$  est limitée par un point tricritique de coordonnées  $(d_{tr} = 1.84, t_{tr} = 0.96)$ . En dessous de ce point tricritique, la transition de phase ordre-désordre est du premier ordre. Aux basses températures et à l'intérieur du domaine ordonné, une transition de phase du premier ordre entre  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 1)$  est limitée par un point critique (critical end point) situé à  $(d = 0.667, t = 0.035)$ .

Alors que, pour  $\alpha = 0,25$  (Figure 2.2b), en plus du point tricritique  $(d_{tr} = 1.95, t_{tr} = 0.92)$  toujours présent sur la ligne de transition ordre-désordre, trois lignes successives de transitions de phases du premier ordre sont présentes à basses températures. Elles se terminent sur trois

points critiques (critical end point) à l'intérieur de phase du domaine ordonnée dont les coordonnées sont :  $(d_c = 0.534, t_c = 0.03)$ ,  $(d_c = 0.889, t_c = 0.02)$  et  $(d_c = 1.6, t_c = 0.015)$ . La première ligne sépare les phases  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$ , la seconde sépare les phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$  et la troisième sépare les phases  $(-1/2, 1)$  et  $(-1/2, 1/2)$ .

Alors que, pour  $\alpha = 0.25$  (Figure 2.2b), en plus du point tricritique  $(d_{tr} = 1.95, t_{tr} = 0.92)$  toujours présent sur la ligne de transition ordre-désordre, trois lignes successives de transitions de phase du premier ordre sont présentes. Ils se terminent à trois points critiques (critical end point) à l'intérieur de phases ordonnées dont les coordonnées sont :  $(d_c = 0.534, t_c = 0.03)$ ,  $(d_c = 0.889, t_c = 0.02)$  et  $(d_c = 1.6, t_c = 0.015)$ , respectivement. La première ligne sépare les phases  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$ , la seconde est comprise entre  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$  et la troisième sépare les phases  $(-1/2, 1)$  et  $(-1/2, 1/2)$ .

Dans le cas  $\alpha = 0.5$  (Figure 2.2c), la ligne de transition entre les phases ordonnées et désordonnées présente un point tricritique à  $(d_{tr} = 2.544, t_{tr} = 0.78)$ . À basses températures, la phase  $(-1/2, 1)$  disparaît, donnant lieu à deux transitions de phases successives du premier ordre. Les phases restantes (avec  $d$  croissant) sont  $(-1/2, 2)$ ,  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1/2)$  et les coordonnées des deux points finaux critiques (critical end point) sont  $(d_c = 1.334, t_c = 0.35)$  et  $(d_c = 0.445, t_c = 0.05)$ .

Pour  $\alpha = 0.75$  (Figure 2.2d), la même topologie que celle de la figure 2.2b est mise en évidence. Les nouvelles coordonnées du point tricritique et des trois points finaux critiques sont :  $(d_{tr} = 5.064, t_{tr} = 0.7298)$ ,  $(d_c = 2.66667, t_c = 0.01)$ ,  $(d_c = 1.1429, t_c = 0.03)$  et  $(d_c = 0.381, t_c = 0.1)$ .

On peut voir que dans ces topologies, les lignes de transition correspondantes présentent des points tricritiques dont les températures critiques  $t_{tr}$  diminuent avec l'augmentation de  $\alpha$ . Nous notons la réminiscence de ces topologies avec celles des modèles de spin-1 [35] et de spin-2 [36] du modèle de Blume-Capel, pour les transitions de phases ordre-désordre. À basses températures, les diagrammes de phase montrent un comportement réentrant [41].

En raison de la forme de la distribution de probabilités (2.2), dans la région  $\alpha < 1$ , il n'y a pas de symétrie observée dans les diagrammes de phases. Mais quand  $\alpha \gg 1$ , on voit facilement que cette distribution de probabilités prend la forme symétrique :

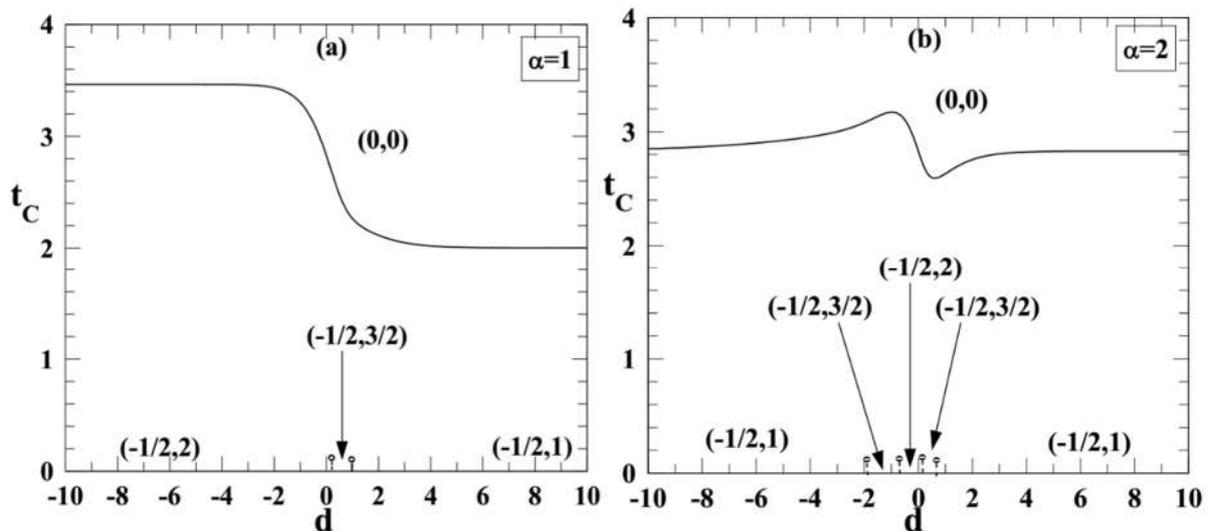
$$p(\Delta_j) = \frac{1}{2}[\delta(\Delta_j - \alpha\Delta) + \delta(\Delta_j + \alpha\Delta)] \quad (2.10)$$

En conséquence, les diagrammes de phase deviennent symétriques autour de  $d = 0$ .

En ce qui concerne le cas  $\alpha > 1$ , trois aspects différents (Figure 2.3) des transitions de phase peuvent être soulignés :

- ◆◆ Il n'y a pas de phase désordonnée à basses températures.
- ◆◆ Le point tricritique disparaît et la ligne ordre-désordre est entièrement du second ordre.
- ◆◆ Les diagrammes de phases deviennent symétriques autour de  $d = 0$  lorsque  $\alpha \gg 1$ .

Ces différents aspects (Figure 2.3) des transitions de phases ont déjà été rapportés dans les deux travaux récents de T. Kaneyoshi sur les films bicouches d'Ising à distribution aléatoire du champ cristallin [50-51].

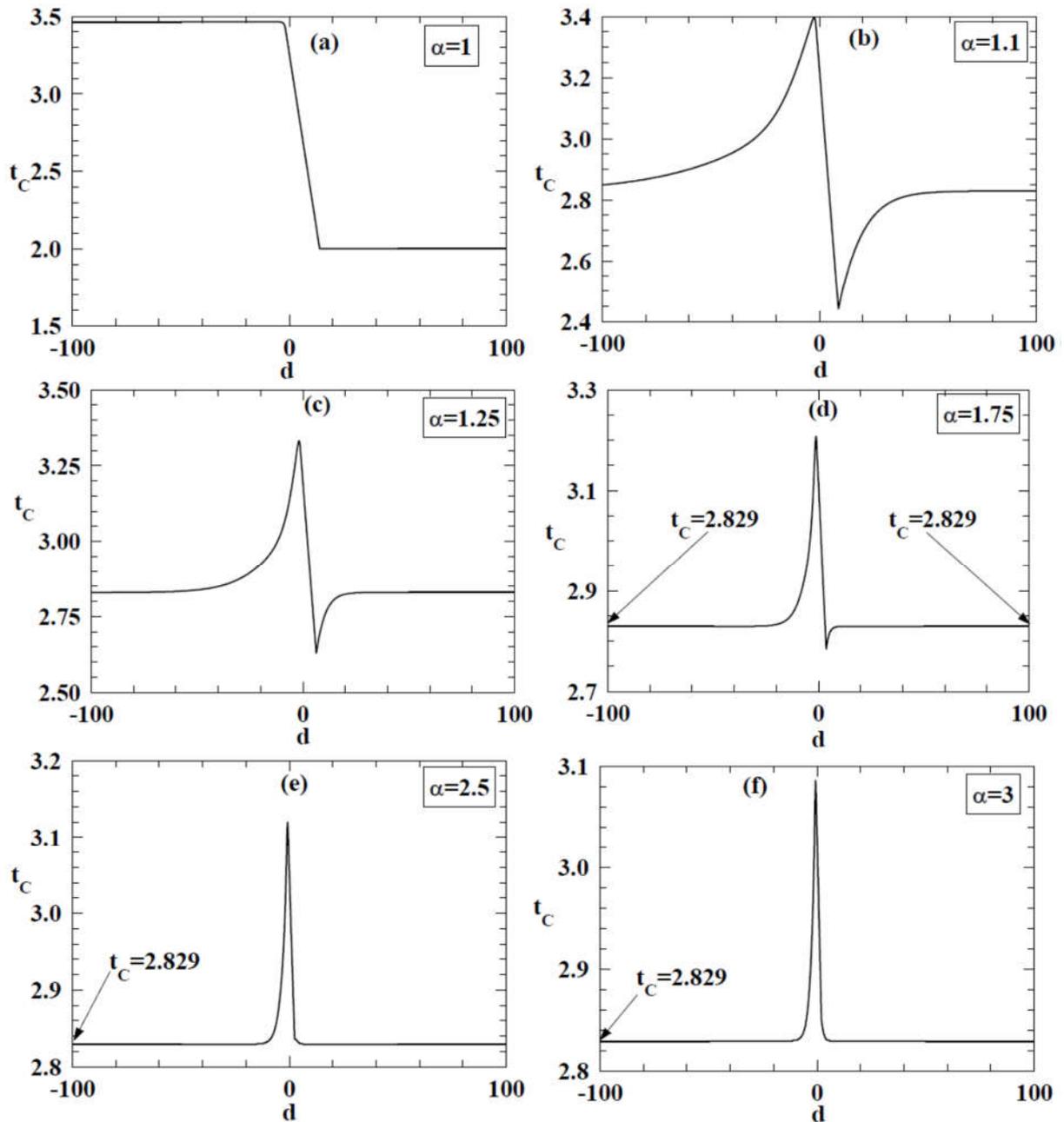


**Figure 2.3.** Diagrammes de phases tracés pour  $\alpha = 1$  (a) et  $\alpha = 2$  (b). La ligne complète et la ligne pointillée correspondent respectivement aux transitions du deuxième ordre et du premier ordre. Les cercles indiquent les points tricritiques.

Pour  $\alpha = 1$  (sur la figure 2.3a), la phase  $(-1/2, 1/2)$  disparaît, laissant deux transitions de phases successives du premier ordre à basses températures. Ces lignes se terminent à deux extrémités critiques dont les coordonnées sont  $(d_c = 0.3334, t_c = 0.13)$  et  $(d_c = 1, t_c = 0.045)$ .

Dans la figure 2.3b, présentant le cas  $\alpha = 2$ , le système comporte quatre lignes de transition du premier ordre à très basses températures, la première entre les phases  $(-1/2, 1)$  et  $(-1/2, 3/2)$ , se termine sur un point critique isolé  $(d_c = -2, t_c = 0.025)$ ; la deuxième ligne sépare les phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 2)$  et se termine sur  $(d_c = -0.6667, t_c = 0.07)$ ; la troisième ligne sépare les phases  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$  et se termine sur  $(d_c = 0.2223, t_c = 0.2)$  et la dernière ligne sépare les phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$  et se termine sur  $(d_c = 0.6667, t_c = 0.06)$ . Au-dessus de ces points, il y a des passages continus entre les trois phases ferrimagnétiques.

Nous notons que le diagramme de phases de la [figure 2.3b](#) montre un comportement réentrant pour les faibles valeurs de  $t$ , c'est-à-dire que les phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$  réapparaissent pour les valeurs négatives et positives de  $d$ .



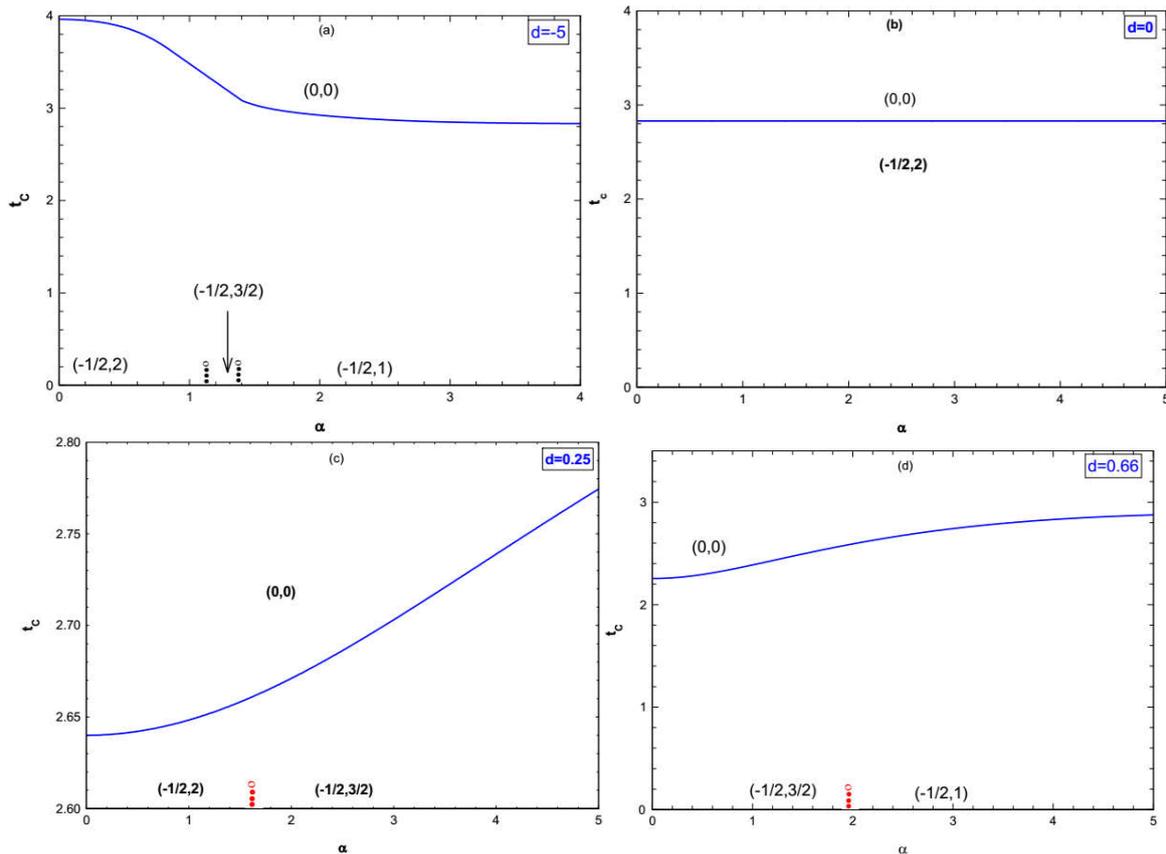
**Figure 2.4.** Diagrammes de phases tracés dans le cas des grandes valeurs de  $|d|$  pour  $\alpha = 1$  (a),  $\alpha = 1.1$  (b),  $\alpha = 1.25$  (c),  $\alpha = 1.75$  (d),  $\alpha = 2.5$  (e) et  $\alpha = 3$  (f).

La température critique est tracée en fonction de  $d$  pour  $\alpha = 1$  ([figure 2.4a](#)),  $\alpha = 1.1$  ([figure 2.4b](#)),  $\alpha = 1.25$  ([figure 2.4c](#)),  $\alpha = 1.75$  ([figure 2.4d](#)),  $\alpha = 2.5$  ([figure 2.4e](#)) et  $\alpha = 3$  ([figure 2.4f](#)). Ce qui nous importe dans cette figure, c'est la valeur de  $t_c$  lorsque  $|d|$  prend de très

grandes valeurs. Sur la [figure 2.4a](#), pour  $\alpha = 1$ , la valeur de  $t_c$  est égale à **2** lorsque  $d \rightarrow +\infty$ , tandis qu'elle est égale à **3.5** lorsque  $d \rightarrow -\infty$ . Mais quand  $\alpha > 1$  sur les [figures 2.4\(b-f\)](#), les diagrammes de phase montrent que, lorsque  $d \rightarrow +\infty$  ou  $d \rightarrow -\infty$ , le système à spins mixtes Ising se comporte comme un système à deux niveaux puisque le spin-2 se comporte comme  $S = \pm 2$ . C'est pourquoi la température critique tend vers une valeur limitée, à savoir  $t_c = \mathbf{2.829}$  et qui est proche de la valeur trouvée par Onsager dans la réf. [\[43\]](#), ainsi qu'aux valeurs obtenues à partir de la théorie du champ effectif:  $t_c = \mathbf{3}$  et  $t_c \approx \mathbf{3.088}$  dans les modèles à spins mixtes (1/2, 2) [\[26\]](#) et dans les modèles spin-1 [\[44\]](#), ainsi que comme celle obtenu par les simulations de Monte Carlo:  $t_c \approx \mathbf{2.289}$  dans un système à spins mixtes (1/2 ; 2) [\[27\]](#).

De plus, nous voudrions souligner les points suivants : quand  $\alpha \geq 1$ , nous remarquons la disparition du point tricritique  $t_{tr}$  dans le diagramme de phase, il est intéressant de noter que nos résultats concernant la disparition de  $t_{tr}$  sont en accord avec d'autres travaux qui ont étudié l'effet du champ cristallin aléatoire dans des systèmes de spin mixtes (1/2, 1) [\[34\]](#) et (1, 3/2) [\[45\]](#), ainsi que dans les systèmes de spin-1 [\[35\]](#) et spin-2 [\[36\]](#) purs. En effet, nous avons vu que les diagrammes de phase sur les [figures \(2.2 - 2.4\)](#) correspondent qualitativement et quantitativement à ce qui est établi dans la littérature, en particulier les références [\[34-36, 45\]](#).

Par contre, lorsque  $\alpha = 0$ , le modèle se réduit au modèle bien connu de Blume-Capel. Dans ce cas, comme le montre la [figure 2.2a](#); le système présente des points essentiels parfaitement en accord avec les résultats de la théorie du champ effectif [\[26\]](#). Cependant, nous sommes en désaccord avec les études utilisant d'autres méthodes telles que : les simulations de Monte Carlo pour  $z = 3$  [\[46\]](#) et  $z = 4$  [\[27\]](#), et les résultats exacts [\[47\]](#). Dans cette dernière étude, les auteurs ont adopté une nouvelle approche pour obtenir les diagrammes de phase exacts des modèles mixtes bidimensionnels spin-1/2 et spin-S (où  $S > 1/2$ ) sur réseau carré. Cette approche a été améliorée dans l'idée de groupe de renormalisation par des étapes pour éviter les difficultés de la résolution de système des équations mathématique obtenu à partir le modèle de Blume-Capel sur un réseau carré ; aucun point tricritique n'a été observé dans ces travaux. En revanche, en utilisant les relations de récursion sur le réseau de Bethe [\[28\]](#), les points tricritiques existent pour  $z \geq 5$  et disparaissent pour  $z \leq 4$ . Nous remarquons que l'ordre magnétique disparaît dans  $d = z / 2$ , cette relation est obtenue dans toutes les études du système Ising ferrimagnétique à spins mixtes (1/2, 2) [\[26, 27, 28, 46, 47\]](#).

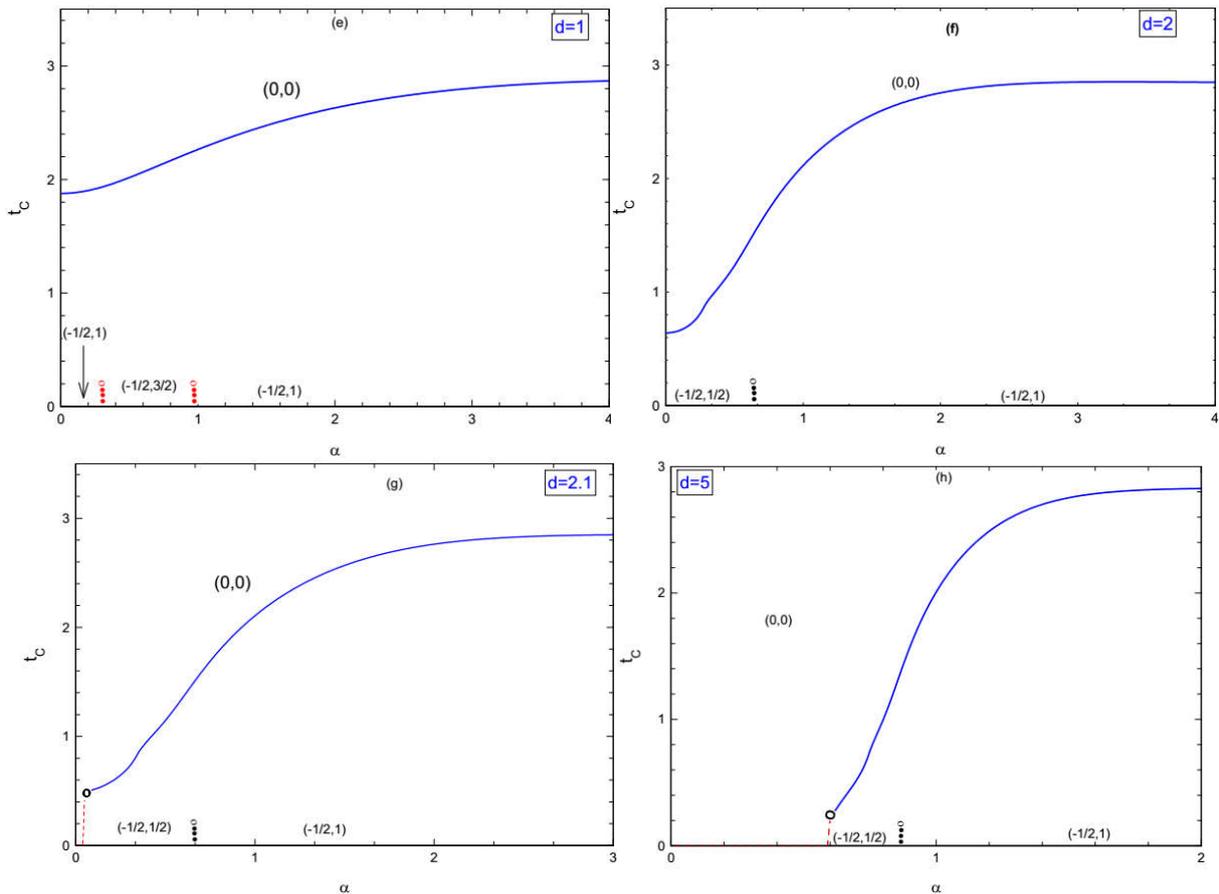


**Figure 2.5(a, b, c et d).** Les températures de transition  $t_c$  en fonction du paramètre  $\alpha$  pour les valeurs sélectionnées du champ cristallin :  $d = -5$  (a),  $d = 0$  (b),  $d = 0.25$  (c),  $d = 0.661$  (d).

D'autre part, pour déduire l'effet du paramètre  $\alpha$  sur les diagrammes de phases, nous avons tracé, sur la [figure 2.5](#), les températures de transition  $t_c$  pour plusieurs valeurs du champ cristallin réduit  $d$ . Nous constatons que, pour  $d = -5$ , la [figure 2.5a](#) montre l'existence d'une ligne de transition du second ordre entre les phases ferrimagnétique et paramagnétique et d'une transition du premier ordre entre les phases ferrimagnétiques  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$  se terminées sur un point critique isolé ( $\alpha = 1.134$ ,  $t = 0.14$ ) et une transition supplémentaire du premier ordre entre les phases ferrimagnétiques  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$  se terminées sur un point critique isolé ( $\alpha = 1.4$ ,  $t = 0.08$ ). Alors que pour  $d = 0$  ([figure 2.5b](#)), la ligne de transition du second ordre entre la phase ferrimagnétique et la phase paramagnétique est indépendante de  $\alpha$  en raison de l'absence du champ cristallin et  $(-1/2, 2)$  est la phase ferrimagnétique stable.

Une ligne de transition du premier ordre séparant les phases  $(-1/2, 2)$  et  $(-1/2, 3/2)$  est obtenue pour  $d = 0.25$ , comme indiqué sur la [figure 2.5c](#), qui se termine sur un point critique isolé situé à ( $\alpha = 1.667$ ,  $t = 0.01$ ). Aux températures élevées, il existe une ligne de transition du second ordre entre ces phases ferrimagnétiques et la phase paramagnétique. Pour  $d = 0.66$ , la [figure 2.5d](#) montre l'existence d'une ligne de transition du second ordre entre les phases ferrimagnétique et paramagnétique et d'une transition du premier ordre entre les phases

ferrimagnétiques  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$  et se terminant sur un point critique isolé situé à  $(\alpha = 2, t = 0.011)$ . Une ligne de transition du second ordre séparant les phases ferrimagnétiques et la phase paramagnétique est obtenue pour  $d = 1$  comme montré à la figure 2.5e. A basses températures, deux lignes du premier ordre apparaissent l'une entre les phases  $(-1/2, 1)$  et  $(-1/2, 3/2)$  se terminant sur un point critique isolé situé à  $(\alpha = 0.333, t = 0.09)$  et l'autre entre les phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1)$  et se termine sur un point critique isolé situé à  $(\alpha = 1, t = 0.03)$ .



**Figure 2.5 (e, f, g et h).** Les températures de transition  $t_c$  en fonction du paramètre  $\alpha$  pour les valeurs sélectionnées du champ cristallin :  $d = 1.0$  (e),  $d = 2$  (f),  $d = 2.1$  (g) et  $d = 5$  (h).

Pour  $d = 2$ , la figure 2.5f montre la même topologie, sauf dans la phase ferrimagnétique, il existe une ligne du premier ordre entre les phases  $(-1/2, 1/2)$  et  $(-1/2, 1)$  qui se termine sur un point critique isolé situé à  $(\alpha = 0.667, t = 0.09)$ . Pour,  $d > 2$ , les figure 2.(5g, 5h),  $d = 2.1$  et  $d = 5$  respectivement, montrent l'existence d'une ligne de transition du second ordre (ligne continue) et d'une ligne (à basses températures du premier ordre) entre les phases ferrimagnétique et paramagnétique qui sont liés par un point tricritique (grand cercle), et une transition du premier ordre entre les phases ferrimagnétiques  $(-1/2, 1/2)$ ,  $(-1/2, 1)$  se terminant sur un point critique (point final),  $(\alpha = 0.683, t = 0.12)$ , et  $(\alpha = 0.867, t = 0.20)$  figure 2.5h.

Dans le plan  $(t_c, \alpha)$ , on obtient deux topologies des diagrammes de phases en fonction des valeurs de  $d$  sélectionnées. Une des catégories montre la présence de transitions du second ordre et également du premier ordre entre les phases ferrimagnétiques et la phase paramagnétique pour des valeurs de  $d > 2$ , illustrées aux figures 2.5g et 5h ; Ensuite, dans la deuxième catégorie, toutes les transitions entre les phases ferrimagnétique et paramagnétique (ordre - désordre) sont du second ordre, représentées aux figures 2.5a, 5b, 5c, 5d et 5e.

Il est intéressant de noter que nos résultats concernant l'apparition, à basse température, d'une ligne de transition du premier ordre terminée sur un point critique isolé (critical end point) sont en accord avec d'autres travaux utilisant les méthodes MFA [34, 36, 45] et la simulation Monte Carlo [52, 53].

### 3.3 Propriétés magnétiques

Dans cette section, nous nous intéressons aux propriétés magnétiques (aimantations) qui caractérisent les différentes phases vues dans les diagrammes de phases précédents en fonction de la température  $t$  pour des valeurs fixes de  $d$  et  $\alpha$ , illustrées aux figures (2.6, 2.8). Dans les figures (2.9 - 2.10), l'aimantation est présentée en fonction de  $d$  pour des valeurs fixes de  $t$  et  $\alpha$ . La dernière étude de l'aimantation en fonction de  $\alpha$  pour des valeurs fixes de  $d$  et  $t$ , est illustrée sur figure 2.11.

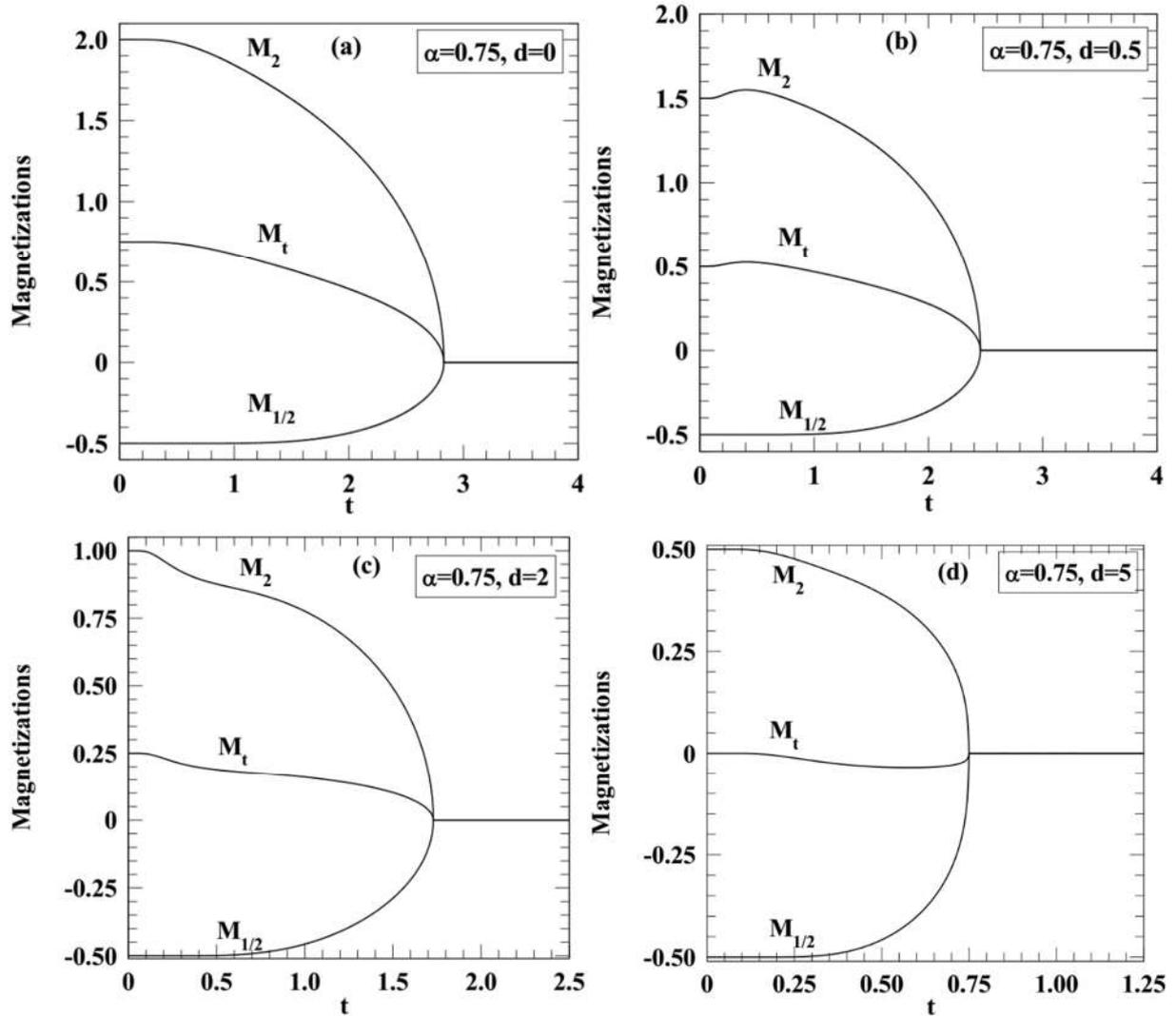
#### 3.3.1 La variation thermique de la magnétisation

Afin d'obtenir la preuve de l'existence de phases  $(-1/2, 3/2)$  et  $(-1/2, 1/2)$  à l'état fondamental, ce qui est inhabituel pour un système à spins mixtes  $(1/2, 2)$ , nous avons étudié les variations thermiques de l'aimantation. Comme le montre la figure 2.6(a-d), pour  $\alpha = 0.75$  et  $d = 0, d = 0.5, d = 2$  et  $d = 5$ , l'aimantation part des valeurs de l'état fondamental (saturées), c'est-à-dire des valeurs d'aimantation à  $t = 0$ :  $(-1/2, 2)$  pour  $\alpha = 0.75$  et  $d = 0$ ,  $(-1/2, 3/2)$  pour  $\alpha = 0.75$  et  $d = 0.5$ ,  $(-1/2, 1)$  pour  $\alpha = 0.75$  et  $d = 2$ ,  $(-1/2, 1/2)$  pour  $\alpha = 0.75$  et  $d = 5$ ; Ceci est conforme au diagramme de phases de l'état fondamental (figure 2.1).

En plus de la température critique, des points de compensation apparaissent dans le système. La température de compensation réduite  $t_{comp} = T_{comp} / J$  est située en dessous de la température critique réduite  $t_c$ . En dehors de la théorie de Neil, ce phénomène de compensation a été découvert expérimentalement dans  $(Ni_{0.22}^{II}Mn_{0.6}^{II}Fe_{0.18}^{II})_{15}(Cr^{III}(Cn)_6)7.6H_2O$  [54]. Où

$t_{\text{comp}}$  est défini à partir de la condition  $|\mathbf{M}_t| = 0$  pour  $t_{\text{comp}} < t_c$ , où  $|\mathbf{M}_t|$  est la magnétisation totale du système, donnée par :

$$|M_t| = \frac{|M_\sigma + M_S|}{2} \quad (2.11)$$

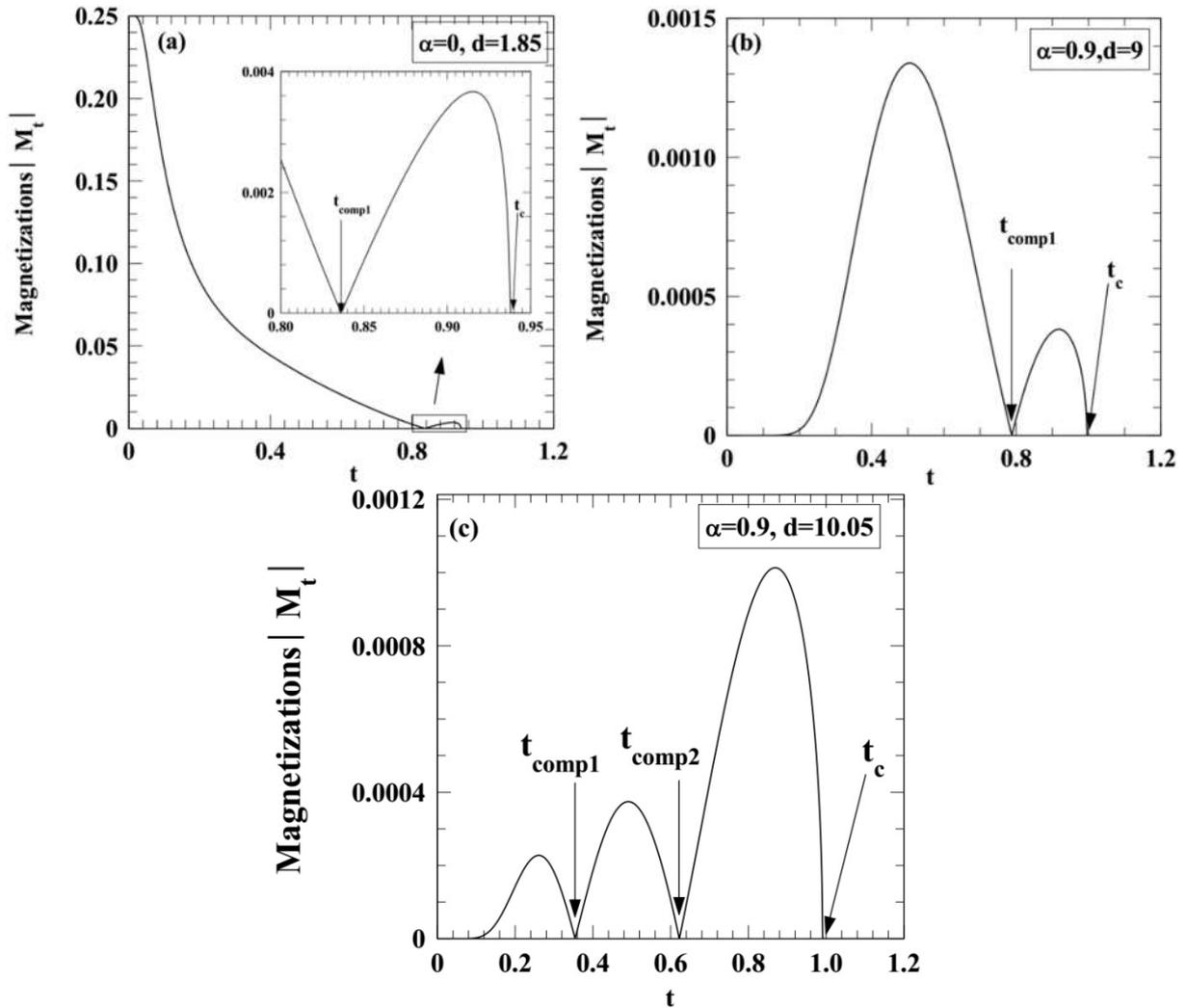


**Figure 2.6.** Les variations thermiques des aimantations  $M_{1/2}$ ,  $M_2$  et  $M_t = (M_{1/2} + M_2) / 2$  pour des valeurs du champ cristallin fixes et du paramètre  $\alpha$  ( $\alpha = 0.75$ ,  $d = 0$ ) dans (a), ( $\alpha = 0.75$ ,  $d = 0.5$ ) dans (b), ( $\alpha = 0.75$ ,  $d = 2$ ) dans (c), ( $\alpha = 0.75$ ,  $d = 5$ ) dans (d).

De plus, nous avons également présenté trois courbes pour les variations thermiques de la magnétisation totale  $|\mathbf{M}_t|$  indiquant l'existence de la température de compensation.

Dans la première, c'est-à-dire la [figure 2.7a](#), le système ne fournit qu'une seule température de compensation non nulle,  $t_{\text{comp}}$ , pour  $d = 1.85$  et  $\alpha = 0$  à environ  $t_{\text{comp}} = 0.836$  où l'aimantation  $|\mathbf{M}_t|$  devient zéro avant la température critique  $t_c$ . Mais pour les valeurs plus élevées du champ cristallin réduit, par exemple pour  $d = 9.0$  et  $\alpha = 0.9$  comme sur la [figure](#)

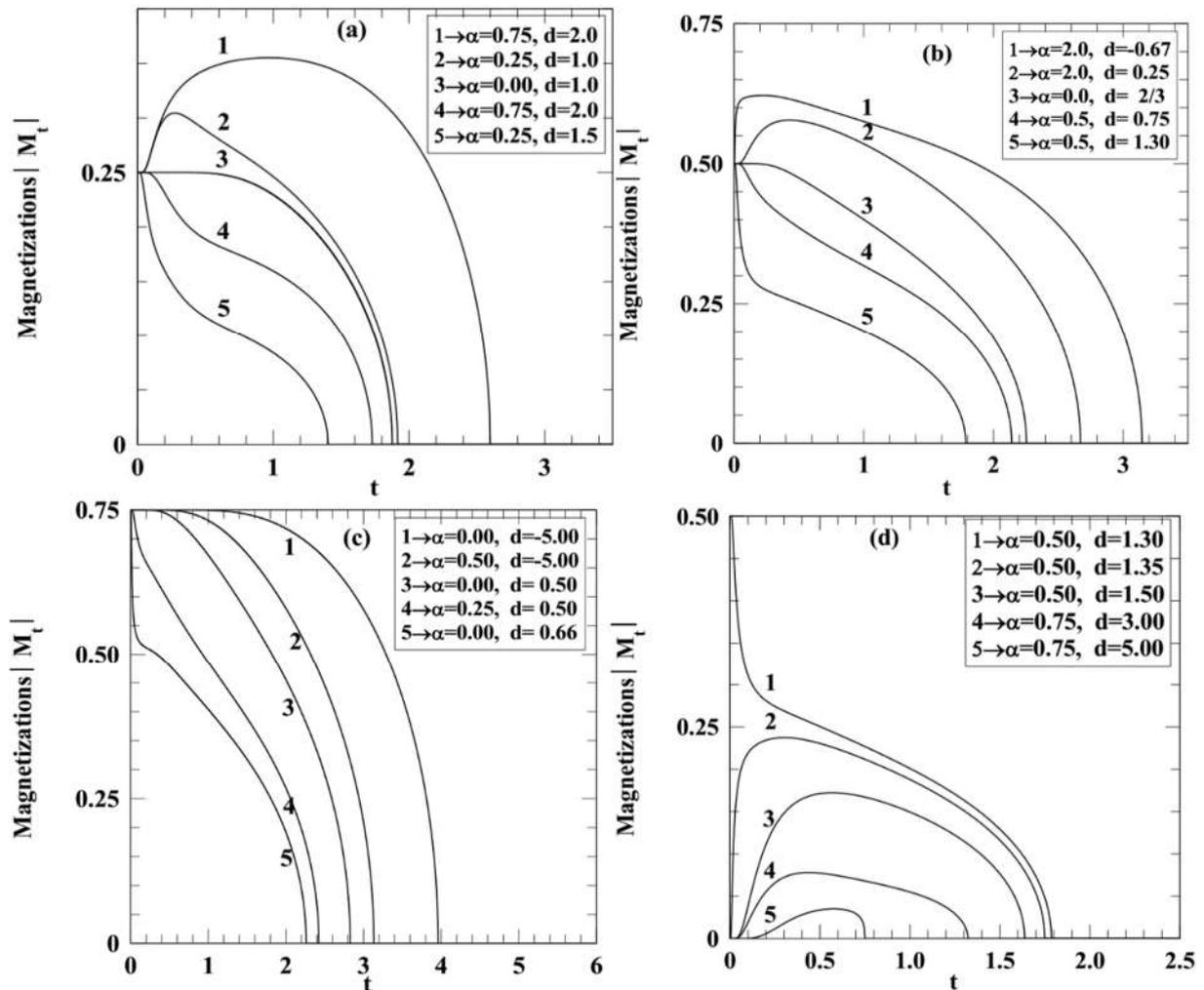
2.7b, le système possède deux températures de compensation ; la première concerne approximativement  $t_{\text{comp}} = 0.787$ , en plus de la température de compensation zéro. Sur la [figure 2.7c](#), pour  $d = 10.05$  et  $\alpha = 0.9$ , par exemple, en plus de la température de compensation nulle, nous constatons l'existence de deux autres températures de compensation, approximativement la première à  $t_{\text{comp}} = 0.354$  et la seconde à environ  $t_{\text{comp}}=0.622$ .



**Figure 2.7.** Les variations thermiques de l'aimantation moyenne des sous-réseaux montrent l'existence des températures de compensation  $t_{\text{comp}}$ , pour ( $\alpha = 0$ ,  $d = 1.85$ ) dans (a), ( $\alpha = 0.9$ ,  $d = 9.0$ ) dans (b) et ( $\alpha = 0.9$ ,  $d = 10.05$ ) dans (c).

D'autre part, nous savons maintenant, d'après les [figures 2.7a, 7c et 2.8 \(a-b\)](#), que le système présente tous les types de comportement de la variation thermique de  $|M_t|$  prédite dans la théorie de ferrimagnétisme de Néel [42]. Par exemple, le comportement de type Q ([Figure 2.8c](#)) pour ( $\alpha = 0$ ,  $d = -5$ ), de type N ([Figure 2.7a](#)) pour ( $\alpha = 0$ ,  $d = 1.85$ ), de type P ([Figure 2.8a](#)) pour ( $\alpha = 0.25$ ,  $d = 1$ ), de type S ([Figure 2.8a](#)) pour ( $\alpha = 0.75$ ,  $d = 2$ ), de type W ([Figure 2.7c](#)) pour ( $\alpha = 0.9$ ,  $d = 10.05$ ) et type L ([Figure 2.8d](#)) pour ( $\alpha = 0.75$ ,  $d = 5,00$ ).

À ce stade, il convient de noter qu'un nouveau phénomène imprévu dans la théorie du ferrimagnétisme de Néel [42] est obtenu dans le système actuel. Comme le montre la courbe (Figure 2.8d) pour les valeurs ( $\alpha = 0.5, d = 1.3$ ), nous observons une chute rapide de  $|M_t|$  avec l'augmentation de  $t$  à très basses températures, puis la variation de  $|M_t|$  en fonction de  $t$  est quelque peu similaire à celle prévue pour les matériaux ferrimagnétiques de type Q. Une telle variation thermique caractéristique de  $|M_t|$  est similaire à celle observée dans les ferrites amorphes [11] et dans le système ferrimagnétique à spins mixtes (1/2, 3/2) [30].

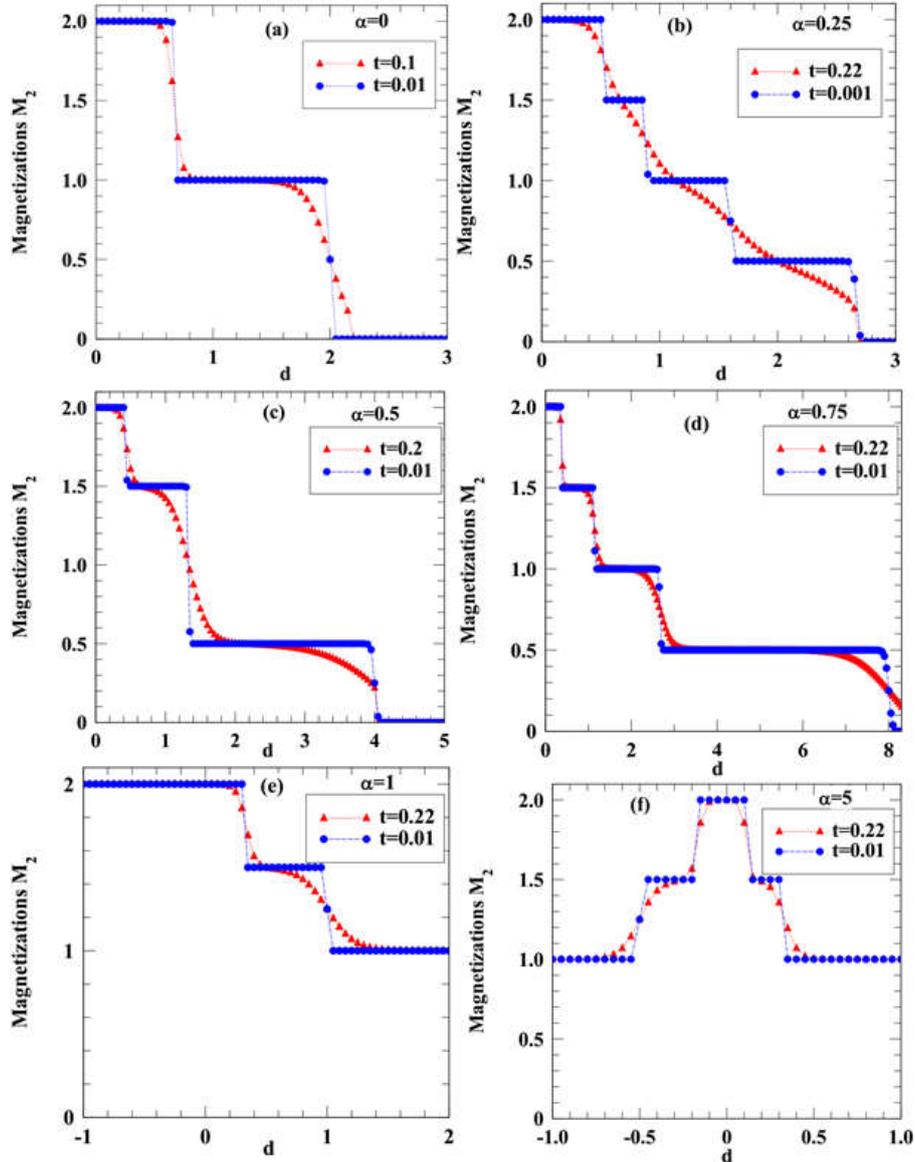


**Figure 2.8.** Les variations thermiques de l'aimantation  $|M_t|$  du système lorsque les valeurs de  $\alpha$  et  $d$  sont modifiées.

### 3.3.2 La dépendance de la magnétisation en fonction du champ cristallin, $t$ et $\alpha$ sont fixes.

Les figures 2.9(a-e) montrent la dépendance en température des aimantations en fonction de  $d$  pour  $\alpha = 0, \alpha = 0.25, \alpha = 0.5, \alpha = 0.75, \alpha = 1$  et  $\alpha = 5$ , respectivement.

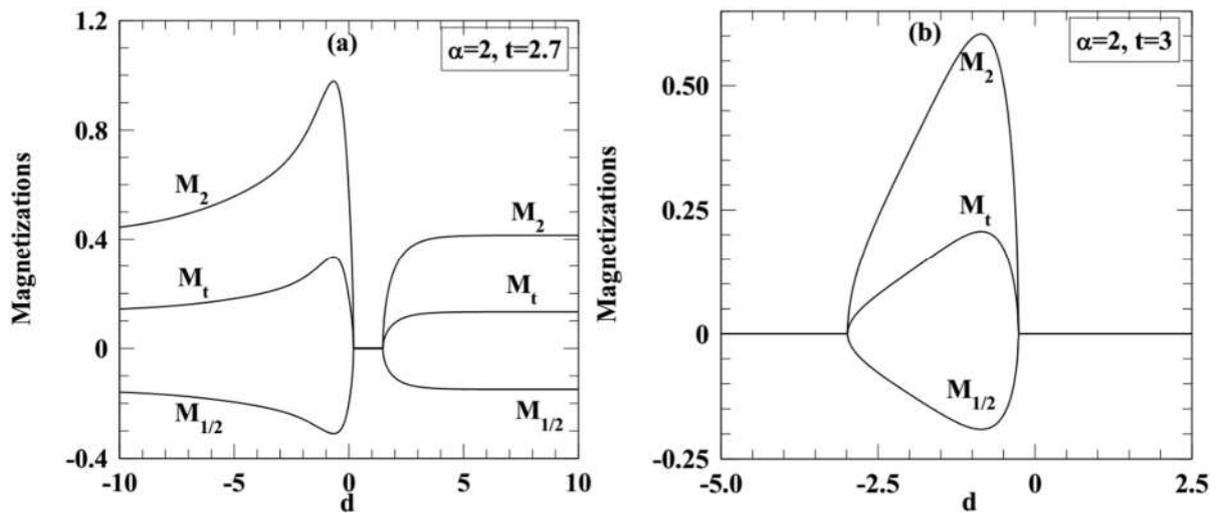
Par exemple, sur la [figure 2.9a](#), l'aimantation  $M_2$  représente un double saut et une transition continue de 2 à 1 et de 1 à 0, pour des températures respectivement inférieures et supérieures à la température correspondant au point critique isolé (isolated critical point).



**Figure 2.9:** les variations de l'aimantation  $M_2$  en fonction du champ cristallin réduit  $d$  pour une valeur fixe de  $\alpha$  à des températures réduites fixes:  $\alpha = 0$  et ( $t = 0.01$  et  $t = 0.1$ ) (a),  $\alpha = 0.25$  et ( $t = 0.001$  et  $t = 0.22$ ) (b),  $\alpha = 0.5$  ( $t = 0.01$  et  $t = 0.2$ ) (c),  $\alpha = 0,75$  ( $t = 0.01$  et  $t = 0.22$ ) (d),  $\alpha = 0.5$  ( $t = 0.01$  et  $t = 0.22$ ) (e) et  $\alpha = 5$  ( $t = 0.01$  et  $t = 0.22$ ) (f) respectivement.

Le comportement réentrant observé sur la [figure 2.2d](#) est bien illustré sur la [figure 2.9f](#), nous observons le même effet du champ cristallin  $d$  pour  $d < 0.0$  et  $d > 0.0$ , ainsi que sur les [figures 2.10a](#) et [2.10b](#), où les aimantations  $M_{1/2}$  et  $M_2$  sont tracées, pour  $\alpha = 2.0$ , à deux températures  $t = 2.7$  et  $t = 3.0$ , respectivement. La [figure 2.10a](#) montre que pour  $t = 2.7$ , les aimantations  $M_{1/2}$ ,  $M_2$  et par conséquent  $M_t$  tombent à zéro dans la région  $0.15 < d < 1.92$ . Par contre, la [figure 2.10b](#) montre que pour une température plus élevée  $t = 3.0$ , ce phénomène est

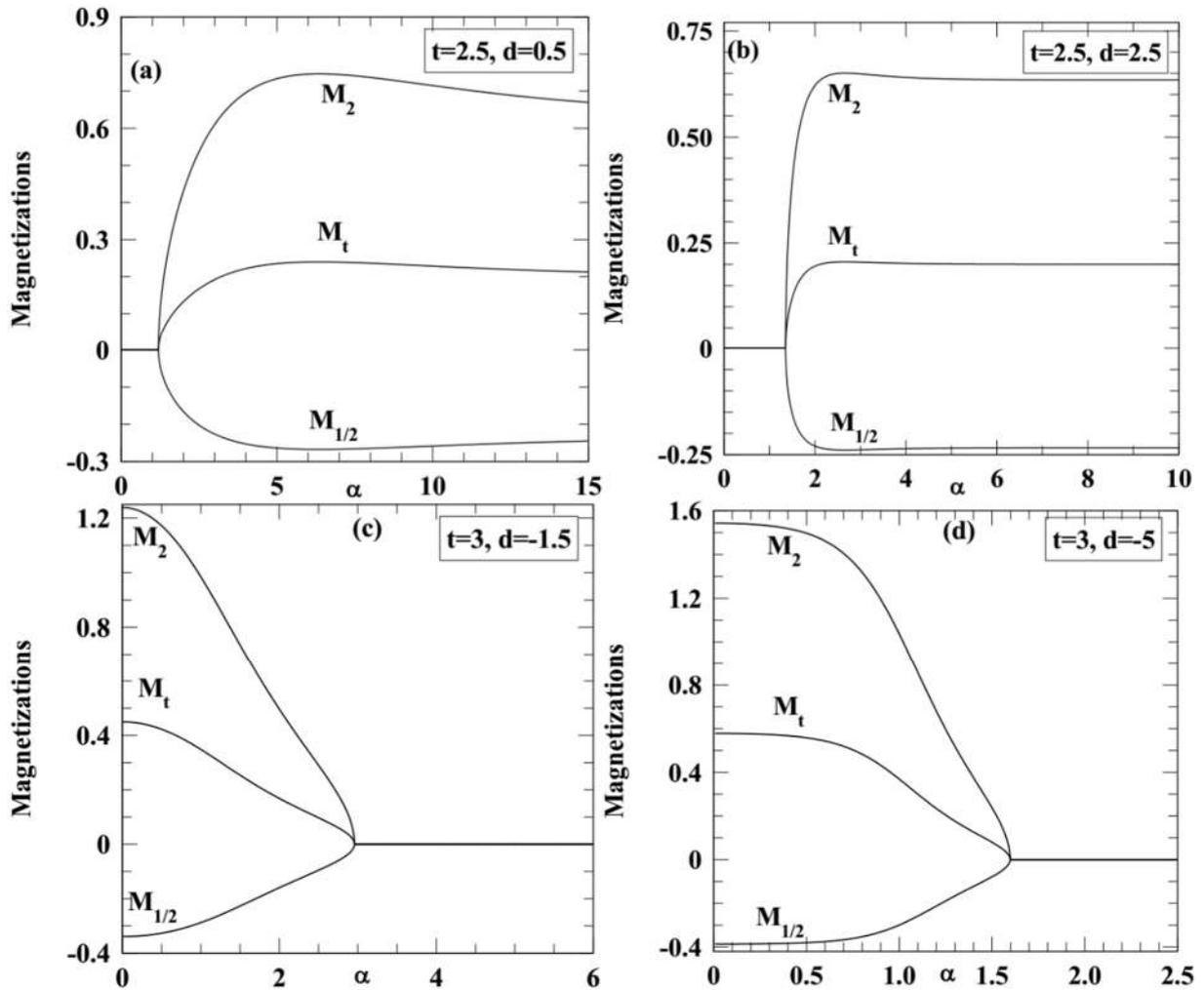
inversé dans la région  $-3.0 < d < -0.26$ , de sorte que les aimantations  $M_{1/2}$ ,  $M_2$  et par conséquent  $M_t$  sont nulles en dehors de cette région. Ceci est à nouveau conforme à la [figure 2.2d](#).



**Figure 2.10.** Les aimantations  $M_{1/2}$ ,  $M_2$  et  $M_t = (M_{1/2} + M_2) / 2$  en fonction du champ cristallin réduit  $d$  pour  $\alpha = 2$  et de deux valeurs de température :  $t = 2.7$  (a) et  $t = 3.0$  (b).

### 3.3.3 La dépendance de l'aimantation en fonction de $\alpha$ , avec $t$ et $d$ sont fixées.

Le comportement des aimantations  $M_{1/2}$ ,  $M_2$  et  $M_t$  en fonction du paramètre  $\alpha$  pour les valeurs fixes du champ cristallin et de la température a été étudié. Les [Figures 2.11\(a-d\)](#) montrent ces aimantations en fonction de  $\alpha$  pour  $(d = 0.5, t = 2.5)$ ,  $(d = 2.5, t = 2.5)$ ,  $(d = -1.5, t = 3)$  et  $(d = -5, t = 3)$ , respectivement. Les [figures 2.11a](#) et [2.11b](#) montrent que pour les valeurs positives du champ cristallin, l'augmentation des valeurs de  $\alpha$  a pour effet de favoriser la phase ordonnée, dans une région de températures inférieures à  $t_c$ . Par contre, pour les valeurs négatives du champ cristallin, le paramètre  $\alpha$  favorise le désordre pour  $t = 3$ , les aimantations  $M_{1/2}$ ,  $M_2$  et par conséquent  $M_t$  s'annule, des comportements similaires ont déjà été observés dans les références [\[50-51\]](#).



**Figure 2.11.** Les aimantations  $M_{1/2}$ ,  $M_2$  et  $M_t$  en fonction du paramètre  $\alpha$  pour les valeurs de champ cristallin fixes et la température ( $d = 0.5$ ,  $t = 2.5$ ) dans (a), ( $d = 2.5$ ,  $t = 2.5$ ) dans (b), ( $d = -1.5$ ,  $t = 3.0$ ) dans (c) et ( $d = -5.0$ ,  $t = 3.0$ ) dans (d).

## 4 Conclusion

En utilisant l'approche du champ moyen, nous avons étudié les effets du champ cristallin aléatoire sur les propriétés magnétiques d'un système ferrimagnétique à spins mixtes (1/2 ; 2) aux sites d'un réseau carré. Afin d'obtenir l'énergie libre du système considéré, nous avons bénéficié de la condition de minimisation de l'énergie libre, nous avons trouvé l'équation d'état du champ moyen. L'état fondamental du système est déterminé et la magnétisation totale est tracée en fonction des paramètres du modèle et nous avons représenté le diagramme de phase dans le plan ( $d$ ,  $t$ ) pour différentes valeurs du paramètre  $\alpha$ . Nous avons obtenu de nombreux résultats intéressants, en particulier plusieurs topologies différentes de diagrammes de phases. De plus, les phases ferrimagnétiques inhabituelles (-1/2, 3/2) et (-1/2, 1/2) sont illustrées par divers diagrammes de phases avec des points critiques et multicritiques. Aussi, nous avons obtenu des comportements intéressants dans la variation thermique de la magnétisation totale ;

certaines comportements n'étaient pas prévus dans la théorie du ferrimagnétisme de Néel. À des basses températures, des points critiques isolés limitant les transitions de phases du premier ordre dans le domaine ordonné ont été déterminés. Le système a également un point tricritique qui reste stable pour  $z \geq 4$ . Des points de compensation ont été identifiés et le système a également un comportement réentrant. Enfin, nous sommes généralement en accord avec plusieurs résultats déjà établis dans la littérature. Nous espérons que les résultats obtenus dans ce travail seront utiles lors de l'analyse des données expérimentales des matériaux ferrimagnétiques.

## Références

- [1] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford Univ. Press, New York, 1971).
- [2] R. J. Baxter, *Exactly Solvable Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [3] C.-K. Hu, *Chinese J. Phys.* 52 (2014) 1-76.
- [4] Y. Ohno, D.K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, D.D. Awschalom, *Nature* 402 (1999) 790–792.
- [5] H.P.D. Shieh, M.H. Kryder, *Appl. Phys. Lett.* 49 (1986) 473-474.
- [6] M. Mansuripur, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 1580.
- [7] M. Barbic, *J. Magn. Magn. Mater.* 249 (2002) 357–367.
- [8] M.B. Johnson, *United States Patent*, Patent No. US 6,169,687 B1 (2001) 1-6.
- [9] O. Kahn, *Magnetism of the Heteropolymetallic Systems*, In: *Theoretical Approaches: Structure and Bonding*, vol 68, *Springer*, Berlin, Heidelberg.
- [10] M. Drillon, E. Coronado, R. Georges, J. C. Gianduzzo, J. Curely, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 10992.
- [11] S. Zouhair, M. Monkade, M. Bourass, A. El Antari, M. El Bouziani, M. Madani, A. Alrajhi, *J. Supercond. Nov. Magn.* (2018), DOI: <https://doi.org/10.1007/s10948-018-4669-9>.
- [12] A. Benyoussef, A. El Kenz, T. Kaneyoshi, *J. Magn. Magn. Mat.* 131 (1994) 173-178.
- [13] T. Kaneyoshi, Y. Nakamura, S Shin, *J. Phys.: Condens. Matter* 10 (1998) 7025–7035
- [14] M Jascur, T. Kaneyoshi, *I. Phys. : Condens. Matter* 5 (1993) 6313-6322.
- [15] Y. Nakamura, S. Shin, T. Kaneyoshi, *Physica B* 284-288 (2000) 1479-1480.
- [16] L. Bahmad, M.R. Benayad, A. Benyoussef, A. El Kenz, *Acta Physica Polonica A* 119 (2011) 740-746.
- [17] J.A. Plascak, *Physica A* 198 (1993) 655-665.
- [18] J.S. da Cruz Filho, M. Godoy, A.S. de Arruda, *Physica A* 392 (2013) 6247–6254.
- [19] O.F. Abubrig, D. Horvath, A. Bobak, M. Jascur, *Physica A* 296 (2001) 437–450.
- [20] S. Naji, A. Belhaj, H. Labrim, L. Bahmad A. Benyoussef, A. El Kenz, *Acta Physica Polonica B* 45 (2014) 947.
- [21] F. El Hallani, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef, L. Bahmad, *Acta Physica Polonica A* 120 (2011) 485.
- [22] Y. Nakamura, J. W. Tucker, *IEEE: Transactions on Magnetism* 38 (2002) 2406.
- [23] Y. Yuksel, E. Aydner, H. Polat, *J. Magn. Magn. Mater.* 323 (2011) 3168–3175.

- [24] Y. Nakamura, *J. Phys. : Condens. Matter* 12 (2000) 4067–4074.
- [25] J. Oitmaa, W. Zheng, *Physica A* 328 (2003) 185–192.
- [26] T. Kaneyoshi, *Physica A* 205 (1994) 677-686.
- [27] G.M. Buendia and J.A. Liendo, *J. Phys.: Condens. Matter* 9 (1997) 5439–5448.
- [28] E. Albayrak, A. Yigit, *phys. stat. sol. B* 242 (2005) 1510–1521.
- [29] J. Strecka, *Physica A* 360 (2006) 379–390.
- [30] A. Bobak, F.O. Abubrig, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 224405.
- [31] A. Maritan, M. Cieplak, M.R. Swift, F. Toigo, J.R. Banavar, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 221.
- [32] C. Buzano, A. Maritan, A. Pelizzola, *J. Phys. Condens. Matter* 6 (1994) 327.
- [33] N.S. Branco, B.M. Boechat, *Phys. Rev. B* 56 (1997) 11673.
- [34] L. Bahmad, A. Benyoussef, A. El Kenz, *Physica A* 387 (2008) 825–833.
- [35] N. Boccara, A. El Kenz, M. Saber, *J. Phys. Condens. Matter* 1 (1989) 5721.
- [36] L. Bahmad, A. Benyoussef, and A. El Kenz, *Phys. Rev. B* 76, (2007) 094412: 1-7.
- [37] N.N. Bogoliubov, *J. Phys. (USSR)* 11 (1947) 23.
- [38] R.P. Feynmann, *Phys. Rev.* 97 (1955) 660.
- [39] H. Falk, *Am. J. Phys.* 38 (1970) 858.
- [40] J. J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, M.E.J. Newman, the Theory of Critical Phenomena, *Clarendon Press, Oxford*, 1992.
- [41] B. Deviren, E. Kantar, M. Keskin, *J. Kor. Phys. Soc.* 56 (2010) 1738-1747.
- [42] L. Néel. *Ann. Phys.* 3 (1948) 137.
- [43] L. Onsager, *Phys. Rev.* 65 (1944) 117.
- [44] A.F. Siqueira, I.P. Fittipaldi, *Physica A* 138 (1986) 592-611.
- [45] S. Sabri, M. EL Falaki, M. EL Yadari, A. Benyoussef, A. EL Kenz, *Physica A* 460 (2016) 210-221.
- [46] H. Zahir, T. Bahlagui, A. El Kenz, M. El Bouziani, A. Benyoussef, A. Hasnaoui, K. Sbiaai, *J. Supercond. Nov. Magn.* (2018), DOI: <https://doi.org/10.1007/s10948-018-4768-7>.
- [47] A. Dakhama, M. Azhari, and N. Benayad, *J. Phys. Commun.* 2 (2018) 065011.
- [48] A. El Antari, H. Zahir, A. Hasnaoui, N. Hachem, A. Alrajhi, M. Madani, M. El Bouziani, *Int. J. Theor. Phys.* (2018), DOI : <https://doi.org/10.1007/s10773-018-3756-9>.
- [49] E. Albayrak, *Chin. J. Phys.* (2018), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2018.07.002>.
- [50] T. Kaneyoshi, *J. Phys. Chem. Solids* 119 (2018) 202.
- [51] T. Kaneyoshi, *J. Magn. Magn. Mater.* 458 (2018) 75.

- [52] D. Peno Lara, J.A. Plascak, *Physica A* 260, 443 (1998).
- [53] G. Wei, Q. Zhang, Y. Gu, *J. Magn. Magn. Mater.* 301, 245 (2006).
- [54] S. Ohkoshi, Y. Abe, A. Fyishuma, K. Hashimoto, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 1285.

# Chapitre 3

---

*Groupe de renormalisation de  
Migdal-Kadanoff appliqué au  
modèle mixte de spin- $\frac{1}{2}$  et de  
spin-2*

---

Dans ce chapitre, Nous allons utiliser la technique du groupe de renormalisation Migdal–Kadanoff (GR-MK) en espace réel pour étudier le modèle de Blume-Campel (BC) à spins mixtes ( $\sigma = 1/2$ ,  $S = 2$ ) sur deux sous réseaux ( $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ) alternés. Ces deux sous-réseaux sont entrelacés les uns avec les autres, ayant des dimensions  $\mathbf{d}$  avec des interactions d'échange  $\mathbf{J}$  entre les premiers proches voisins et un champ cristallin uniforme  $\Delta$  aux sites de spin  $S = 2$ . Tout d'abord, nous allons déterminer les équations de récurrence associées à la technique GR-MK. Par conséquent, nous allons donner une analyse détaillée des points fixes. Ainsi ; nous allons présenter les diagrammes de phase ( $\mathbf{T} > \mathbf{0K}$ ) du modèle dans les deux plans ( $\mathbf{J}$ ,  $\Delta$ ) et ( $1/\mathbf{J}$ ,  $\Delta/\mathbf{J}$ ) ainsi que le diagramme d'état fondamental du système (à température nulle). Enfin, nous allons examiner les diagrammes de l'énergie libre et leurs dérivés, les points critiques, les lignes de transition de phase de second et de premier ordre et donc l'existence des points tricritiques et du phénomène de réentrance.

## 1 Introduction

Récemment, les études des deux systèmes ferrimagnétique ou ferromagnétique d'Ising à spins mixtes spin- $\sigma$  et spin- $S$  (avec  $\sigma \neq S$ ) sur deux sous-réseaux a reçu beaucoup d'attention. La raison de cet intérêt pour les systèmes mixtes qui ont moins de symétrie de translation par rapport à leurs homologues simples n'est pas seulement théorique, mais aussi expérimentale car certains types de matériaux magnétiques à base moléculaire sont constitués de spins mixtes. Par exemple, on cite le composé moléculaire  $(Ni_{0.22}Mn_{0.6}Fe_{0.18})_{15}(Cr^{III}(Cn)_6)7.6H_2O$  [1]. L'ordre ferrimagnétique semble jouer un rôle crucial dans ces matériaux magnétiques à base moléculaire, par conséquent l'étude du ferrimagnétisme est devenue rapidement un domaine de recherche très actif.

Le système d'Ising à spins mixtes sur deux sous-réseaux composés de spin- $1/2$  et de spin- $S$  ( $S > 1/2$ ) a été étudié pendant un certain temps comme un modèle simple de ferrimagnétisme par des méthodes bien connues de la physique statistique à l'équilibre telles que l'approximation du champ moyen (MFA) [2-5], la théorie du champ effectif (EFA) [6-8], la simulation de Monte Carlo (MCS) [9-11] et le groupe de renormalisation (RG) [12-15]. Un intérêt renouvelé s'est récemment manifesté pour les points tricritiques et de compensations en raison de ces applications technologiques.

Plusieurs combinaisons de systèmes ferrimagnétiques Ising à spins mixtes sont possibles : Les systèmes à spins mixtes les plus étudiés sont ceux qui ont les valeurs de spin les plus faibles, car plus les valeurs de spin sont faibles, plus le nombre d'états est faible (avec  $|\sigma - S| = 1/2$  ou 1). Le plus simple d'entre eux est probablement le système d'Ising à spins mixtes spin-1/2 et spin-1. Il a été étudié à l'aide de nombreuses techniques, y compris la technique du groupe de renormalisation [16], les extensions de séries à haute température [17], l'approximation du fermion libre [18], la méthode des équations de récursions exactes sur le réseau de Bethe [19], l'approximation de Bethe-Peierls [20], la théorie du champ effectif [21, 22], l'approximation du champ moyen [23, 24], l'approximation des clusters finis [25], la simulation de Monte-Carlo [26, 27], la technique des groupes de renormalisation en champ moyen [28], la matrice de transfert numérique [27] et la méthode de variation des clusters [29]. Après le système d'Ising à spins mixtes spin-1/2 et spin-1, la prochaine possibilité y compris le spin-1/2, est les systèmes des spins mixtes spin-1/2 et de spin-3/2. Ce système a également fait l'objet d'un grand nombre d'études théoriques. En particulier, ces études incluaient des travaux du modèle d'Ising à champ cristallin transverse dans le cadre de la théorie du champ effectif, ayons des corrélations sur le réseau en nid d'abeille [30], un réseau carré en utilisant la théorie du champ effectif [31, 32], et aussi sur un réseau carré avec un algorithme de Monte Carlo [33], également aussi sur le réseau Bethe en utilisant des relations de récursions exactes [34]. De toute évidence, le prochain système à spins mixtes possibles y a compris le spin-1/2 est le système spin-2 et spin-1/2.

Bien qu'il n'y ait pas beaucoup d'études concernant un système mixte de spin-2 et spin-S, on trouve que parmi ces systèmes mixtes le système à spins mixtes (2, 5/2) est les plus étudié. En particulier, l'étude des propriétés magnétiques d'un système d'Heisenberg ferrimagnétique à spins mixtes (2, 5/2) sur deux sous-réseaux en nids d'abeilles des multi-couches. Étudiée théoriquement par la fonction de Green, cette technique prend en compte la nature quantique des spins d'Heisenberg [35]. Dans le cadre de la simulation de Monte Carlo, le système d'Ising ferromagnétique ou ferrimagnétique à spins mixtes spin-5/2 et spin-2 a été étudié [36]. Sous l'effet des paramètres hamiltoniens (les couplages d'échange, le cristal et les champs magnétiques), des phénomènes intéressants ont été mis en évidence. En particulier, le système présente la transition du premier ordre, la température de compensation et le champ cristallin de compensation. De plus, la nanoparticule présente des boucles d'hystérésis simples, doubles, triples et quintuples. Dans le cadre de cette dernière méthode, les propriétés magnétiques d'un système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes spin-2 et spin-5/2 sont étudiés sur un réseau en

nid d'abeille [37]. Ils ont constaté que l'interaction intercouches joue l'un des rôles d'avoir un point de compensation. Il est à noter qu'un point de compensation peut être possible même si les interactions intercouches sont nulles, à condition qu'il y ait d'autres interactions à plus longue portée. Les effets du champ sur les propriétés magnétiques dans un système d'Ising dilué des spins mixtes spin-2 et spin-5/2 sont étudiés à l'aide de la théorie du champ effectif [38, 41]. Cette étude s'intéresse en particulier à l'effet d'une anisotropie positive mono-ionique  $\Delta$  sur la température de compensation dans un système pur avec  $\Delta$  uniquement sur des atomes de spin 5/2, afin de clarifier la caractéristique de la dépendance à la température de l'aimantation totale  $M$  observé dans un matériau magnétique à base moléculaire,  $N(n-C_4H_9)_4Fe^{II}Fe^{III}(C_2O_4)_3$ . Les résultats montrent que plusieurs (deux ou trois) points de compensation sont possibles dans le système dilué avec des valeurs spéciales de l'anisotropie mono-ionique et des concentrations d'atomes magnétiques. Des simulations de Monte Carlo ont été réalisées, afin d'étudier les propriétés magnétiques de ce dernier système sur un réseau en nid d'abeilles bidimensionnel [39, 40]. Bien que l'étude conclue qu'un système qui inclut uniquement l'interaction du voisin les plus proche et l'anisotropie mono-ionique sur le spin -2 n'a pas de point de compensation. Le résultat est en contradiction avec ce qui était prédit par la théorie des champs effectifs.

À la fin de ces exemples, je termine avec deux derniers exemples, un peu différent, mais tout aussi intéressants pour le système d'Ising à spins mixtes (1 et 2). La première étude, a été réalisé sur un réseau compose des couches en nid d'abeilles. L'énergie interne, la chaleur spécifique et la sensibilité, l'aimantation, le point de compensation et le diagramme de phase du système ont été examinées en utilisant la théorie du champs effectif avec des corrélations et la simulation de Monte Carlo [42]. À la suite de cette étude, les transitions de phase du premier ordre se produisent lorsque le champ cristallin est inférieur à une valeur critique et cette valeur critique obtenue par MC est plus grande que celle obtenue par EFT ; par EFT, le point de compensation peut se produire, qui est plus petit que celui obtenu par MCS. À basse température, les résultats du système (aimantation, énergie interne et chaleur spécifique) sont les mêmes pour l'EFT et le MCS. Mais à des températures critiques, les résultats sont différents.

De plus, les diagrammes de phase du système d'Ising ferromagnétique à spin mixte spin-1 et spin-2 avec deux interactions du champs cristallins,  $D_A$  pour spin-1 et  $D_B$  pour spin-2, sont étudiés sur le réseau de Bethe par l'utilisation des relations de récursion exacte [43]. Ils ont constaté que les lignes des transitions de phase du premier ordre se terminant soit en un point tricritique soit en un point critique isolé.

Après avoir décrit généralement les résultats relatifs aux systèmes d'Ising à spins mixtes, y compris le spin-1/2 ou spin-2, nous allons maintenant nous concentrer les systèmes d'Ising des spins mixtes spin-1/2 et spin-2. Dans ce contexte, le système à spins mixtes  $S = 1/2$  et  $S = 2$  a récemment fait l'objet d'une attention croissante. Une première tentative d'étude du comportement tricritique de ce système a été effectuée par l'EFT [44] qui a montré l'existence d'un point tricritique lorsque le nombre de coordination  $z \geq 4$ , alors que la simulation par Monte Carlo sur un réseau carré [45] et sur un réseau en nid d'abeilles [46] a montré l'absence d'un point de compensation ou d'un point tricritique. Les résultats exacts sur un réseau carré ont montré l'existence de températures de compensation. En utilisant la technique des équations de récurrence exacte sur le réseau de Bethe [47], les auteurs ont trouvé que le système avait un point tricritique lorsque  $z \geq 5$  ; ils ont également constaté que le système a deux températures de compensation pour  $z \geq 4$ . Aussi, une formulation exacte du système à spins mixtes  $(1/2, S)$  du modèle d'Ising sur un réseau s'appelle "bathroom tile (4, 8)", un réseau a été réalisé afin d'établir des diagrammes de phase précis du modèle d'Ising à spins mixtes  $(1/2, S)$  pour plusieurs valeurs du nombre de spin  $S$ , parmi eux se trouve la valeur  $S=2$  [48].

De plus, nous avons déjà étudié ce système sur un réseau carré avec un champ cristallin aléatoire par l'approximation du champ moyen dans la référence [61]. Nous avons déterminé l'état fondamental du système et la magnétisation totale est représentée en fonction des paramètres du modèle. Nous avons constaté l'apparition d'un ou deux points de compensation et de nombreux types de diagrammes de phase avec des lignes de transition de phase du premier et du second ordre, ainsi que des points critiques isolés et tricritiques. D'autre part, une importante étude de Jun Li et al. sur un système ferrimagnétique d'Heisenberg à spins mixtes 2 et 1/2 dans un réseau carré [62]. Ils ont étudié l'effet des interactions des plus proches voisins et du champ cristallin sur ce système par la technique de la fonction de Green sous l'influence d'un champ externe. Ils ont conclu qu'il n'y a pas de température de compensation lorsque les interactions entre les spins ne comprennent que les premières proches voisins (les plus proches) et le champ cristallin, mais lorsque des interactions à longue portée entre ces spins mixtes sont prises en compte, un point de compensation apparaît. Cette étude a donné des résultats raisonnables pour les propriétés magnétiques sur toute la région de température.

En interagissant avec ces résultats, nous suggérons d'utiliser l'approximation du groupe de normalisation dans l'espace réel, c'est-à-dire de Migdal-Kadanoff [50, 51], pour étudier le système Ising à spins mixtes sur deux sous-réseaux composés de spin-1/2 et de spin-2. Le but de ce chapitre est d'obtenir le système d'équations de récurrence pour le modèle et à

partir de celui-ci obtenir les points fixes et donc toutes les fonctions thermodynamiques d'intérêt en termes de relations de récurrence, et enfin obtenir les diagrammes de phases du système dans les plans  $(k_B T/J, \Delta/J)$  et  $(J, \Delta)$  pour étudier l'influence du champ cristallin sur les diagrammes de phases.

Dans ce chapitre, nous considérons le système d'Ising à spins mixtes ( $\sigma = 1/2, S = 2$ ) sur deux sous réseaux, situé dans des sites alternés d'un réseau hypercube de dimension  $d$ . Un sous-réseau (A) a des spins  $\sigma$  supposés prendre les valeurs :  $\pm 1/2$ , l'autre sous-réseau (B) a des spins  $S$  qui peuvent prendre les valeurs :  $\pm 2, \pm 1$  et  $0$ . Les spins  $S$  n'ont que les spins  $\sigma$  comme voisins les plus proches et vice versa. L'hamiltonien du système est décrit par l'équation (3.1) :

$$-\beta H = \beta j \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + \beta \delta \sum_{j \in A} S_j^2, \quad (3.1)$$

Où  $\langle i,j \rangle$  désigne une sommation effectuée sur les couples des sites les plus proches voisins,  $z = 2d$  est le nombre de premiers proches voisins,  $d$  est la dimension géométrique du réseau,  $j$  est le paramètre d'interaction d'échange supposé positif,  $\delta$  le champ cristallin des spins  $S$  et  $\beta = (k_B T)^{-1}$  (avec  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température absolue).

Considérons le champ cristallin réduit des spins  $S$   $\Delta = \beta \delta$  et l'interaction d'échange réduite  $J = \beta j$ , la relation 3.1 devient

$$-\beta H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + \Delta \sum_{j \in A} S_j^2, \quad (3.2)$$

Dans tout ce qui suit,  $t$  dénote la température réduite  $t = J^{-1} = k_B T / j$ .

La suite de ce chapitre est organisée comme suit : La section 2 est consacrée à l'introduction du modèle et des détails de l'approximation et de l'analyse des points fixes et des diagrammes de flux des relations de récurrence de Migdal-Kadanoff. Dans la section 3, nous discutons nos résultats. Enfin, dans la section 4, nous présentons notre conclusion.

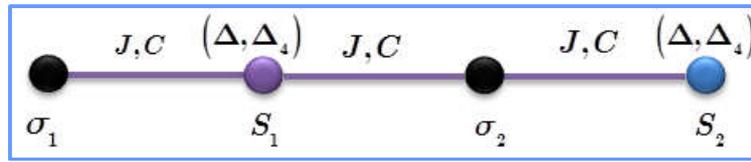
## 2 Modèle et théorie

En raison de la technique du groupe de renormalisation, nous introduisons également deux interactions supplémentaires  $C$  et  $\Delta_4$  pour obtenir des relations de récurrence auto-cohérentes (systèmes des équations homogène c-à-d quatre équations et quatre inconnus) [52, 53]. Par conséquent, l'Hamiltonien que nous utiliserons efficacement dans la partie restante de notre travail est le suivant :

$$-\beta H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + \Delta \sum_{j \in B} S_j^2 + C \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j^3 + \Delta_4 \sum_{i \in B} S_j^4, \quad (3.3)$$

Afin d'obtenir une appréciation qualitative plus fiable des caractéristiques des transitions de phases, nous utilisons une approximation du groupe de renormalisation dans l'espace réel, à savoir celle de Migdal-Kadanoff (XY), qui est réalisée par une décimation des spins puis par un déplacement des liaisons entre les spins dans toutes les directions de l'espace.

Pour prendre en compte l'existence de deux sous-réseaux interpénétrés (A) et (B), il faut choisir le facteur d'échelle comme un entier impair, noté  $b$ , mais pour conserver la symétrie du réseau nous choisissons  $b = 3$ .



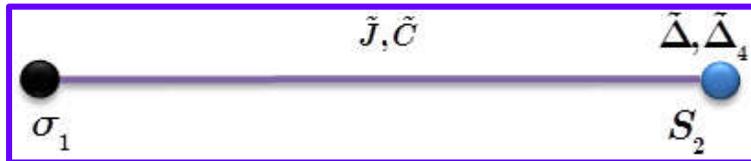
**Figure 3.1.** Chaîne initiale de quatre spins :  $\sigma_1, S_1, \sigma_2$  et  $S_2$

Nous considérons la chaîne unidimensionnelle de la [Figure 3.1](#) avec quatre spins  $\sigma_1, S_1, \sigma_2$  et  $S_2$  (où  $\sigma_1, \sigma_2 \in \{\pm 1/2\}$  et  $S_1, S_2 \in \{0, \pm 1, \pm 2\}$ ).

L'Hamiltonien de l'amas à quatre spins est le suivant :

$$-\beta H = J(\sigma_1 S_1 + S_1 \sigma_2 + \sigma_2 S_2) + \frac{\Delta}{z}(2S_1^2 + S_2^2) + C(\sigma_1 S_1^3 + S_1^3 \sigma_2 + \sigma_2 S_2^3) + \frac{\Delta_4}{z}(2S_1^4 + S_2^4), \quad (3.4)$$

Après avoir effectué la décimation sur les deux spins au milieu  $S_1$  et  $\sigma_2$ , la chaîne précédente devient celle représentée à la [Figure 3.2](#).



**Figure 3.2** Chaîne après décimation sur les deux spins  $S_1$  et  $\sigma_2$

Nous obtenons un cluster à deux spins décrit par l'Hamiltonien réduit suivant  $\tilde{H}$  :

$$-\beta\tilde{H} = \tilde{J} \sigma_1 S_2 + \frac{\tilde{\Delta}}{z} S_2^2 + \tilde{C} \sigma_1 S_2^3 + \frac{\tilde{\Delta}_4}{z} S_2^4, \quad (3.5)$$

Les interactions unidimensionnelles renormalisées  $\tilde{J}$ ,  $\tilde{\Delta}$ ,  $\tilde{\Delta}_4$  et  $\tilde{C}$  sont données en fonction de  $J$ ,  $\Delta$ ,  $\Delta_4$ ,  $C$  et  $z$ .

La transformation de redimensionnement consiste à prendre la trace sur les spins  $S_1$  et  $\sigma_2$ , ce qui génère l'hamiltonien réduit du système ; nous pouvons faire le lien entre (3.4) et (3.5) pour obtenir

$$\sum_{S_1, \sigma_2} e^{-\beta H} = A_0 e^{-\beta \tilde{H}}, \quad (3.6)$$

Avec  $A_0$  une constante produite par les transformations de renormalisation.

Par la suite  $\tilde{J}$ ,  $\tilde{\Delta}$ ,  $\tilde{\Delta}_4$  et  $\tilde{C}$  sont donnés par

$$\tilde{J} = \frac{4}{3} \ln \left[ \frac{F_{\frac{1}{2},1}}{F_{-\frac{1}{2},1}} \right] + \frac{1}{6} \ln \left[ \frac{F_{\frac{1}{2},2}}{F_{-\frac{1}{2},2}} \right], \quad (3.7a)$$

$$\tilde{C} = \frac{1}{3} \ln \left[ \frac{F_{-\frac{1}{2},1}}{F_{\frac{1}{2},1}} \right] + \frac{1}{6} \ln \left[ \frac{F_{\frac{1}{2},2}}{F_{-\frac{1}{2},2}} \right], \quad (3.7b)$$

$$\tilde{\Delta} = Z \ln \left[ \frac{F_{\frac{1}{2},1}^{2/3} \times F_{-\frac{1}{2},1}^{2/3}}{F_{\frac{1}{2},2}^{1/24} \times F_{-\frac{1}{2},2}^{1/24} \times F_{\frac{1}{2},0}^{5/4}} \right], \quad (3.7c)$$

$$\tilde{\Delta}_4 = Z \ln \left[ \frac{F_{\frac{1}{2},2}^{1/24} \times F_{-\frac{1}{2},2}^{1/24} \times F_{\frac{1}{2},0}^{1/4}}{F_{-\frac{1}{2},1}^{1/6} \times F_{\frac{1}{2},1}^{1/6}} \right], \quad (3.7d)$$

Tel que les formules de  $(F_{i,j})$  sont données par

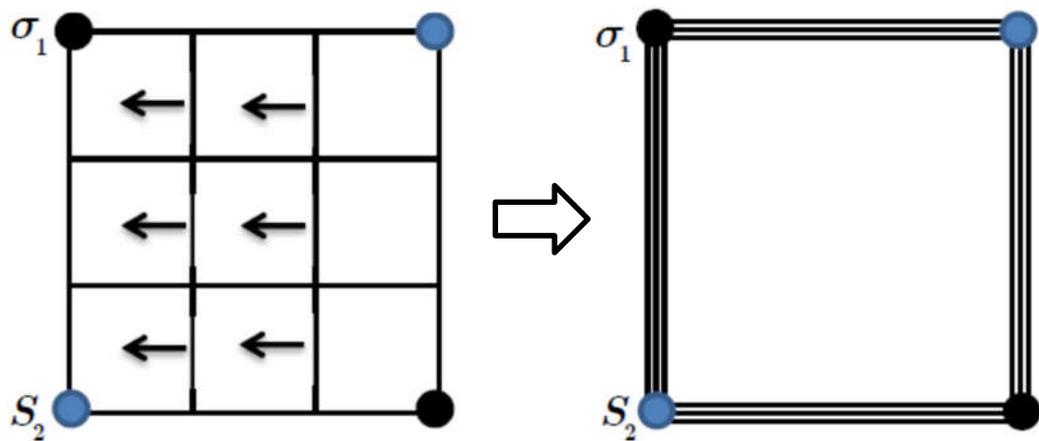
$$F_{\frac{1}{2},2} = 2e^{\frac{12\frac{\Delta}{Z}+48\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{J+4C} \operatorname{ch}(2J+8C) + e^{-J-4C} \right] \\ + 2e^{\frac{6\frac{\Delta}{Z}+18\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{-\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{4\frac{\Delta}{Z}+16\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \operatorname{ch}(J+4C), \quad (3.8a)$$

$$F_{\frac{1}{2},2} = 2e^{\frac{12\frac{\Delta}{Z}+48\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{-J-4C} \operatorname{ch}(2J+8C) + e^{J+4C} \right] \\ + 2e^{\frac{6\frac{\Delta}{Z}+18\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{-\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{4\frac{\Delta}{Z}+16\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \operatorname{ch}(J+4C), \quad (3.8b)$$

$$F_{\frac{1}{2},1} = 2e^{\frac{9\frac{\Delta}{Z}+33\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{J+4C} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{-J-4C} \operatorname{ch}\left(\frac{J+7C}{2}\right) \right] \\ + 2e^{\frac{3\frac{\Delta}{Z}+3\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}(J+C) + e^{-\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{\Delta+\Delta_4}{2}} \operatorname{ch}\left(\frac{J+C}{2}\right), \quad (3.8c)$$

$$F_{\frac{1}{2},1} = 2e^{\frac{9\frac{\Delta}{Z}+33\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{-J-4C} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{J+4C} \operatorname{ch}\left(\frac{J+7C}{2}\right) \right] \\ + 2e^{\frac{3\frac{\Delta}{Z}+3\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \left[ e^{-\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}(J+C) + e^{\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{\Delta+\Delta_4}{2}} \operatorname{ch}\left(\frac{J+C}{2}\right), \quad (3.8d)$$

$$F_{\frac{1}{2},0} = A_0 = 4e^{\frac{8\frac{\Delta}{Z}+32\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \operatorname{ch}^2(J+4C) + 4e^{\frac{2\frac{\Delta}{Z}+2\frac{\Delta_4}{Z}}{2}} \operatorname{ch}^2\left(\frac{J+C}{2}\right) + 2, \quad (3.8e)$$



**Figure 3.3.** Cellule unitaire du schéma Migdal-Kadanoff sur le réseau carré.

La technique du groupe de renormalisation de Migdal-Kadanoff généralise ces transformations précédentes en  $d > 1$  en ajoutant l'étape de déplacement de liaison [50, 51].

L'équation (3.7) peut être exprimée comme une correspondance entre les constantes d'interaction  $K = \{J, C, \Delta_2, \Delta_4\}$  et les constantes d'interaction renormalisées  $\tilde{K} = R(K)$ . Pour plus de simplicité, considérons le cas particulier d'un réseau carré. Comme le montre la Figure 3.3, les interactions d'échange sont multipliées par un facteur de 3 [50, 51]. Pour un réseau hypercubique en  $d$ -dimensions, la procédure de Migdal-Kadanoff renforce les liaisons après la décimation linéaire par un facteur de  $b^{d-1}$ , pour tenir compte de l'effet des liaisons [50, 51]. Les relations de récurrence résultantes pour  $d > 1$  sont,

$$K' = b^{d-1} R(K), \quad (3.9)$$

Les expressions reliant les paramètres des interactions renormalisés et originaux sont facilement obtenues en suivant la procédure décrite ci-dessus. Ils peuvent être exprimés sous la forme suivante (voir Annexe A) :

$$J' = b^{d-1} \frac{4}{3} \ln \left( \frac{F_{\frac{1}{2},1}}{F_{-\frac{1}{2},1}} \right) + b^{d-1} \frac{1}{6} \ln \left( \frac{F_{-\frac{1}{2},2}}{F_{\frac{1}{2},2}} \right), \quad (3.10a)$$

$$\Delta' = Zb^{d-1} \frac{2}{3} \ln \left( F_{\frac{1}{2},1} \times F_{-\frac{1}{2},1} \right) - Zb^{d-1} \frac{1}{24} \ln \left( F_{-\frac{1}{2},2} \times F_{\frac{1}{2},2} \right) - Zb^{d-1} \frac{5}{4} \ln \left( F_{\frac{1}{2},0} \right), \quad (3.10b)$$

$$C' = b^{d-1} \frac{1}{3} \ln \left( \frac{F_{-\frac{1}{2},1}}{F_{\frac{1}{2},1}} \right) + b^{d-1} \frac{1}{6} \ln \left( \frac{F_{\frac{1}{2},2}}{F_{-\frac{1}{2},2}} \right), \quad (3.10c)$$

$$\Delta_4' = Zb^{d-1} \frac{1}{24} \ln \left( F_{\frac{1}{2},2} \times F_{-\frac{1}{2},2} \right) + Zb^{d-1} \frac{1}{4} \ln \left( F_{\frac{1}{2},0} \right) - Zb^{d-1} \frac{1}{6} \ln \left( F_{-\frac{1}{2},1} \times F_{\frac{1}{2},1} \right), \quad (3.10d)$$

En appliquant les transformations (3.10) de manière itérative, on peut suivre le flux RG dans l'espace des paramètres d'Hamiltonien. En conséquence, nous divisons cet espace des paramètres en bassins d'attraction, correspondant aux différentes phases thermodynamiques. Le long des frontières entre ces bassins, on peut obtenir les points fixes, les valeurs propres, les vecteurs propres puis profiter de tous les résultats et concepts de la théorie RG.

## 3 Résultats et discussions

### 3.1 Points fixes et diagrammes de phases

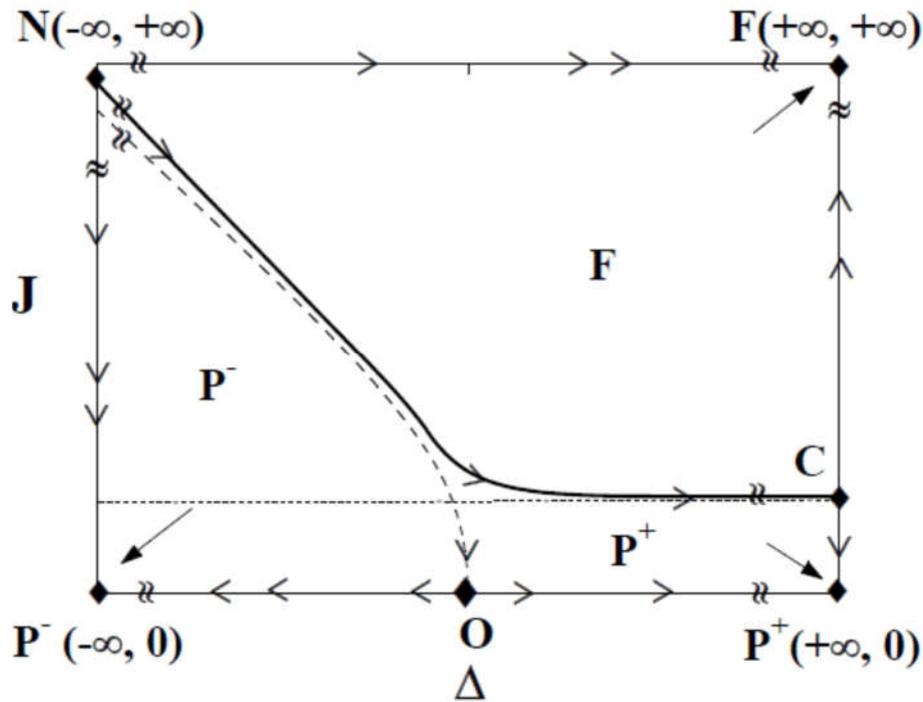
Nous itérons les relations de récurrence (3.10) jusqu'à ce que nous atteignons un point fixe. Ces relations de récursivité donnent un schéma de flux très compliqué dans l'espace des paramètres à quatre dimensions, elles produisent 11 points fixes. Comme nous nous intéressons principalement au diagramme de phases, nous utilisons les équations comme outil de calcul de l'énergie libre. Nous nous limiterons donc à l'analyse des résultats dans l'espace des paramètres ( $\mathbf{J}$ ,  $\Delta$ ). Sur la **figure 3.3 (a-b)**, nous dessinons le diagramme en termes de variables  $\Delta$  et  $\mathbf{J}$  pour  $\mathbf{d} = 2$  et  $\mathbf{d} = 3$  respectivement.

Dans les deux cas, un réseau bidimensionnel et tridimensionnel ( $\mathbf{d} = 2$ ,  $\mathbf{d} = 3$ ), il existe un point fixe ferromagnétique trivial, à température nulle, à savoir  $\mathbf{F}$  ( $\mathbf{J} = +\infty$ ,  $\Delta = -\infty$ ), il y a aussi un point fixe trivial  $\mathbf{N}$ , complètement instable, à température nulle, qui se situe à ( $\mathbf{J} = +\infty$ ,  $\Delta = +\infty$ ), où  $\Delta / \mathbf{J} = -2$  pour  $\mathbf{d} = 2$  alors que  $\Delta / \mathbf{J} = -3$  pour  $\mathbf{d} = 3$ . Il existe aussi deux points fixes paramagnétiques triviaux à  $\mathbf{t} = +\infty$ , soit  $\mathbf{J} = 0$  avec  $\Delta = \pm\infty$ , à savoir  $\mathbf{P}^+$  ( $\mathbf{J} = 0$ ,  $\Delta = +\infty$ ) et  $\mathbf{P}^-$  ( $\mathbf{J} = 0$ ,  $\Delta = -\infty$ ) (voir annexe C), en plus du point fixe critique ordinaire  $\mathbf{O}$  ( $\mathbf{J} = 0$ ,  $\Delta = 0$ ). Outre les points fixes triviaux à hautes et basses températures, il existe également un point fixe non trivial

que nous notons constamment par  $\mathbf{C}$ , qui a situés à  $(\mathbf{J} = \frac{7}{4} \ln\left(\frac{3+\sqrt{5}}{2}\right), \Delta = +\infty)$  qui est

associé à la transition de phase du second ordre en deux dimensions et ( $\mathbf{J} = 11.299$ ,  $\Delta = +\infty$ ) en trois dimensions. Les listes de tous les points fixes pour ce modèle en deux et trois dimensions, leurs coordonnées et les phases ainsi que les transitions qu'ils caractérisent sont données dans le tableau 1, pour plus de détails, voir l'annexe B.

Les diagrammes de phases du groupe renormalisation sont issus de l'étude globale des flux dans l'espace hamiltonien, régis par des points fixes. Sur la **figure 3.4**, nous dessinons le diagramme en termes de variables  $\Delta$  et  $\mathbf{J}$  pour  $\mathbf{d} = 2$  et  $\mathbf{d} = 3$ . Nous présentons les lignes de flux et les points fixes associés aux relations de récurrence.



**Figure 3.4.** Diagrammes de flux dans l'espace  $(\Delta, J)$  du système de spins mixtes avec les interactions  $C$  et  $\Delta_4$  égales à zéro et points fixes des relations de récurrence Migdal-Kadanoff pour  $(d = 2$  et  $d = 3)$ . Les flèches représentent le flot d'itérations des équations de récurrence contrôlées par les points fixes.

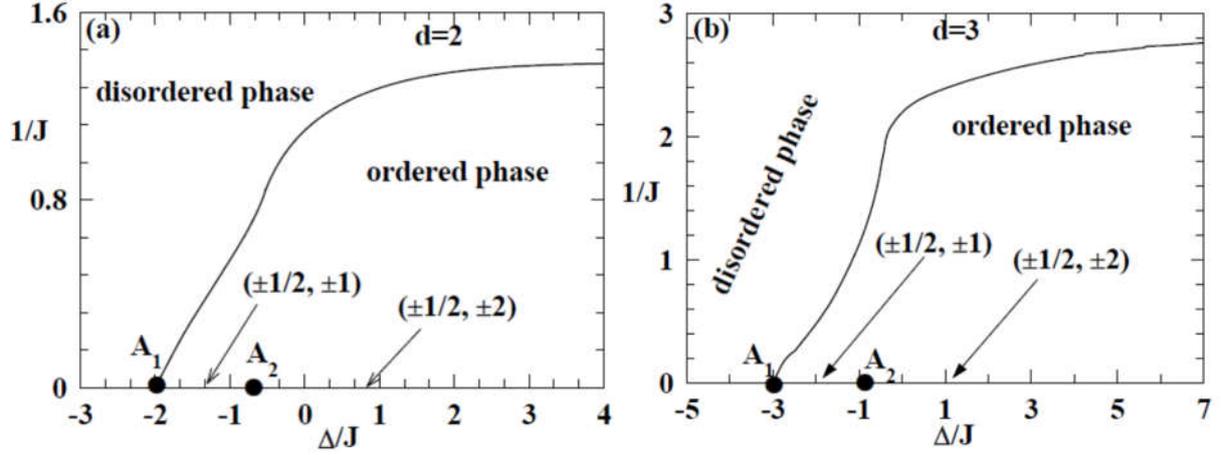
Comme le montre la **Figure 3.4**, les relations de récurrence donnent les mêmes résultats qualitatifs pour le réseau carré et pour les réseaux cubiques ( $d = 2$  et  $3$ ). Tous les points initiaux sur la région **F** du plan  $(\Delta, J)$  sont attirés par le point fixe **F** ( $J = +\infty, \Delta = -\infty$ ), cette région correspond à la phase ferromagnétique. Ensuite, les points initiaux appartenant à la région **P<sup>+</sup>** sont attirés par le point fixe paramagnétique trivial **P<sup>+</sup>** ( $J = 0, \Delta = +\infty$ ). Ainsi, la phase ferromagnétique **F** est séparée de la phase paramagnétique **P<sup>+</sup>** par la ligne de transition de second ordre **NC**. De plus, les points initiaux appartenant à la région **P<sup>-</sup>** sont attirés par le point fixe paramagnétique trivial **P<sup>-</sup>** ( $J = 0, \Delta = -\infty$ ). Les deux phases paramagnétiques **P<sup>-</sup>** et **P<sup>+</sup>** sont séparées par la ligne pointillée. Ces deux phases paramagnétiques, cependant, n'ont pas de symétrie différente et on peut continuellement passer de l'une à l'autre. Ainsi, la ligne pointillée commençant au point **O** ( $0, 0$ ) n'est pas une ligne critique, elle ne sépare que la phase paramagnétique **P<sup>+</sup>** et **P<sup>-</sup>**. L'asymptote indique le point fixe **C** à  $J = \frac{7}{4} \ln \left( \frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right), \Delta = +\infty$  pour  $d = 2$ , associé à la limite d'un simple modèle d'Ising à spin- $\frac{1}{2}$ .

**Tableau 1** Points fixes du système d'Ising à spin mixte consistant en spin- $1/2$  et spin-2 pour  $d = 2$  et  $d = 3$ .

Fixed point	Critical nature	Coordinates $(J^*, C^*, \Delta^*, \Delta_4^*)$	
		d=2	d=3
$O_1$	Ordered phase	$(+\infty; -\infty; +\infty; -\infty)$	$(+\infty; -\infty; +\infty; -\infty)$
$O_2$	Ordered phase	$(+\infty; -\infty; +\infty; +\infty)$	$(+\infty; -\infty; +\infty; +\infty)$
$O_3$	Ordered phase	$(+\infty; -\infty; -\infty; +\infty)$	$(+\infty; -\infty; -\infty; +\infty)$
$D_1$	Disordered phase	$(0; 0; +\infty; -\infty)$	$(0; 0; +\infty; -\infty)$
$D_2$	Disordered phase	$(0; 0; -\infty; -\infty)$	$(0; 0; -\infty; -\infty)$
$D_3$	Disordered phase	$(0; 0; +\infty; +\infty)$	$(0; 0; +\infty; +\infty)$
$D_4$	Disordered phase	$(0; 0; -\infty; +\infty)$	$(0; 0; -\infty; +\infty)$
$D_5$	Disordered phase	$(0; 0; 0; -\infty)$	$(0; 0; 0; -\infty)$
$D_6$	Disordered phase	$(0; 0; -\infty; 0)$	$(0; 0; -\infty; 0)$
O		$(0; 0; 0; 0)$	$(0; 0; 0; 0)$
$C$	Critical second order	$\left( \frac{7}{4} \ln \left( \frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right), -J^* / 7, \right. \\ \left. +\infty, -\infty \right)$	$\left( 11.299, -J^* / 7, \right. \\ \left. +\infty, -\infty \right)$

En utilisant le critère de Nienhuis-Nauenberg [54], nous soulignons qu'il n'y a pas de point fixe caractérisant une transition de premier ordre. Par conséquent, toutes les transitions sont de second ordre pour toute dimension  $d$ .

Sur la figure 3.5 (a-b), nous dessinons le diagramme en termes de variables plus commodes  $\Delta/J$  et  $t = 1/J$ , dans les deux cas, respectivement en deux et en trois dimensions. Dans différents diagrammes de phases, la ligne continue indique la ligne de transition du second ordre. Deux cercles pleins indiquent deux points multicritiques  $A_1$  et  $A_2$  trouvés dans le diagramme de phases de l'état fondamental affiché sur la figure 3.6. Alors que le point  $A_1$  sépare la phase paramagnétique de la phase magnétique ( $\pm 1/2, \pm 1$ ), alors que le point  $A_2$  sépare les phases magnétiques ( $\pm 1/2, \pm 1$ ) et ( $\pm 1/2, \pm 2$ ). Nous aborderons ce sujet en détail dans la section 3.3.



**Figure 3.5.** Diagrammes de phases du modèle infini mixte spin- $1/2$  et spin-2 par l'approximation de Migdal-Kadanoff pour les deux cas  $d = 2$  (a) et  $d = 3$  (b).

On remarque qu'à température nulle  $1/J = 0$  l'ordre ferromagnétique est détruit pour  $\Delta/J = 2$  et  $\Delta/J = 3$  en  $d = 2$  et  $d = 3$  respectivement ; il est en bon accord avec les résultats d'EFT [44], d'AFT [59], de SMC [45, 46] et de BLA [47], alors que dans la référence [58], l'ordre ferromagnétique disparaît à  $\Delta / J = 2$  quelle que soit la dimension, qui ne dépend pas de  $d$ . D'autre part, à  $\Delta/J = 0,0$ , la température de transition  $t_C$  du système avec  $d = 2$  est donnée par  $t_C = 1,096$  et  $t_C = 2,25$  pour  $d = 3$ .

Dans la limite  $\Delta / J \gg 0$ , les configurations de spins sont complètement dominées par  $S = \pm 2$  sur chaque site du sous-réseau B. Lorsque nous limitons les sommes à ces configurations, les deuxième, troisième et quatrième terme de l'équation (3.3) ( $\Delta \sum_{j \in B} S_j^2 + C \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j^3 + \Delta_4 \sum_{i \in B} S_j^4$ ) deviennent simplement des constantes additives qui n'affectent pas l'ordre supplémentaire, et l'hamiltonien se réduit à

$$-\beta H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j \quad (3.11)$$

Avec  $\sigma_i = \pm 1/2$  et  $S_j = \pm 2$ . Pour cette raison, la température critique tend à une valeur limitée, ce qui décrit le modèle de spin- $1/2$  Ising de dimension  $d$ , résolu par Onsager [55, 56] dans le cas où  $d = 2$ , qui a utilisé l'hamiltonien réduit suivante

$$-\beta H = J_{1/2} \sum_{\langle i,j \rangle} t_i t_j \quad (3.12)$$

Avec :  $t_k = \pm 1$  et  $k = i$  ou  $j$ . En conséquence, la composante  $J$  du point fixe  $C$  devrait donner la température critique du modèle spin- $1/2$  Ising, comme cela on s'attend à une transition de phase critique (second ordre) à  $J_C = 4 * J_{1/2}$  pour  $d=2$ , avec  $J_{1/2} = 0.4407$ . Nous avons trouvé

$J_c = \frac{7}{4} \ln \left( \frac{3+\sqrt{5}}{2} \right) = 1.685$ . Cela correspond bien à la valeur exacte d'Onsager, trouvée pour le

modèle d'Ising dans le cas 2D. Où nous avons  $4 \cdot J_{\frac{1}{2}} = 1.7628$  d'une part, et d'autre part nous l'avons trouvé  $J_c = 11.299$  pour  $d = 3$ , ce qui peut être comparé aux références [44-49].

Lorsque  $\Delta/J \ll 0$ , le sous-réseau spin-2 est constitué exclusivement de spins  $S = 0$ , sur chaque site du sous-réseau B. Dans ce second cas, le système peut être considéré comme un modèle spin- $\frac{1}{2}$  sans interaction disposé sur un réseau de dimension  $d$ , ce qui amène le système à la phase paramagnétique.

## 3.2 État fondamental

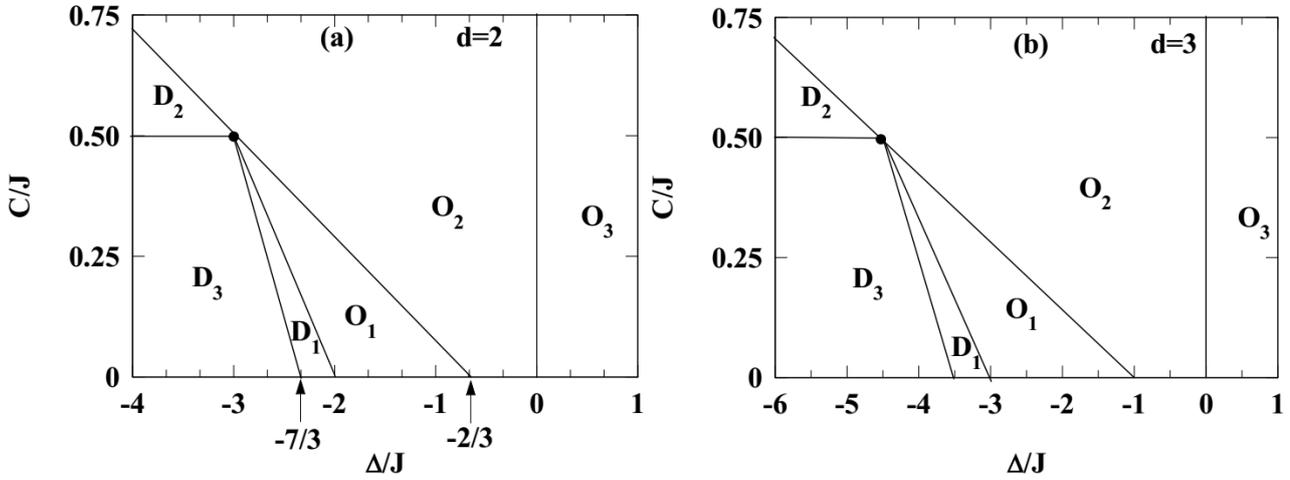
À température zéro, nous avons établi le diagramme de phases de l'état fondamental. Ce diagramme de phases est tracé dans le plan réduit  $(C/J, \Delta/J)$  pour 2d et 3d. On peut distinguer six cas : trois phases ordonnées (**O**) et trois phases désordonnées (**D**) pour 2d sur la Figure 3.5a et 3d dans la Figure 3.5b avec les valeurs des différents paramètres du système ( $J, C, \Delta, \Delta_d$ ). Les phases ordonnées sont  $\mathbf{O}_1(+\infty, -\infty, +\infty, -\infty)$ ,  $\mathbf{O}_2(+\infty, -\infty, +\infty, +\infty)$  et  $\mathbf{O}_3(+\infty, -\infty, -\infty, +\infty)$ . Les phases désordonnées sont  $\mathbf{D}_1(\mathbf{0}, \mathbf{0}, +\infty, -\infty)$ ,  $\mathbf{D}_2(\mathbf{0}, \mathbf{0}, -\infty, -\infty)$  et  $\mathbf{D}_3(\mathbf{0}, \mathbf{0}, -\infty, +\infty)$ .

### 3.2.1 Le cas bidimensionnel

En deux dimensions sur la figure 3.6.(a) nous avons :

- i.* Pour  $\Delta/J = 0$ , une ligne de transition du premier ordre apparaît entre la phase  $\mathbf{O}_2$  et la phase  $\mathbf{O}_3$  séparées par la ligne d'équation  $\Delta/J = 0$ .
- ii.* Pour  $-3 < \Delta/J < -2/3$ , deux lignes de transition du premier ordre apparaissent : une entre la phase  $\mathbf{O}_1$  et la phase  $\mathbf{O}_2$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = -3/14 (\Delta/J + 2/3)$  et l'autre entre la phase  $\mathbf{D}_1$  et la phase  $\mathbf{D}_3$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = -3/4 (\Delta/J + 7/3)$ , et une ligne de transition du second ordre entre la phase  $\mathbf{O}_1$  et la phase  $\mathbf{D}_1$  séparés par la ligne d'équation  $C/J = -1/2 (\Delta/J + 2)$ .
- iii.* Pour  $\Delta/J = -3$ , un point de transition du premier ordre entre la phase  $\mathbf{D}_1$  et la phase  $\mathbf{D}_2$ , et une transition du second ordre entre la phase  $\mathbf{D}_2$  et la phase  $\mathbf{O}_1$  se produisant à  $C/J = 1/2$ .
- iv.* Pour  $\Delta/J < -3$ , une ligne de transition du premier ordre se produit entre la phase  $\mathbf{D}_2$  et la phase  $\mathbf{D}_3$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = 1/2$  et une ligne de transition du

second ordre entre la phase  $D_2$  et la phase  $O_2$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = -3/14 (\Delta/J+2/3)$ .



**Figure 3.6.** Le diagramme de phase de l'état fondamental du système ferrimagnétique mixte des spin- $1/2$  et spin- $2$  établi dans le plan  $(\Delta/J, C/J)$  pour  $2d$  (a) et pour  $3d$  (b), nous avons trouvé six phases, trois désordonnées ( $D_1$ ,  $D_2$  et  $D_3$ ) et trois ordonnées ( $O_1$ ,  $O_2$  et  $O_3$ ).

### 3.2.2 Le cas tridimensionnel

En trois dimensions sur la figure 3. 6. (b) nous avons :

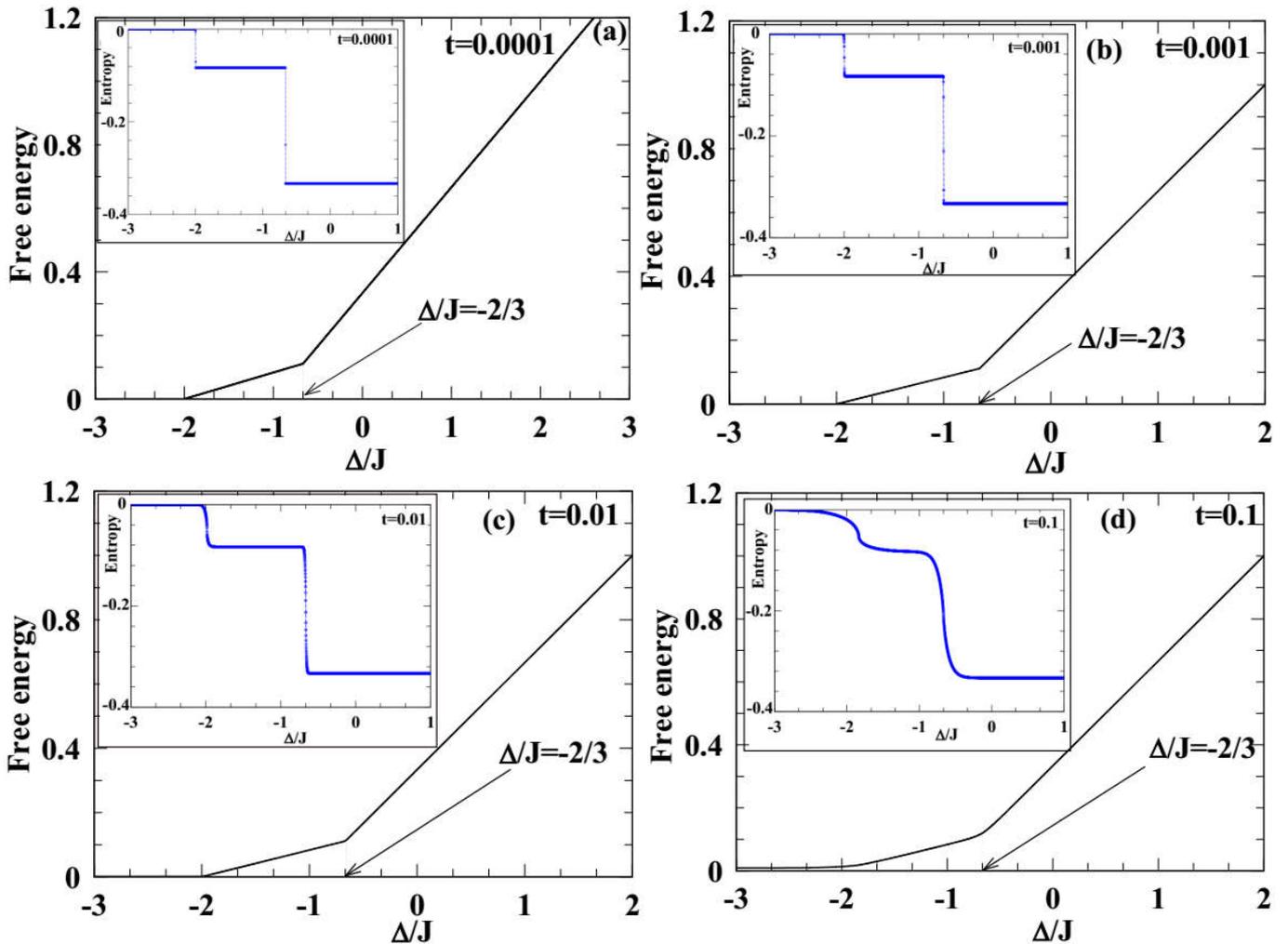
- i.* Pour  $\Delta/J = 0$ , une ligne de transition du premier ordre apparaît entre la phase  $O_2$  et la phase  $O_3$  séparées par la ligne d'équation  $\Delta/J = 0$ .
- ii.* Pour  $-9/2 < \Delta/J < -1$ , deux lignes de transition du premier ordre apparaissent: une entre la phase  $O_1$  et la phase  $O_2$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = -1/7 (\Delta/J+1)$  et l'autre entre la phase  $D_1$  et la phase  $D_3$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = -1/2 (\Delta/J+7/2)$ , et une ligne de transition du second ordre entre la phase  $O_1$  et la phase  $D_1$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = -1/3 (\Delta/J+3)$ .
- iii.* Pour  $\Delta/J = -9/2$ , un point de transition du premier ordre entre la phase  $D_1$  et la phase  $D_2$ , et une transition du second ordre entre la phase  $D_2$  et la phase  $O_1$  se produisant à  $C/J = 1/2$ .
- iv.* Pour  $\Delta/J < -9/2$ , une ligne de transition du premier ordre se produit entre la phase  $D_2$  et la phase  $D_3$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = 1/2$  et une ligne de transition du second ordre entre la phase  $D_2$  et la phase  $O_2$  séparées par la ligne d'équation  $C/J = -1/7 (\Delta/J) -1/7$ .

Le diagramme de phase de l'état fondamental en  $2d$  présente deux valeurs critiques ( $\Delta/J = -d, -d/3$ ) similaires au résultat de la simulation de Monte Carlo [45] et d'autres valeurs

critiques ( $\Delta/J = 0, -7/3$ ). Dans le cas **3d**, le diagramme présente la même topologie à **2d**, quatre valeurs critiques ( $\Delta/J = 0, -d, -d/3, -7/2$ ).

### 3.3 Énergie libre et entropie

Utilisant le flot d'itérations des équations de récurrence (14), nous avons identifié les différentes phases à basses températures, mais il est extrêmement difficile de révéler la nature des transformations dans ce domaine. Pour résoudre ce problème, nous choisissons d'étudier le comportement de l'énergie libre par spin  $f$ , en particulier, celui de la dérivée première de  $f$  par rapport à la variable  $x = \Delta_2 / |J|$ .

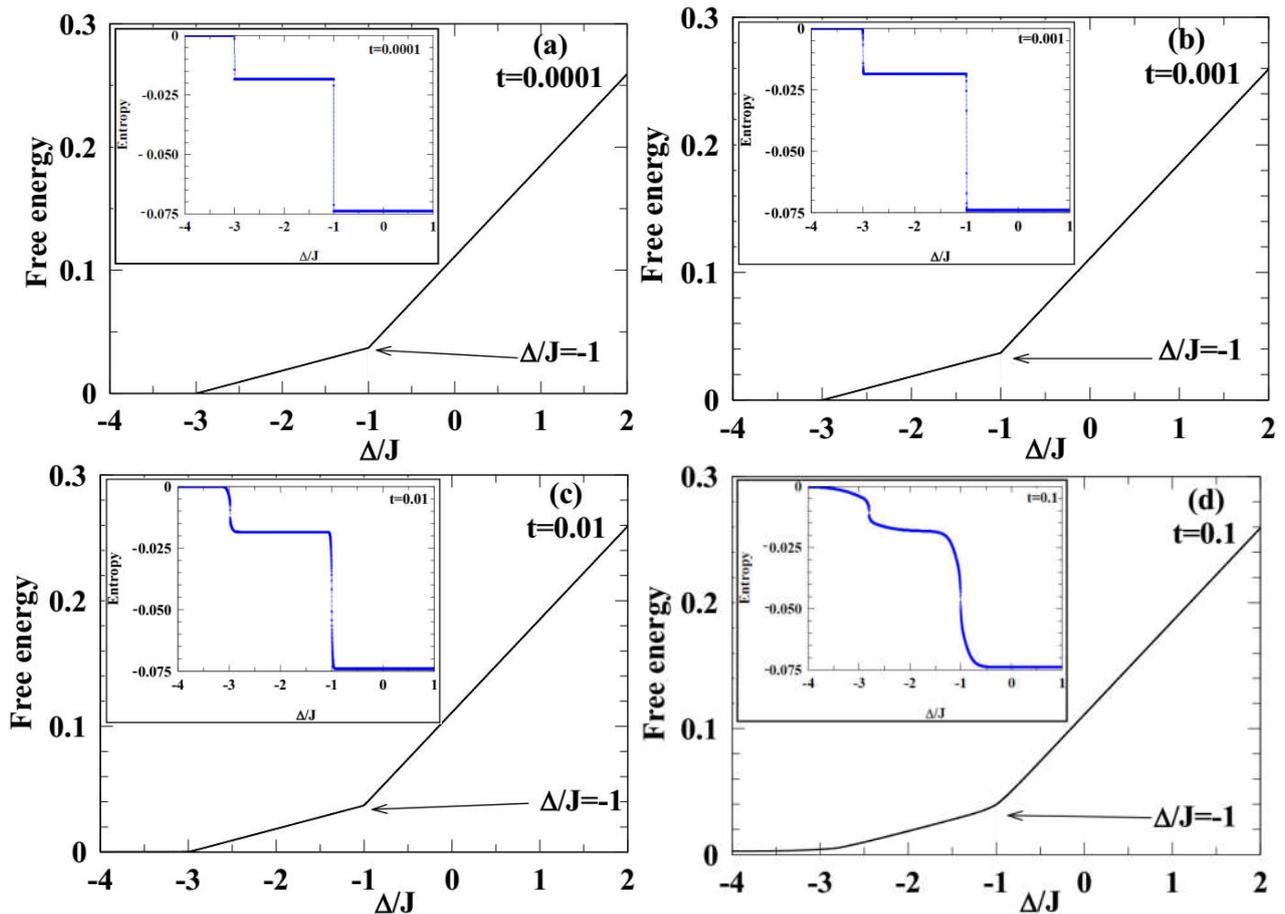


**Figure 3.7.** Entropie tracée en fonction du champ cristallin réduit  $d$ , dans le cas  $2d$ , pour a)  $t = 0.0001$ , b)  $0.001$ , c)  $0.01$  et d)  $0.1$ .

Pour donner plus de détails concernant la transition de premier ordre à basses températures, l'énergie libre et l'entropie du système sont calculées sur un réseau de dimension  $d$ . En effet, après  $n$  itérations, l'expression de l'énergie libre par spin, notée  $f$ , est donnée par [57]:

$$f = -\beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{b^{nd}} G^{(n)} \quad (3.13)$$

avec  $G^{(n)} = \ln A_n$ ,  $A_n$  est la valeur de la constante de renormalisation ( $A_0$ ) à la nième itération, la constante  $A_0$  est définie par l'équation (3.8e) ci-dessus.



**Figure 3.8 :** L'entropie est tracée en fonction du champ cristallin réduit  $d$  pour  $t = 0,0001$ (a),  $0,001$ (b),  $0,01$ (c) et  $0,1$ (d), respectivement dans le cas  $3d$ .

L'énergie libre et l'entropie du système sont tracées à basses températures en fonction de  $\Delta/J$  pour quatre valeurs  $t$  :  $0.0001$ ,  $0.001$ ,  $0.01$  et  $0.1$ , sur la Figure 3.7 et la Figure 3.8 dans les deux cas  $2d$  et  $3d$ , respectivement. Dans l'encadré des figures 3.7 et 3.8, nous avons les courbes d'entropie pour chacun des cas précédents ( $t$  :  $0.0001$ ,  $0.001$ ,  $0.01$  et  $0.1$ ). Dans les Figure 3.7 et Figure 3.8, on peut voir que la pente de l'énergie libre présente deux discontinuités successives à très basses températures, dans les deux cas, un réseau bidimensionnel et tridimensionnel. Par conséquent, l'entropie est discontinue à ces températures (voir l'encadré

des figures 7 et 8). En particulier, pour  $t = 0.0001$  sur les figures 7a et 8a, la première discontinuité est située à  $\Delta/J = -d$  qui correspond à la transition ordre-désordre tandis que la seconde séparant les phases magnétiques  $(\pm \frac{1}{2}, \pm 1)$  et  $(\pm \frac{1}{2}, \pm 2)$  est situé à  $\Delta/J = -d/3$ .

En augmentant la température, on observe la disparition de ces discontinuités, ce qui montre la fin des transitions de premier ordre. À travers les encadrées dans les Figures 7c et 8c, on voit que pour  $t = 0.01$  le système subit une transition de phase du second ordre, à  $\Delta/J = -d$  (de la phase désordonnée à la phase ordonnée) et une transition de phase du premier ordre, à  $\Delta/J = -d/3$ . Mais pour  $t \geq 0.1$ , toutes les transitions seront de second ordre. D'où, le système présente deux transitions de premier ordre, à très basses températures. Conformément aux Figures 4, 5 et 6, on montre encore une fois que l'on ne peut obtenir une transition de phase du premier ordre qu'à très basses températures.

## 4 Conclusion

En résumé, en utilisant la technique du groupe de renormalisation de Migdal-Kadanoff (GRMK) dans l'espace réel, nous avons étudié un modèle mixte spin  $\sigma = 1/2$  et spin  $S = 2$  sur des réseaux carrés et cubiques ( $d = 2$  et  $d = 3$ ). Le diagramme de phase de l'état fondamental du modèle a été construit dans le plan  $(\Delta/J, C/J)$ . À température nulle, nous avons trouvé trois phases ordonnées et trois phases désordonnées. En revanche, l'ordre ferromagnétique disparaît à  $\Delta/J = -2$  pour  $d = 2$  et  $\Delta/J = -3$  pour  $d = 3$ , ce qui indique clairement qu'il est dépendant de  $d$ , parfaitement compatible avec la littérature. Les exposants critiques sont calculés pour les dimensions  $d = 2$  et  $3$ . Nous avons effectué une recherche très minutieuse mais nous n'avons pas trouvé la valeur propre magnétique  $\lambda = b^d$  qui caractérise sans aucun doute une ligne critique de premier ordre. Ainsi, nos résultats indiquent qu'il n'y a pas de point tricritique dans le diagramme de phases du modèle.

## Références

- [1] O. Kahn, *Molecular Magnetism* (VCH Publishers, New York, 1993).  
T. Mallah, S. Thiébaud, M. Vardegauer, and P. Veillet, *Science* 262, 1554 (1993).  
H. Okawa, N. Matsumoto, H. Tamaki, and M. Ohba, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 233, 257 (1993).  
C. Mathonière, C. J. Nutall, S. G. Carling, and P. Day, *Inorg. Chem.* 35, 1201 (1996).  
M. Drillon, E. Coronado, D. Beltran, and R. Georges, *J. Chem. Phys.* 79, 449 (1983).  
S. Ohkoshi, Y. Abe, A. Fyishuma, K. Hashimoto, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 1285.
- [2] L. Bahmad, M.R. Benayad, A. Benyoussef, A. El Kenz, *Acta Physica Polonica A* 119 (2011) 740-746.
- [3] J.A. Plascak, *Physica A* 198 (1993) 655-665.
- [4] J.S. da Cruz Filho, M. Godoy, A.S. de Arruda, *Physica A* 392 (2013) 6247–6254.
- [5] O.F. Abubrig, D. Horvath, A. Bobak, M. Jascur, *Physica A* 296 (2001) 437–450.
- [6] A. Benyoussef, A. El Kenz, T. Kaneyoshi, *J. Magn. Magn. Mat.* 131 (1994) 173-178.
- [7] T. Kaneyoshi, Y. Nakamura and S Shin, *J. Phys.: Condens. Matter* 10 (1998) 7025–7035
- [8] M Jascur and T. Kaneyoshi, *I. Phys.: Condens. Matter* 5 (1993) 6313-6322.
- [9] S. Naji, A. Belhaj, H. Labrim, L. Bahmad A. Benyoussef, A. El Kenz, *Acta Physica Polonica B*, Vol. 45 No 4 (2014).
- [10] Y. Nakamura and J. W. Tucker, *IEEE Transactions on Magnetism*, Vol. 38, No. 5, (2002).
- [11] Y. Nakamura, *J. Phys. : Condens. Matter* 12 (2000) 4067–4074.
- [12] A. El Antari, H. Zahir, A. Hasnaoui et al. *Int J Theor Phys* (2018) 57: 2330.
- [13] M. Madani, A. Gaye, M. El Bouziani, A. Alrajhi, *Physica A* 437 (2015) 396–404.
- [14] N. Benayad, R. Zerhouni, A. Klumper, J. Zittartz, *Physica A* 262 (1999) 483–495.
- [15] S.G.A. Quadros and S.R. Salinas, *Physica A* 206 (1994) 479-496.
- [16] S. L. Schofield and R. G. Bowers, *J. Phys. A, Math. Gen.* 13, 3697 (1980).  
B. Boechat, R. A. Filgueiras, L. Marins, C. Cordeiro, and N. S. Branco, *Mod. Phys. Lett. B* 14, 749 (2000).  
B. Boechat, R. A. Filgueiras, C. Cordeiro, and N. S. Branco, *Physica A* 304, 429 (2002).
- [17] S. L. Schofield and R. G. Bower, *J. Phys. A, Math. Gen.* 14, 2163 (1981).  
B. Y. Yousif and R. G. Bower, *J. Phys. A, Math. Gen.* 17, 3389 (1984).
- [18] F. K. Tang, *J. Phys. A, Math. Gen.* 21, L1097 (1988).
- [19] E. Albayrak and M. Keskin, *J. Magn. Magn. Mater.* 261, 196 (2003).
- [20] T. Iwashita and N. Uryu, *Phys. Lett. A* 96, 311 (1983).  
T. Iwashita and N. Uryu, *J. Phys. Soc. Jpn.* 53, 721 (1984).  
T. Iwashita and N. Uryu, *phys. stat. sol. (b)* 125, 551 (1984).
- [21] T. Kaneyoshi, *Phys. Rev. B* 34, 7866 (1986).  
T. Kaneyoshi, *J. Phys. Soc. Jpn.* 56, 2675 (1987).  
T. Kaneyoshi, *J. Phys. Soc. Jpn.* 58, 1755 (1989).  
T. Kaneyoshi, *J. Magn. Magn. Mater.* 98, 201 (2000).  
A. L. De Lima, B. D. Stošić, and I. F. Fittipaldi, *J. Magn. Magn. Mater.* 226–230, 635 (2001).

- [22] T. Kaneyoshi, Solid State Commun. 70, 975 (1989).
- [23] T. Kaneyoshi, E. F. Sarmiento, and I. F. Fittipaldi, phys. stat. sol. (b) 150, 261 (1988).  
J. A. Plascak, Physica A 198, 655 (1993).
- [24] T. Kaneyoshi and J. C. Chen, J. Magn. Magn. Mater. 98, 201 (1991).
- [25] N. Benayad, A. Klümper, J. Zittartz, and A. Benyoussef, Z. Phys. B, Condens. Matter 77, 333 (1989).
- [26] G. M. Zhang and C. Z. Yang, Phys. Rev. B 48, 9452 (1993).
- [27] G. M. Buendia, M. A. Novotny, and J. Zhang, in: Computer Simulations in Condensed Matter Physics VII, edited by D. P. Landau, K. K. Mon, H. B. Schüttler (Springer Proceeds in Physics 78, Springer, Heidelberg, 1994), p. 223.  
G. M. Buendia and M. A. Novotny, J. Phys., Condens. Matter 9, 5951 (1997).
- [28] H. F. V. De Resende, F. C. Sa Barreto, and J. A. Plascak, Physica A 149, 606 (1988).
- [29] J. W. Tucker, J. Magn. Magn. Mater. 195, 733 (1999).
- [30] W. Jiang, G. Z. Wei, and Z. H. Xin, Physica A 293, 455 (2001).
- [31] N. Benayad et al., Ann. Phys. 5, 387 (1996).
- [32] A. Bobák and M. Jurčičin, J. Phys. IV (France) 7, C1-179–C1-180 (1997).
- [33] G. M. Buendia and R. Cardano, Phys. Rev. B 59, 6784 (1999).
- [34] E. Albayrak and A. Alçi, Physica A 345, 48 (2005).
- [35] J. Li, A. Du, and G. Z. Wei, phys. stat. sol. (b) 238, 191 (2003).
- [36] A. Feraoun, S. Amraoui et M. Kerouad, **526**, (2019) 120924.  
<https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.04.160>
- [37] Y. Nakamura, Phys. Rev. B 62, 11742 (2000).
- [38] Y. Nakamura, S. Shin, and T. Kaneyoshi, Physica B 284, 1479 (2000).
- [39] Y. Nakamura, J. Phys. : Condens. Matter 12, 4067 (2000).
- [40] Y. Nakamura, Prog. Theor. Phys. Suppl. 138, 466 (2000).
- [41] T. Kaneyoshi, Y. Nakamura, and S. Shin, J. Phys.: Condens. Matter **10** (1998) 7025
- [42] Q. Zhang, G. Wei, Z. Xin, and Y. Liang, J. Magn. Magn. Mater. **280** (2004)14-22
- [43] E. Albayrak and A. Yigit, Physica A 349, 471 (2005).
- [44] T. Kaneyoshi, Physica A 205 (1994) 677-686.  
A. Dakhama, Physica A 252 (1998).
- [45] G. M. Buendia and J. A. Liendo, J. Phys.: Condens. Matter 9 (1997) 5439–5448.
- [46] H. Zahir, T. Bahlagui, A. El Kenz, M. El Bouziani, A. Benyoussef, A. Hasnaoui, K. Sbiaai, J Supercond Nov Magn (2018) <https://doi.org/10.1007/s10948-018-4768-7>
- [47] Erhan Albayrak and Ali Yigit, phys. stat. sol. B 242 (2005) 1510–1521.
- [48] J. Strecka, Physica A 360 (2006) 379–390.
- [49] A. N. Berker and Michael Wortis, Phys. Rev. B 14 (1976) 4946-4963.
- [50] Migdal, A.A.: Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69 (1975) 1457. [Sov. Phys. JETP 42 (1975) 743]
- [51] Kadanoff, L.P.: Ann. Phys. 100 (1976) 359.
- [52] A. Bakchich, A. Bassir, A. Benyoussef, Physica A 195 (1993) 188.
- [53] N. Hachem, A. Lafhal, H. Zahir, M. El Bouziani, M. Madani, A. Alrajhi, Superlatt. Microstr. 111 (2017) 927.
- [54] B. Nienhuis, M. Nauenberg, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 477.
- [55] L. Onsager, Phys. Rev. 65 (1944) 117.
- [56] C. N. Yang, Phys. Rev. 85 (1952) 809.

- [57] R. Lipowsky, H. Wagner, *Z. Phys. B Condens. Matter.* 42 (1981) 355.
- [58] N. Benayad, *Z. Phys. B - Condensed Matter* 81 (1990) 99-105.
- [59] N. Benayad and J. Zittartz, *Z. Phys. B - Condensed Matter* 81 (1990) 107-112.
- [60] N. S. Branco, *Modern Physics Letters B* 14 (2000) 749-758.
- [61] H. Zahir, A. Hasnaoui, K. Sbiaai, A. Lafhal, N. Hachem, A. Alrajhi, M. Madani and M. El Bouziani, *Chinese Journal of Physics* 56 (2018) 1949-1969.
- [62] Jun Li, Guozhu Wei, An Du, *Physica B* 368 (2005) 121–130.

# Chapitre **4**

---

*Etude du système d'Ising  
ferrimagnétique à spins mixtes  
(1/2, 2) sur un réseau en nid  
d'abeille par la simulation de  
Monte Carlo*

---

Dans ce chapitre, en utilisant la méthode de Monte Carlo, nous avons simulé le système Ising ferrimagnétique mixte de spin-1/2 et de spin-2 sur un réseau en nid d'abeille. Nous avons étudié les variations de la magnétisation en fonction du champ cristallin et celles du diagramme de phases du système pour diverses valeurs de champ cristallin. Nous avons constaté que le système ne pouvait pas présenter le point de compensation si nous ne considérons que les interactions des plus proches voisins et l'effet du champ cristallin. En outre, le point tricritique n'existe pas. À notre connaissance, ce système n'a jamais été étudié en utilisant la méthode de Monte Carlo.

## 1 Introduction

Au cours des dernières années, l'étude des systèmes mixtes, dans lesquels les spins sont situés sur deux sous-réseaux alternés et non équivalents avec des moments magnétiques opposés, a connu un intérêt croissant, tant du point de vue théorique qu'expérimental, en raison de ses applications technologiques prometteuses dans divers domaines tels que les supports d'enregistrement thermomagnétiques, les systèmes micro-électromécaniques, l'informatique, l'optoélectronique, les guides d'ondes (stockage holographique) et l'accès aux mémoires dynamiques et aléatoires [1-3].

Expérimentalement, des progrès importants ont été réalisés dans la synthèse de matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques bidimensionnels et tridimensionnels. En particulier, de grandes séries de ces composés ont été synthétisées avec succès par Kahn et al. [5] Les travaux les plus cités [4, 5] concernent les chaînes bimétalliques de formule générale  $ACu(pbaOH)(H_2O)_3nH_2O$  avec  $A = Ni, Co, Fe, Mn$ , qui sont des systèmes à spins mixtes  $(1, 1/2)$ ,  $(3/2, 1/2)$ ,  $(2, 1/2)$  et  $(5/2, 1/2)$  respectivement.

D'autre part, de nombreux efforts ont été consacrés à l'étude théorique de ces systèmes en utilisant diverses méthodes basées sur la physique statistique. Parmi ces travaux, nous citons, par exemple, la simulation de Monte Carlo (MC) [6-9], l'approximation du champ moyen [10-12], la théorie du champ effectif (EFT) [13-15], la méthode du groupe de renormalisation de Migdal – Kadanoff [16 -18], la méthode variationnelle de cluster [19], l'approximation de cluster fini [20,21], les extensions de série à haute et basse températures [22], l'approximation des fermions libres [23], la méthode de la matrice de transfert numérique [7] et la méthode de variation par approximation paire en cluster [24].

Dans le présent chapitre, nous allons explorer les propriétés magnétiques du système ferrimagnétique mixte spin-1/2 et spin-2 Blume – Capel-Ising sur un réseau en nid d'abeille

(honeycomb lattice). Nous considérons les interactions entre les premiers proches voisins sous l'effet du champ cristallin. Nous utilisons la simulation de Monte Carlo afin de comparer les résultats obtenus avec les résultats précédents [14, 27, 39], étudiant le même système en utilisant d'autres méthodes. Kaneyoshi a exploré le diagramme de phase du système en utilisant la théorie du champ effectif [14] et obtenu une expression générale permettant d'évaluer la température de transition. Il a constaté que le système ne présente pas d'un point tricritique lorsque le nombre de coordination  $z = 3$ , mais il n'a pas fourni de discussion sur l'existence de la température de compensation. Albayrak et Yigit ont mené une investigation sur le réseau de Bethe en utilisant des relations de récurrence dans l'article [27]. Ils ont montré que le système présente un point tricritique lorsque  $z \geq 5$  et deux températures de compensation lorsque  $z \geq 4$ . Dans le dernier travail [39], l'effet de l'anisotropie uniaxiale a été exploré mais la température de compensation et le point tricritique ne sont pas affichés.

Dans le présent travail, notre objectif principal est de vérifier si le système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (1/2, 2) pourrait présenter un comportement tricritique ou une température de compensation en utilisant la simulation de Monte Carlo. Ce chapitre est organisé comme suit : dans le paragraphe 2, nous décrivons le modèle et donnons les détails de la méthode de Monte Carlo. Ensuite, nous discutons de nos résultats dans le paragraphe 3. Enfin, nous présentons les principales conclusions dans le paragraphe 4.

## 2 Modèle et simulation de Monte Carlo

Nous considérons un système ferrimagnétique de spins mixtes sur deux sous-réseaux en nid d'abeilles interpénétrés. L'un des sous-réseaux a des spins  $\sigma$  sur ses sites, où  $\sigma$  a deux états,  $\sigma = \pm 1/2$ . Les sites de l'autre sous-réseau ont des spins  $S$  qui peuvent avoir cinq états,  $S=0, \pm 1, \pm 2$ . Les spins sont couplés par une interaction d'échange entre plus proches voisins  $J$  ( $J < 0, 0$ ). Chaque spin  $\sigma$  n'a que des spins  $S$  comme voisins les plus proches, et vice versa, illustré sur la figure 4.1 ; par conséquent, tous les sous réseaux alternatifs, à savoir les couches A et B, sont occupées par les spins  $\sigma$  et  $S$ .

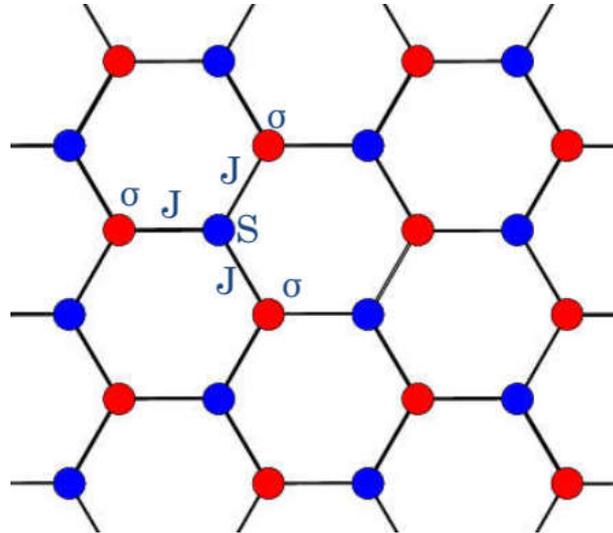
Sur la figure 4.1, les cercles rouges et bleus représentent respectivement les spins  $\sigma$  et  $S$ .

Ce système est décrit par l'Hamiltonien du modèle Blume – Capel (BC) [35-36] qui s'écrit comme suit :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - \Delta \sum_i S_i^2 \quad (4.1)$$

Où la première sommation est effectuée sur des paires de spins les plus proches voisins et la

seconde sur tous les sites du sous-réseau S.  $J$  est l'interaction d'échange entre les spins  $\sigma$  et S. De plus,  $\Delta$  est le champ cristallin qui agit sur les spins S qui cause l'anisotropie du système.  $J$  et  $\Delta$  sont en unités d'énergie.



**Figure 4.1.** Description schématique du réseau en nid d'abeille montrant la configuration de spins mixtes. Les cercles pleins rouges représentent les atomes magnétiques du sous-réseau  $\sigma$  (spin  $\sigma = 1/2$ ) et les bleus, les atomes magnétiques du sous-réseau S (spin  $S = 2$ ). Les lignes continues représentent les couplages d'échange  $J$ .

Nous utilisons des méthodes Monte Carlo standard pour simuler l'Hamiltonien décrit par l'équation (4.1) sur un réseau en nid d'abeilles avec des conditions aux limites périodiques. Nous notons que notre réseau périodique contient N spins avec le même nombre de chaque type de spins  $N_s = N_\sigma = N/2$ . Nous supposons que les spins  $\sigma$  et S interagissent ferrimagnétiquement ( $J < 0$ ).

La méthode standard de Monte Carlo a été mise en œuvre pour simuler l'Hamiltonien du modèle donné dans l'équation (4.1) avec des conditions aux limites périodiques dans toutes les directions. Les états initiaux du système ont été préparés de manière totalement aléatoire et mis à jour par l'algorithme Metropolis [25]. Nous commençons la simulation en générant une configuration initiale où les spins sont distribués selon le schéma de la figure 4.1 avec  $S = \pm 2, \pm 1, 0$  et  $\sigma = \pm 1/2$ . Ensuite, un spin à retourner est choisi au hasard dans l'ensemble de la structure avec une probabilité uniforme. Les configurations sont générées en balayant de manière aléatoire le réseau et en effectuant des tentatives de retournement à un spin. Les retournements de spins sont acceptés ou rejetés selon l'algorithme de Metropolis [25].

Les limites de phase sont approximativement déterminées à partir des maxima de certaines fonctions thermodynamiques, telles que la chaleur spécifique, pour une valeur fixe

sélectionnée de  $N$ . Nous avons choisi  $N = 50^2$ , comme valeur de compromis au-dessus de laquelle les positions maximales de chaleur spécifiques ne changent pas considérablement et les diagrammes de phases peuvent être déterminés dans un espace de paramètres relativement large dans un temps de calcul raisonnable. Dans la région où la ligne critique en fonction du paramètre d'anisotropie ionique  $\Delta$  est plus ou moins horizontale, il est commode d'obtenir des dépendances de température des quantités calculées à une valeur fixe de  $\Delta$ . Dans un tel cas, les simulations partent de la phase paramagnétique utilisant des configurations initiales aléatoires avec une diminution progressive de la température et une nouvelle simulation à partir de la configuration finale obtenue à la température précédente. En revanche, si la forme de la frontière de phase passe à la verticale, nous obtenons des variations des quantités en fonction du paramètre d'anisotropie mono-ion  $\Delta$  à une température fixe. Ensuite, les simulations commencent à partir d'états choisis de manière appropriée (pas nécessairement aléatoires), attendus dans la région considérée de l'espace des paramètres. En suivant l'approche décrite ci-dessus, nous nous assurons que le système est maintenu proche de l'équilibre dans toute la plage du paramètre changeant et raccourcit ainsi considérablement les périodes de thermalisation. Afin d'estimer les erreurs statistiques, nous effectuons trois simulations indépendantes pour chaque valeur du paramètre considérée.

À certains points sélectionnés des limites de phase, nous effectuons une analyse plus détaillée de l'échelle finie (Finite size scaling FSS) afin de déterminer plus précisément l'emplacement des points critiques. Dans un tel cas, nous effectuons des simulations plus poussées en utilisant jusqu'à  $10^7$  MCS et appliquons les techniques de repassage [46]. Pour une estimation plus fiable des erreurs statistiques, dans ce cas, nous avons utilisé la méthode moindre d'erreurs [47]. Après avoir obtenu les maximums des quantités pertinentes, nous appliquons la procédure d'ajustement linéaire pour les logarithmes de données avec des erreurs, en suivant la méthode de York et al. [48]. Les points critiques sont ensuite extraits de l'analyse FSS, en utilisant les tailles linéaires  $N = 10^2, 20^2, 30^2, \dots$  et  $120^2$ . De plus, **M. Žukovič** et **A. Bobák** [40] ont montré que, pour un réseau triangulaire de taille **120**, l'équilibre est atteint en moins de  $10^4$  étapes de Monte Carlo (MCS). Pour cette raison, les données thermodynamiques ont été moyennées sur  $2 \times 10^5$  MCS par spin après avoir éliminé les  $10^4$  premières étapes par site utilisées pour la phase d'équilibrage. Le programme que nous utilisons calcule l'énergie interne ( $E$ ), la chaleur spécifique ( $C_v$ ), les aimantations du sous-réseau ( $M_S, M_\sigma$ ), l'aimantation totale ( $M$ ), la susceptibilité magnétique ( $\chi$ ) et l'énergie interne par spin ( $e$ ), qui peuvent s'écrire comme suit :

$$M_S = \frac{1}{N_S} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle, \quad (4.2)$$

$$M_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle, \quad (4.3)$$

$$M = \frac{M_S + M_\sigma}{2}, \quad (4.4)$$

$$\chi(T) = \frac{\beta}{N} \left( \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right), \quad (4.5)$$

$$E = \langle H \rangle, \quad (4.6)$$

$$e = \langle H \rangle / N, \quad (4.7)$$

et

$$C_v = \frac{1}{K_B T^2} \left( \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right), \quad (4.8)$$

où  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  est la constante de Boltzmann,  $T$  est la température absolue (Kelvin) et  $\langle \dots \rangle$  représente la moyenne thermique.

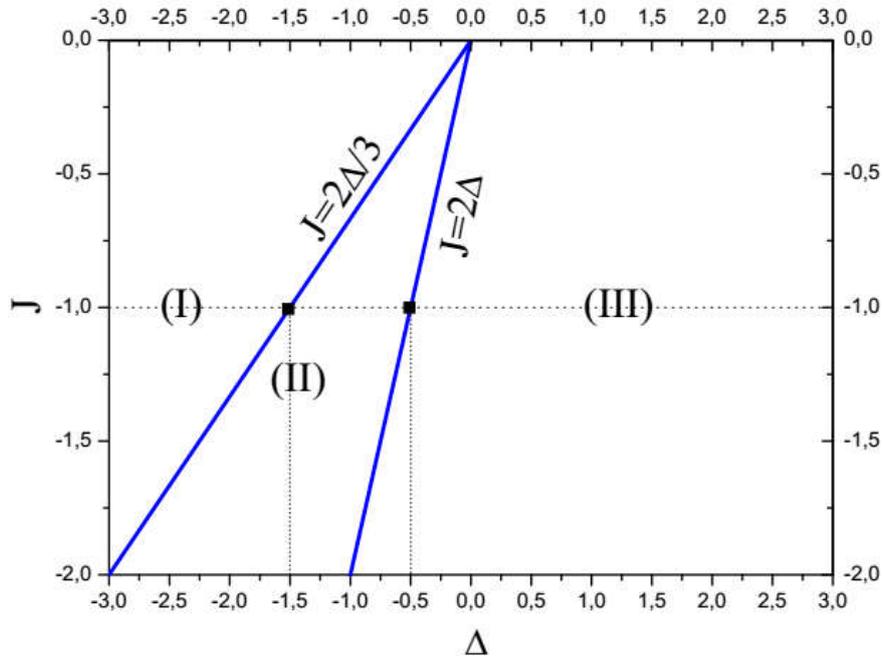
### 3 Résultats et discussion

Dans la présente section, nous discuterons des états possibles du système à température zéro et des effets de la température et du champ cristallin sur les propriétés magnétiques, à savoir la température de transition, le sous-réseau et les aimantations totales du système.

#### 3.1 Le diagramme de phases de l'état fondamental

Pour l'analyse des modèles de spins mixtes, il est important de connaître le comportement du système à  $T = 0$ . Les diagrammes de phases de l'état fondamental peuvent avoir plusieurs régions avec différentes valeurs d'énergie, des configurations de spins et des points multiphasiques où peuvent coexister plus de deux phases [43]. Autour des points multiphasiques peuvent émerger de nombreux phénomènes critiques, tels que les transitions de phase du premier ordre et les points tricritiques [44, 45]. De plus, le calcul exact des énergies de l'état fondamental peut vérifier la fiabilité des résultats de la simulation numérique, comme montré par Wei et al. utilisant la méthode Monte Carlo sur les phénomènes critiques dans un

modèle d'Ising de spin  $(1, 3/2)$  sur un réseau cubique [45] et par De La Espriella et Buendía sur le comportement magnétique d'un modèle de spins  $(3/2, 5/2)$ , où ils ont trouvé que les aimantations à l'état fondamental du système correspondent à celles obtenues à  $T = 0$  dans les diagrammes de phases à température finie [7].



**Figure. 4.2.** Diagramme de phase de l'état fondamental dans le plan  $(\Delta, J)$ . Les équations des droites de coexistence sont indiquées dans le graphique. Pour les notations (I), (II) et (III), voir le tableau 4.1.

Tout d'abord, nous déterminons exactement la structure de diagramme de l'état fondamental d'un modèle de spin mixte ( $\sigma = 1/2, S = 2$ ), en énumérant tous les états possibles du système dans un réseau en nid d'abeille ( $z = 3$ ) et en calculant numériquement leur énergie. Ces diagrammes sont utiles pour vérifier la fiabilité des résultats numériques dans les diagrammes de phase à température finie ( $T > 0K$ ) d'une part, et d'autre part, ils permettent d'explorer des régions où des comportements magnétiques importants qui pourraient se produire. Ils sont également pertinents d'identifier les zones où le modèle d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes  $(1/2, 2)$  peut afficher des comportements magnétiques intéressants. D'ailleurs, il est également utile de vérifier les lignes de transition du premier ordre proche du point de température zéro où les calculs numériques et la convergence des quantités physiques sont souvent difficiles à obtenir. Dans ce modèle, nous ne prenons en compte que les interactions entre les premiers voisins et le champ cristallin agissant sur les sites de spins-2 dans l'Hamiltonien (4.1).

Pour ce système de spins (1/2, 2), il existe trois configurations d'états fondamentaux possibles, qui dépendent des valeurs des paramètres dans l'Hamiltonien. Pour le diagramme de phase de l'état fondamental, nous obtenons les équations des courbes qui séparent chacune des régions, en faisant correspondre les énergies de chaque configuration de spins et nous calculons et comparons les énergies de toutes les configurations possibles. Ce diagramme est tracé dans le plan ( $\Delta$ ,  $J$ ) dans les intervalles suivants  $-2 \leq J \leq 0$  et  $-3 \leq \Delta \leq 3$  (figure 4.2).

**Tableau 4.1** Les configurations de spins possibles et leurs énergies.

Région	Configuration	Phase	Énergie de phase fondamentale	Condition
(I)	(0 ; $\mp 1/2$ )	Paramagnétique	$E = 0$	$2\Delta/3 \leq J$
(II)	( $\pm 1$ ; $\mp 1/2$ )	Ferrimagnétique	$E = 1.5J - \Delta$	$2\Delta \leq J \leq 2\Delta/3$
(III)	( $\pm 2$ ; $\mp 1/2$ )	Ferrimagnétique	$E = 3J - 4\Delta$	$J \leq 2\Delta$

Le tableau 4.1 montre les différentes configurations de l'état fondamental obtenu et ses énergies correspondantes. On distingue trois régions différentes correspondant aux phases stables (I) (-1/2, 0), (II) (-1/2, +1) et (III) (-1/2, +2) et deux lignes de coexistences séparant les configurations, dont l'une sépare les régions I et II et l'autre entre les deux configurations II et III, leurs équations sont représentées sur le diagramme, comme indiqué à la figure 4.2 et au tableau 4.2. En outre, le tableau 4.3 indique les deux valeurs critiques du champ cristallin  $\Delta = -1,5$  et  $-0,5$  lorsque  $J = -1$  et les deux phases qui peuvent coexister.

**Tableau 4.2** Lignes de coexistence des phases.

Phases	Lignes de coexistence	$J$	$\Delta$
(I)-(II)	$J=2\Delta/3$	$-2 \leq J \leq 0$	$-3 \leq \Delta \leq 0$
(II)-(III)	$J=2\Delta$	$-2 \leq J \leq 0$	$-1 \leq \Delta \leq 0$

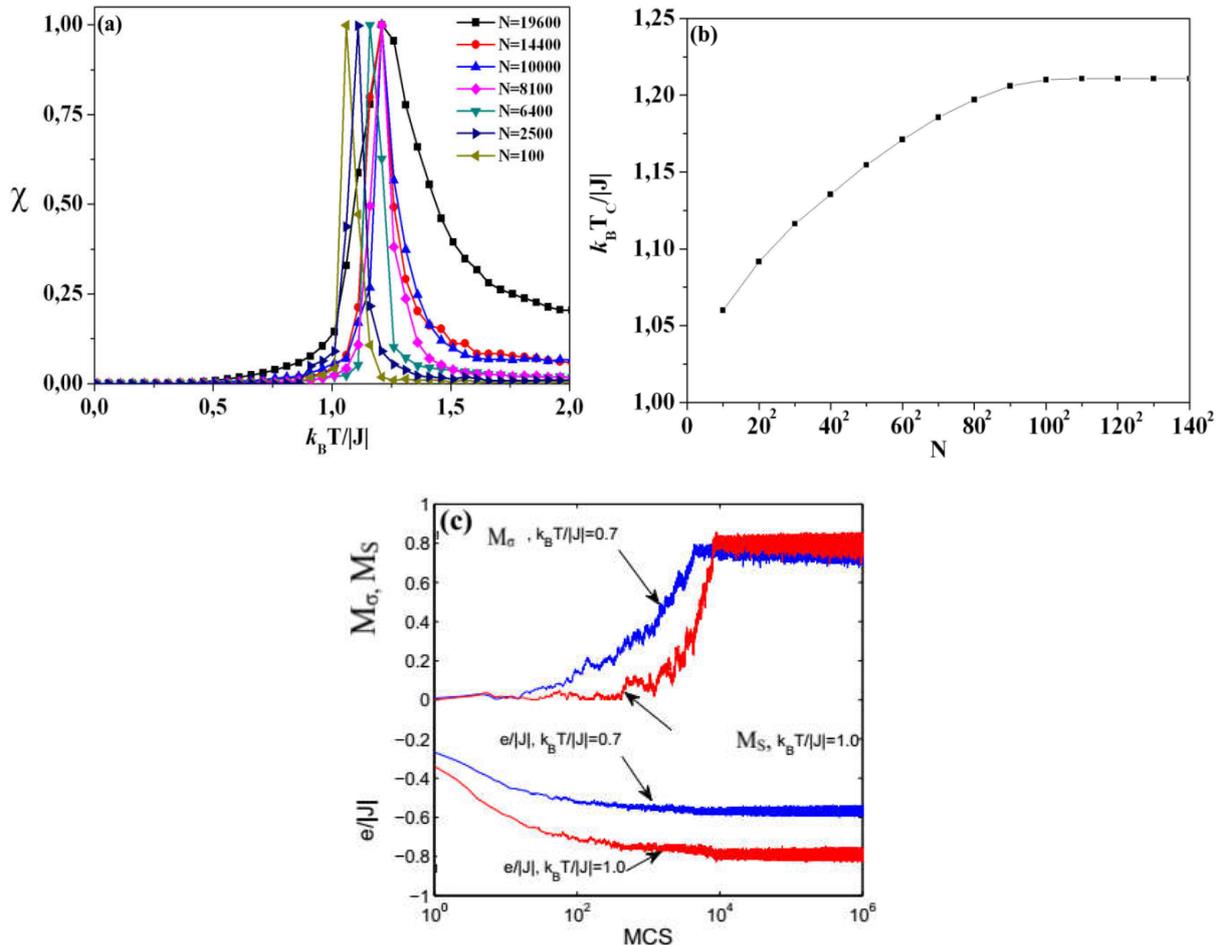
**Tableau 4.3** Les deux valeurs critiques de  $\Delta$  et les phases de coexistences lorsque la valeur de  $J$  est -1.

$J$	$\Delta$	Phases	Configurations
-1	-1.5	(I)-(II)	(0; $\mp 1/2$ ) and ( $\pm 1$ ; $\mp 1/2$ )
-1	-0.5	(II)-(III)	( $\pm 1$ ; $\mp 1/2$ ) and ( $\pm 2$ ; $\mp 1/2$ )

Dans ce qui suit, nous avons choisi pour tous nos résultats numériques un cas ferrimagnétique  $J = -1$ .

### 3.2 Résultats de Monte Carlo

Afin de démontrer que le MCS utilisé est suffisant pour garantir les conditions d'équilibre, sur la figure 4.3, nous présentons les évolutions temporelles MC de certaines quantités telles que les paramètres d'ordre  $M_\sigma$  et  $M_S$  et l'énergie interne réduite par site  $e / |J|$ , à partir de la phase désordonnée. Les simulations sont effectuées pour les plus grandes tailles du réseau considérées  $N = 1440$ , à des températures proches des points critiques pertinents de  $(\Delta / |J| = 0)$ .



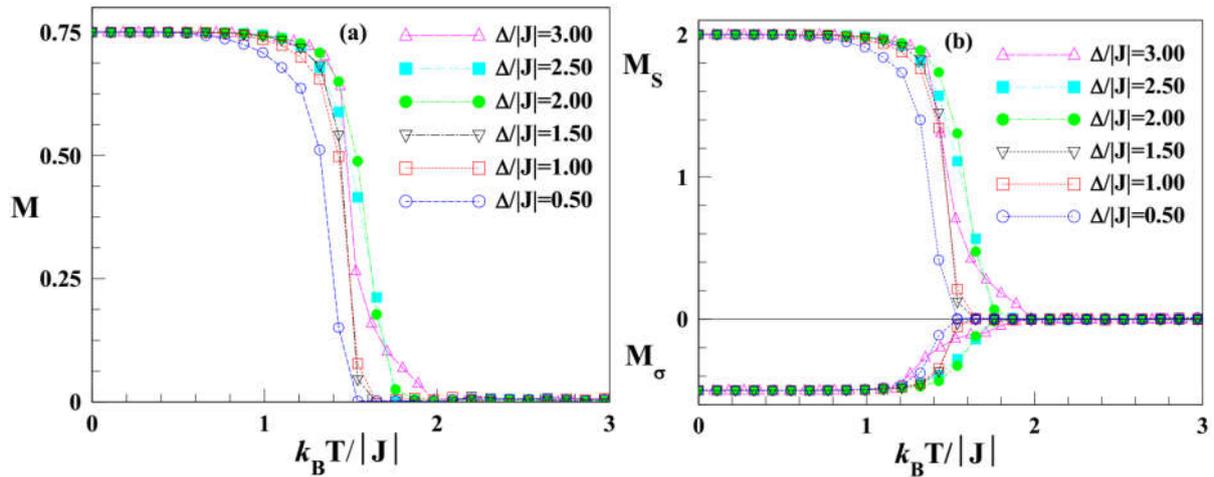
**Figure. 4.3.** Diagramme de la susceptibilité en fonction de  $k_B T / |J|$  pour différentes valeurs du nombre de spins  $N$  (a) et la température critique en fonction de  $N$  (b). Évolutions temporelles de l'énergie interne par site  $e / |J|$  et les aimantations échelonnées  $M_\sigma$ ,  $M_S$  (voir définitions ci-dessous), à partir de la phase désordonnée aux températures  $k_B T / |J| = 0.7$  et  $1.0$  pour  $\Delta / |J| = 0$  et  $N = 1440$ .

Les graphiques montrent que dans ces cas, l'équilibre est atteint en moins de  $10^4$  MCS d'une part, et d'autre part, afin que nous puissions d'examiner l'effet de la taille finie sur les propriétés magnétiques du système, nous avons simulé la susceptibilité en fonction de la température pour différentes valeurs du nombre de spins  $N$  ( $N = 100, 2500, 6400, 8100, 10000, 14400$  et  $19600$ ) (figure 4.3a) et la température critique en fonction du nombre  $N$  (figure 4.3b) dans le cas  $\Delta / |J| = 0.0$ .

Ces courbes montrent que la valeur de la température critique sature à une valeur proche de  $k_B T_C / |J| = 1.21$ , à partir de  $N = 8100$ . Cette valeur est cohérente avec la solution exacte  $k_B T_C / |J| = 1.17$ . Il peut également être comparé à ce qui a été obtenu par la théorie du champ moyen  $k_B T_C / |J| \approx 1.57$  [14], ainsi qu'à ceux obtenus par le réseau Bethe  $k_B T_C / |J| \approx 1.3$  [27]. Au demeurant, ces résultats sont similaires à ceux obtenus dans d'autres travaux [41-42].

Pour cette raison, dans les sections suivantes, nos simulations sont effectuées pour  $N = 10^4$  spins. C'est une valeur suffisante pour obtenir des résultats très précis.

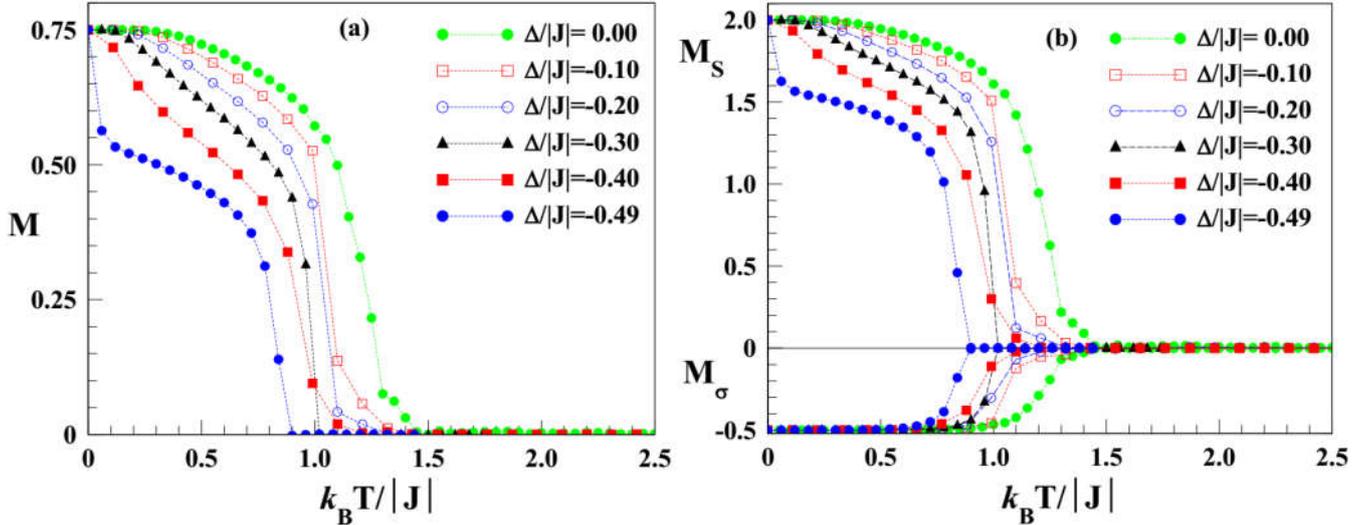
Il convient de noter que le champ cristallin réduit a deux valeurs critiques qui sont  $-0.5$  et  $-1.5$  de  $\Delta / |J|$  pour  $J = -1.0$  comme illustré à la figure 4.2 et au Tableau 4.3. Nous avons donc divisé cette étude en quatre cas, à savoir,  $\Delta / |J| > -0.5$ ,  $\Delta / |J| = -0.5$ ,  $-0.5 < \Delta / |J| < -1.5$  et  $\Delta / |J| \leq -1.5$ .



**Figure 4.4.** Aimantation totale du système  $M$  (a) et aimantations des sous-réseaux  $M_S$  et  $M_\sigma$  (b) en fonction de la température pour les valeurs positives du champ cristallin réduit  $\Delta / |J|$ .

Les figures 4.4 – 4.5 montrent le comportement de l'aimantation  $M$  du système total ainsi que celui des aimantations partielles  $M_S$  et  $M_\sigma$  des sous-réseaux correspondants en fonction de la température pour des valeurs du champ cristallin réduit dans l'intervalle  $\Delta / |J| > -0.5$ . À partir de ces figures, nous remarquons que l'aimantation totale commence par une valeur

de saturation  $\mathbf{M} = 0.75$ , comme indiqué sur les figures 4.4a-4.5a. Ceci s'explique par le fait que les valeurs de saturation des aimantations partielles du sous-réseau sont  $\mathbf{M}_S (k_B T / |J| = 0) = 2.0$  et  $\mathbf{M}_\sigma (k_B T / |J| = 0) = -0.5$ , comme on peut le voir sur les figures 4.4b-4.5b.

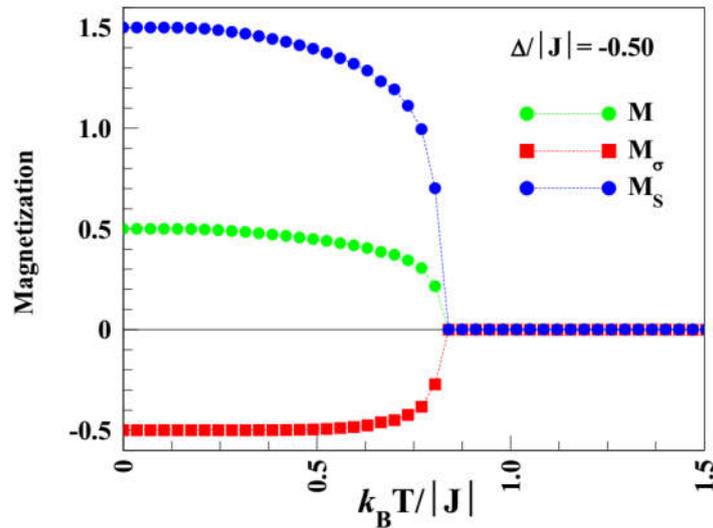


**Figure 4.5.** Aimantation totale du système  $\mathbf{M}$  (a) et aimantations partielles des sous-réseaux ( $\mathbf{M}_S$  et  $\mathbf{M}_\sigma$ ) (b) en fonction de la température pour les valeurs positives du champ cristallin réduit  $-0.50 < \Delta / |J| \leq 0.00$ .

Pour la valeur critique  $\Delta / |J| = -0.5$  à  $k_B T / |J| = 0.0$ , la magnétisation totale  $\mathbf{M}$  sature à la valeur  $\mathbf{M} = 0.5$  (figure 4.6). Cela est dû au fait que l'état fondamental du spin- $\sigma$  est  $1/2$  et  $3/2$  pour le spin- $S$ . En effet, sur le sous-réseau  $S$ ,  $S = 2$  et  $1$  coexistent avec une probabilité égale, ce qui indique que la moitié des spins est égale à  $2$  et que l'autre moitié est égale à  $1$  et que la phase obtenue est  $(-1/2, +3/2)$ . Un comportement similaire est également observé dans d'autres systèmes tels que  $(2, 1/2)$  sur le réseau de Bethe [27] pour  $z = 6$  lorsque  $\Delta / |J| = -1$  et dans l'approximation du champ moyen dans le système des spins mixtes  $(1, 1/2)$  [11] et le cas pur spin-2 [33].

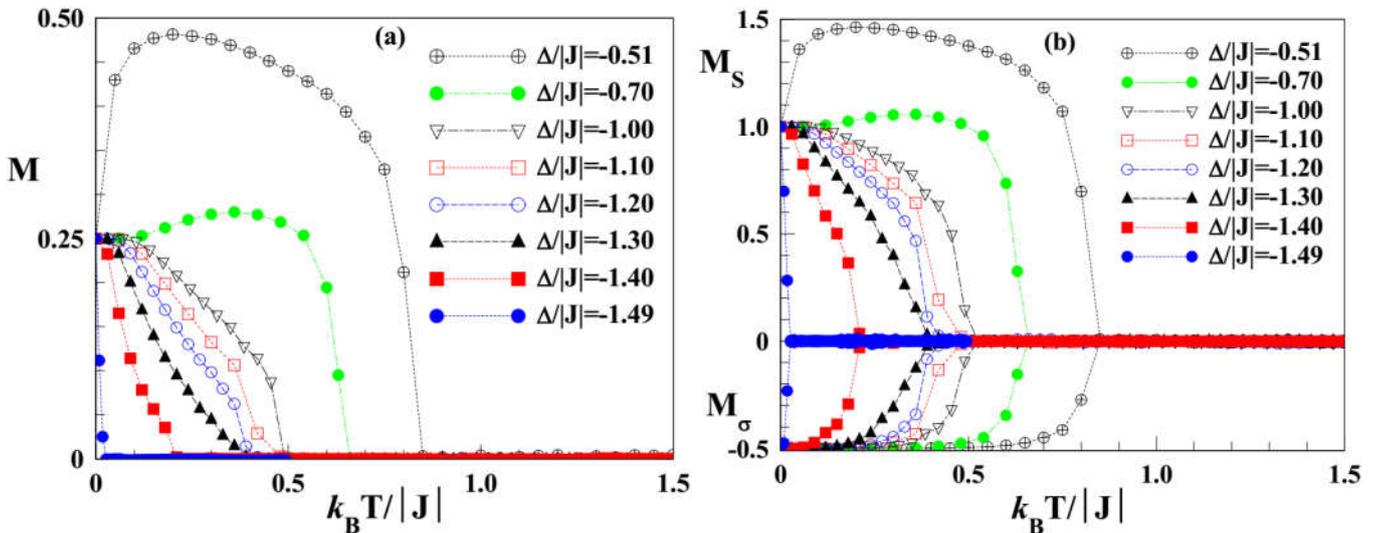
Pour  $-1.5 < \Delta / |J| < -0.5$ , les valeurs de saturation des aimantations de sous-réseau sont  $\mathbf{M}_S = 1.0$  et  $\mathbf{M}_\sigma = -0.5$ , comme on peut le voir sur la figure 4.7b, ce qui peut expliquer la valeur de l'aimantation totale  $\mathbf{M} = 0.25$  à  $k_B T / |J| = 0.0$  comme illustré dans figure 4.7a.

Pour  $\Delta / |J| \leq -1.5$ , l'aimantation totale du système disparaît et la phase paramagnétique se produit, ce qui signifie qu'il s'agit de la phase stable c.-à-d. la phase stable est la phase paramagnétique.



**Figure 4.6.** Magnétisation totale  $M$  et magnétisations partielles des sous-réseaux ( $M_S$  et  $M_\sigma$ ) en fonction de la température pour la valeur sélectionnée  $\Delta / |J| = -0.50$ .

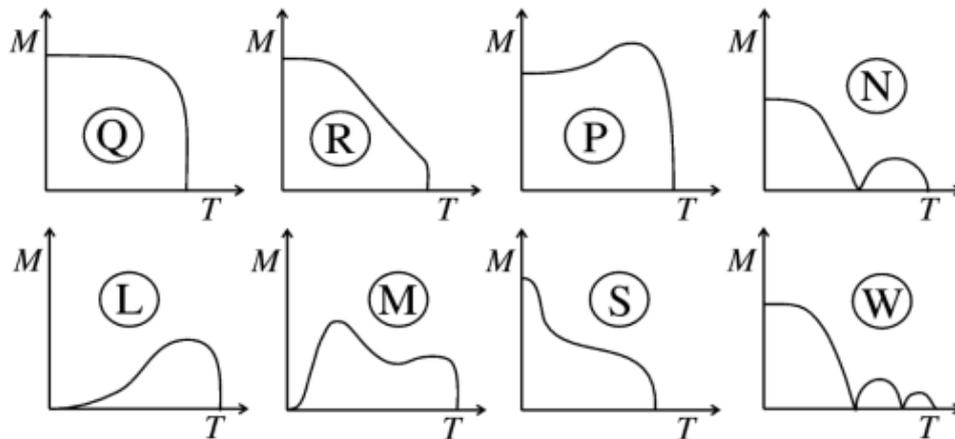
D'après les figures précédentes, seul le sous-réseau contenant les spins  $S = 2$  modifie sa valeur de saturation en raison de l'existence du champ cristallin qui agit sur eux. Toutefois, le sous-réseau  $1/2$  ne prend que la valeur  $-0.5$  dans chaque site à la température  $k_B T / |J| = 0.0$  pour toutes les valeurs de  $\Delta / |J|$ .



**Figure 4.7.** Aimantation totale du système  $M$  (a) et aimantations partielles des sous-réseaux  $M_S$  et  $M_\sigma$  (b) en fonction de la température pour la valeur du champ cristallin réduit  $-1.5 < \Delta / |J| < -0.50$ .

Dans la figure 4.8, nous présentons différents types de comportements de température de l'aimantation totale susceptible de se produire dans les matériaux ferromagnétiques en suivant la théorie phénoménologique élaborée par Louis Néel [29]. Cette figure présente tous les cas possibles (M, L, N, Q, P, ...) selon la nomenclature de variations de l'aimantation en fonction de la température.

Dans la figure 4.9, nous traçons les magnétisations totales  $M$  définies par l'équation (4.4) en fonction de la température pour plusieurs valeurs de  $\Delta / |J|$ , lorsque  $\Delta / |J|$  change sa valeur dans la plage  $-1.49 \leq \Delta / |J| \leq 3$ . À première vue, Il est intéressant de voir différents types de comportement des courbes de magnétisation sur la figure 4.9. Selon la théorie du ferrimagnétisme de Néel [29], on peut distinguer quatre différents types de courbes d'aimantation, à savoir les types Q, P, R et S. Par exemple, lorsque  $\Delta / |J| = \pm 0.5$ , les courbes sont de type Q.

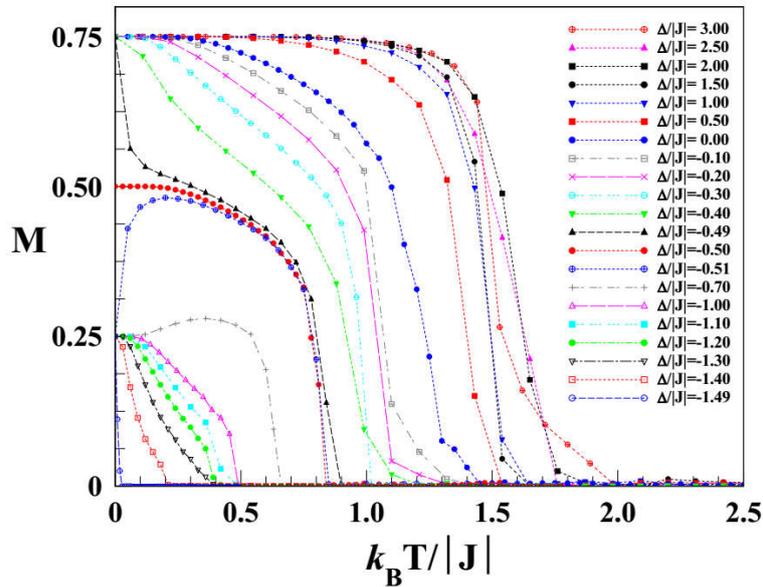


**Figure 4.8.** Différents types de dépendance à la température de l'aimantation totale selon la théorie du ferrimagnétisme [29].

Pour,  $\Delta / |J| = -0.7$  la courbe est de type P. Pour  $\Delta / |J| = -0.4$  et  $-1.2$ , les courbes sont de type S. La courbe d'aimantation devient de type R pour la valeur de  $\Delta / |J| = -1.2$  et  $\Delta / |J| = -0.2$ . Quand  $\Delta / |J| \geq 0.0$ , on trouve que les courbes d'aimantation totales sont de type Q.

Lorsque  $\Delta / |J| = -0.51$ , la magnétisation totale présente une forte augmentation rapide à partir de sa valeur de saturation  $M = 0.25$  à mesure que  $T$  augmente jusqu'à ce que le cas  $\Delta / |J| = -0.50$  devienne alors de type Q. De plus, pour  $\Delta / |J| = -0.49$ , près de la limite entre les phases ordonnées (II) et (III) dans le diagramme de phases de l'état fondamental (figure 4.2), la courbe chute verticalement à partir de la valeur de saturation  $M = 0.75$  à de très basses températures et se comporte alors comme une courbe de type Q. Le phénomène est encore renforcé lorsque la valeur de  $\Delta / |J|$  se rapproche de la limite  $\Delta / |J| = -0.5$ . Ces deux comportements ne sont pas prédits par la théorie phénoménologique élaborée par Louis Néel [29] mais des courbes similaires sont obtenues dans les réf. [8, 9], [12, 13], [24], [27, 28], [30-34] et les résultats présentés aux figures (4.4-4.7) peuvent également être comparés à ceux

trouvés dans ces références. Comme le montre la figure 4.9, le système étudié ne peut pas afficher les courbes de types N, M, W et L dans la variation thermique de la magnétisation.



**Figure 4.9.** Variations thermiques de la magnétisation totale  $M$  pour différentes valeurs de  $\Delta/|J|$ .

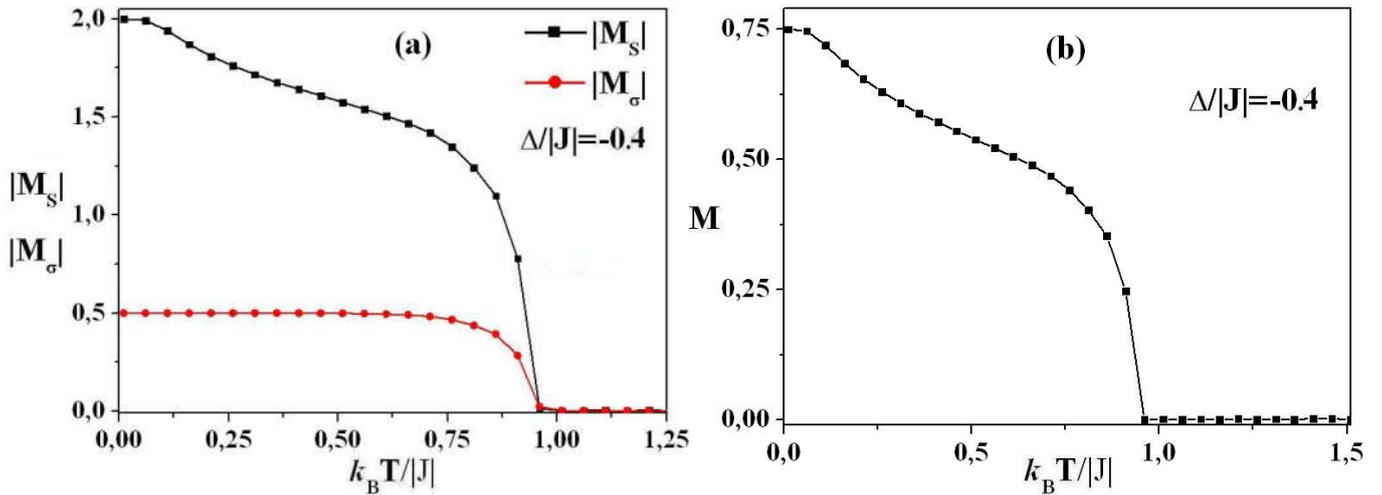
Outre des températures critiques de premier ordre et second ordre, il existe une autre température appelée température de compensation et qui est définie comme la température lorsque l'aimantation nette devient nulle ou que les courbes d'aimantation du sous-réseau se coupent avant les températures critiques. Par ailleurs, la température de compensation  $T_{comp}$  est définie comme la température, inférieure au point critique, à laquelle la magnétisation résultante du système est réduite à zéro car les magnétisations du sous-réseau s'annulent. Pour localiser  $T_{comp}$ , nous déterminons le point d'intersection des valeurs absolues des aimantations des sous-réseaux [8], c'est-à-dire :

$$|M_{\sigma}(T_{comp})|=|M_s(T_{comp})| \quad (4.9)$$

Avec les conditions :

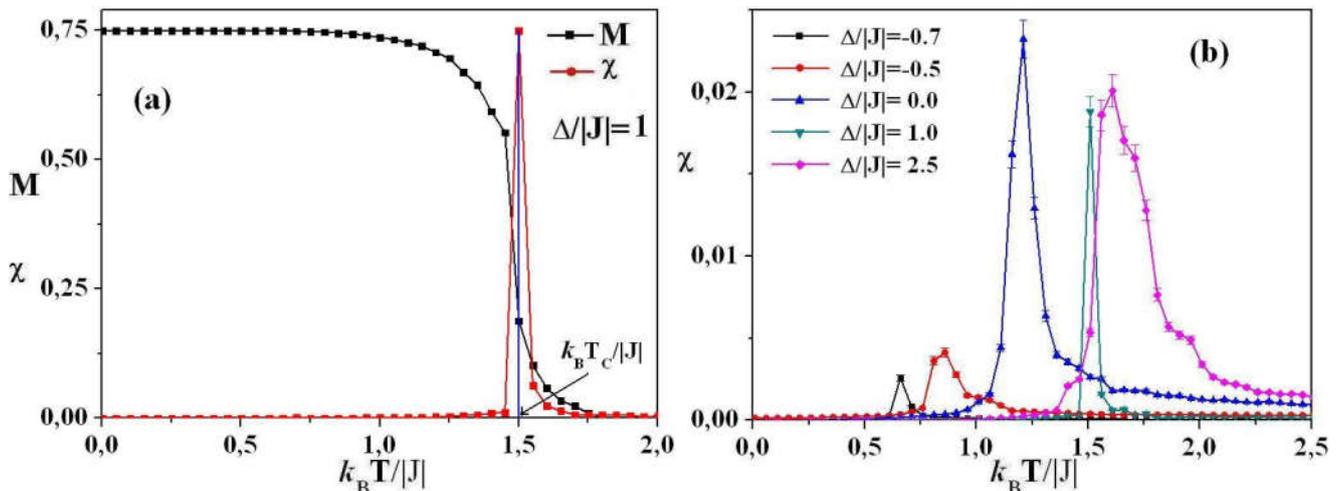
$$\text{Sign}(M_{\sigma}(T_{comp}))=-\text{sign}(M_s(T_{comp})), \quad T_{comp}<T_C \quad (4.10)$$

Où  $T_C$  est la température critique du système à laquelle les aimantations totale et des sous-réseaux vont à zéro.



**Figure 4.10.** Variations thermiques des valeurs absolues des magnétisations des sous-réseaux  $|M_S|$  et  $|M_\sigma|$  (a) et de l'aimantation totale  $M$  pour  $\Delta/|J| = -0.4$  (b).

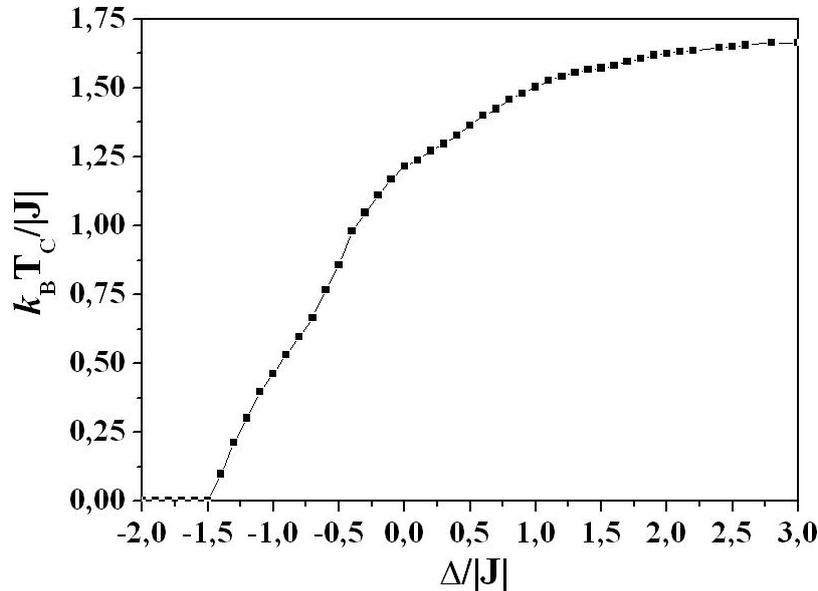
Par conséquent, afin de trouver les températures de transition de phase du second et du premier ordre pour obtenir les diagrammes de phase et aussi les lignes des températures de compensation, il faut étudier les comportements thermiques des paramètres d'ordre.



**Figure 4.11.** Dépendance thermique de la magnétisation totale  $M$  et de la susceptibilité pour la valeur du champ cristallin réduit  $\Delta/|J| = 1$  (a) et variations thermiques de la susceptibilité pour différentes valeurs de  $\Delta/|J|$  (b).

La figure 4.10 présente les variations des valeurs absolues des aimantations des sous-réseaux  $|M_S|$ ,  $|M_\sigma|$  et la magnétisation totale  $M$  pour la valeur du champ cristallin réduit  $\Delta/|J| = -0.4$ . La figure 4.10 (a) montre clairement qu'il n'y a pas de point de compensation inférieur à  $T_C$  entre les courbes  $|M_S|$  et  $|M_\sigma|$  pour  $\Delta/|J| = -0.4$ . Ensuite, la magnétisation totale disparaît uniquement au niveau de  $T_C$ , comme indiqué sur la figure 4.10 (a), car  $M = \frac{M_S + M_\sigma}{2}$ . Les mêmes remarques peuvent être appliquées à la figure 4.9. Ainsi, le comportement de type N n'a pas été observé comme le montre la figure 4.10. De plus, aucun type de comportements compensatoires

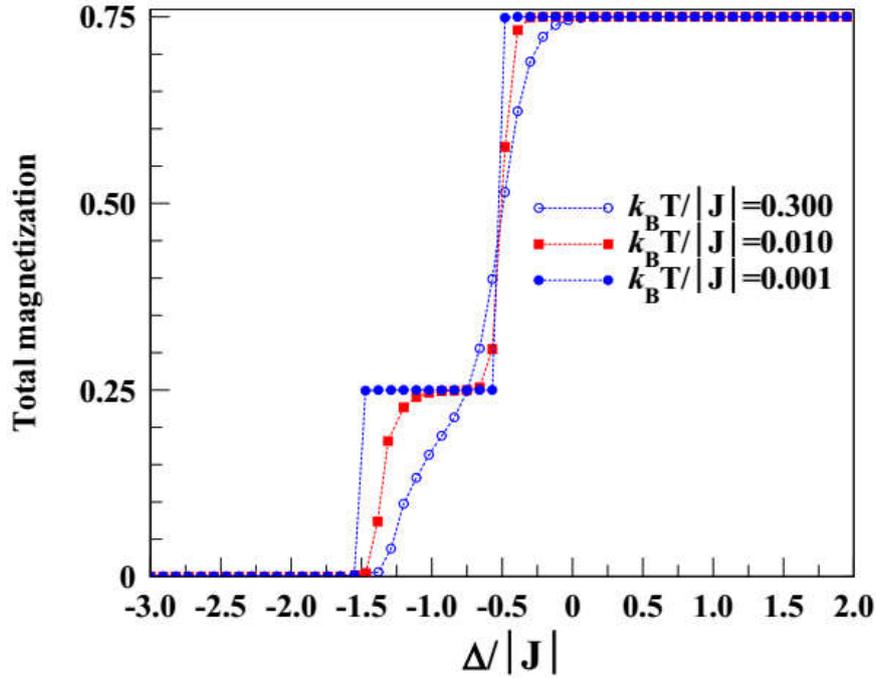
tel que W et N classés dans la théorie de Néel [61] n'est présent. En conséquence, le système ne peut pas présenter de phénomène de compensation pour toutes les valeurs sélectionnées de l'anisotropie  $\Delta / |J|$ .



**Figure 4.12.** Diagramme de phase dans le plan  $(\Delta / |J|, k_B T_C / |J|)$  pour le système ferrimagnétique d'Ising mixte spin  $-1/2$  avec spin  $-2$  pour le numéro de coordination  $z = 3$  (réseau en nid d'abeille).

Sur la figure 4.11 (a), nous avons établi à  $\Delta / |J| = 1$  l'aimantation totale et la susceptibilité en fonction de la température réduite. Nous notons que la température critique  $k_B T_C / |J|$  correspond au maximum de la susceptibilité. La figure 4.11 (b) montre également les variations thermiques de la susceptibilité magnétique par spin pour les valeurs sélectionnées de  $\Delta / |J| = -0.7, -0.5, 0.1$  et  $2.5$ . D'après la figure 4.11, il est évident que  $k_B T_C / |J|$  dépend de champ cristallin  $\Delta / |J|$ . Pour résumer, nous montrons à la figure 4.12 la température à laquelle le maximum de susceptibilité se produit en fonction du champ cristallin avec la méthode de Monte Carlo pour le système ferrimagnétique mixte spin  $-1/2$  et spin  $-2$  avec le numéro de coordination  $z = 3$  (réseau en nid d'abeille). La figure 4.12 montre clairement que la température critique  $k_B T_C / |J|$  augmente avec l'augmentation de la valeur du champ cristallin pour  $\Delta / |J| > -1.5$  en raison de la concurrence entre l'interaction d'échange et le champ cristallin.

Pour  $\Delta / |J| \ll -1.5$ , la température critique réduite est devenue nulle ( $k_B T_C / |J| = 0$ ). Dans cette plage, la phase stable est la phase paramagnétique et les états  $S = \pm 2, \pm 1$  disparaissent et le système devient équivalent à un modèle Ising à spin  $\sigma = 1/2$  dilué par les états  $S = 0$ .



**Figure 4.13.** Comportements de l'aimantation totale pour le système d'Ising ferrimagnétique des spins mixtes 1/2 et 2 avec le nombre de coordination  $z = 3$  (réseau en nid d'abeille), en fonction de  $\Delta/|J|$  à très basse température.

Pour  $\Delta/|J| = -1.5$ , nous avons  $k_B T_C / |J| = 0.0$  et la relation  $\Delta/|J| + z/2 = 0.0$ , conforme généralement aux références [8, 14, 27, 39]. On peut également noter que  $k_B T_C / |J| = 0$  quand  $\Delta/|J| = -1.5$ , entièrement cohérent avec les résultats obtenus dans la théorie du champ effectif [14], le réseau de Bethe [27] et la solution exacte [39] pour le système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (1/2, 2) sur un réseau en nid d'abeille avec  $z = 3$ .

De plus, le diagramme de phases montre que lorsque  $\Delta/|J| \rightarrow +\infty$ , le système de spins mixtes Ising se comporte comme un système à deux niveaux puisque le spin-2 se comporte comme  $S = \pm 2$ . C'est pourquoi la température critique tend à atteindre une valeur limitée, à savoir  $k_B T_C / |J| = 1.71$  ici, ce qui est proche de la valeur trouvée dans la réf. [27]. La ligne critique de transition de phase de la figure 4.12 est située au-dessus et au-dessous des lignes de la solution exacte et de la solution à champ effectif, respectivement, comme illustré à la figure 1 de [14]. Cependant, nos résultats sont quantitativement similaires à ceux du réseau de Bethe comme montré dans la figure 4 de la référence [27]. A partir de cette figure, certaines propriétés intéressantes du système sont distinguées. En effet, on remarque sur la figure 4.13 la courbe de l'aimantation totale est une fonction continue, par rapport à  $\Delta/|J|$ , en particulier quand  $\Delta/|J|$  se rapproche de la valeur -1.5 dans les courbes étiquetées  $k_B T_C / |J| = 0.01$  et  $k_B T_C / |J| = 0.3$ . C'est-à-dire que le système montre une transition de phase du second ordre à très basses températures. En revanche, la transition du premier ordre ne se produit que lorsque

la température tend à zéro. Par exemple, la courbe de magnétisation pour  $k_B T_C / |J| = 0.001$  présente une discontinuité. De ce fait, les transitions ne sont que du second ordre séparant la phase ferrimagnétique (**F**) et la phase paramagnétique (**P**). Donc, le système ne présente pas de point tricritique. Ce résultat est conforme à ceux obtenus en utilisant une théorie de champ effectif [14], le réseau de Bethe utilisant les équations de récursion exactes [27] et la solution exacte [39] pour les systèmes mixtes spin-1/2 et spin-2 sur un réseau en nid d'abeille ( $z = 3$ ).

Nous concluons que nos résultats de Monte Carlo pour le modèle d'Ising à spins mixte spin-1/2 et spin-2 sur le réseau en nid d'abeille montrent de bonnes similarités avec ceux obtenus précédemment pour le même modèle par la théorie du champ effectif [14], le réseau de Bethe [27] et la solution exacte [39].

## 4 Conclusion

Dans le cadre de la simulation de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis, nous avons étudié les propriétés magnétiques d'un système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (1/2, 2) sur un réseau en nid d'abeille tel que le nombre de coordination  $z = 3$ , sous l'effet d'un champ cristallin  $\Delta$  mono-ionique et les interactions entre les spins des premiers proches voisins  $J$ .

Le diagramme de phase du système n'a montré que la transition de phase du second ordre. De plus, divers types de courbes de magnétisation ont été obtenus à partir de la concurrence entre le couplage d'échange et le champ cristallin, tels que les types Q, P et S et les nouveaux.

D'après nos calculs, nous concluons qu'il n'y a ni point de compensation ni point tricritique pour les valeurs sélectionnées des paramètres du système.

## Références

- [1] D. L. Polla, *Microelec. Eng.* 29 (1995) 51.
- [2] G. Teowee, J. T. Simpson, T. J. Zhao, M. Mansuripur, J. M. Boulton, D. R. Uhlmann, *Microelec. Eng.* 29 (1995) 327.
- [3] H. Achard, H. Mace, L. Peccoud, *Microelec. Eng.* 29(1995) 19.
- [4] M. Drillon, E. Coronado, R. Georges, J. C. Gianduzzo, J. Curely, *Phys. Rev. B*, 40 (1989) 10992.
- [5] J. Petra van Koningsbruggen, O. Kahn et al, *Inorg. Chem.* 29 (1990) 3325.
- [6] T. Bahlagui, H. Bouda, A. El Kenz, L. Bahmad, A. Benyoussef, *Superl. Microstruct.* 110 (2017) 90.
- [7] N De La Espriella and G M Buendia, *J. Phys.: Condens. Matter* 23 (2011) 176003.
- [8] G M Buendia and J A Liendo, *J. Phys.: Cond. Mat.* 9 (1997) 5439.
- [9] Y. Nakamura and J. W. Tucker, *Ieee Trans. On Magnetics* (2002) 38.
- [10] J. S. da Cruz Filho, M. Godoy, A.S. de Arruda, *Physica A* 392 (2013) 6247.
- [11] L. Bahmad, M. Benayad, A. Benyoussef, A. El Kenz, *Acta. Phys. Polon. A* 119 (2011) 740.
- [12] O. F. Abubrig, D. Horvath, A. Bobak, M. Jascur, *Physica A* 296 (2001) 437.
- [13] T. Kaneyoshi, M. Jascur, P. Tomczak, *J. Phys.: Cond. Mat.* 4 (1992) 653.
- [14] T. Kaneyoshi, *Physica A* 205 (1994) 677.
- [15] A. Benyoussef, A. El Kenz, T. Kaneyoshi, *J. Magn. Magn. Mat.* 131(1994) 173.
- [16] N. Benayad, R. Zerhouni, A. Klumper, J. Zittartz, *Physica A* 262 (1999) 483.
- [17] M. Madani, A. Gaye, M. El Bouziani, A. Alrajhi, *Physica A* 437 (2015) 396.
- [18] M. El Bouziani, M. Madani, A. Gaye, A. Alrajhi, *World J. Cond. Mat. Phys.* 6 (2016) 109.
- [19] J.W. Tucker, *J. of Magn. Magn. Mat.* 195 (1999) 733.
- [20] M. Mouhib, N. Benayad, M. Azhari, *J. Magn. Magn. Mat.* 419 (2016) 325.
- [21] M. Ghliyem, N. Benayad, *M. J. Cond. Mat. Phys.* 12 (2010) 244.
- [22] J. Oitmaa, I. G. Enting, *J. Phys.: Cond. Mat. Phys.* 18 (2006) 10931.
- [23] K. F. Tang, *J. Phys. A: Math. Gen.* 21 (1988) 1097.
- [24] J.W. Tucker, *J. Magn. Magn. Mat.* 237 (2001) 215.
- [25] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087.
- [26] J. Strecka, M. Jascur, *J. Magn. Magn. Mat.* 260 (2003) 415.
- [27] E. Albayrak, A. Yigit, *Phys. Stat. Sol. (b)* 242 (2005) 1510.
- [28] J. Strecka, *Physica A* 360 (2006) 379.
- [29] L. Néel, *Ann. Phys.* 3 (1948) 137.
- [30] F. Abubrig, *Open J. Appl. Sci.* (2013) 270.
- [31] Y. Nakamura, *J. Phys.: Cond. Mat.* 12 (2000) 4067.
- [32] M. Karimou, R.A. Yessoufou, T.D. Oke, A. Kpadonou, F. Hontinfinde, *Condens. Mat. Phys.* 19 (2016) 33003.
- [33] L. Bahmad, A. Benyoussef, A. El Kenz, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 094412.
- [34] J. Strečka, C. Ekiz, *Acta Phys. Polon. A*, 131 (2017) 615.
- [35] M. Blume, *Phys. Rev.* 141 (1966) 517.
- [36] H.W. Capel, *Physica* 32 (1966) 966.

- [37] I.D. Lawrie, S. Sarback, in: C. Domb, J.L. Lebowitz (Eds.), *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 9, Academic Press, London, 1988.
- [38] E. Costabile, M. A. Amazonas, J. R. Viana, J. R. de Sousa, *Phys. Letters, A* 376 (2012) 2922.
- [39] L. L. Goncalves, *Phys. Scripta* 32 (1985) 248.
- [40] M. Žukovič and A. Bobák. *Phys. Rev. E*, 91 (2015) 052138.
- [41] N. Hachem, M. Madani, A. Lafhal, A. El Antari, A. Alrajhi, M. El Bouziani. *J. Supercond. Nov. Magn.* 26(2017). <https://doi.org/10.1007/s10948-017-4468-8>.
- [42] B. Boughazi, M. Boughrara, M. Kerouad. *Phys. A* 465 (2017) 628.
- [43] N. De La Espriella, G.M. Buendía, *Phys. A* 389 (2010) 2725.
- [44] N. De La Espriella, J. Madera, M.S. Páez, *Rev. Mex. Fis.* 60 (6) (2014) 419.
- [45] G. Wei, Q. Zhang, Y. Gu, *J. Magn. Mater.* 301 (2006) 245.
- [46] A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* 61, 2635 (1988).
- [47] U. Wolff, *Computer Physics Communications* 156 (2004) 143-153.
- [48] D. York, N. Evensen, M. Martinez, J. Delgado, *Am. J. Phys.* 72 367 (2004).

# Chapitre 5

---

*Etude théorique d'un système d'Ising  
ferrimagnétique à spins mixtes (3/2 ; 3)  
par l'approximation du champ moyen*

---

Dans ce chapitre, nous présentons la formulation du système d'Ising ferrimagnétique à deux spins mixtes sur deux sous-réseaux, où les deux sous-réseaux interagissant ont des spins  $\sigma = 3/2$  et  $S = 3$  sur un réseau carré, dans le cadre de la théorie du champ moyen basé sur l'inégalité Bogoliubov pour l'énergie libre de Gibbs. Nous chercherons d'abord les expressions d'aimantation et d'énergie libre avec diverses anisotropies mono-ioniques ( $\Delta_\sigma, \Delta_s$ ). Ensuite, nous illustrerons les diagrammes de phase de l'état fondamental dans le plan ( $\Delta_\sigma, \Delta_s$ ) et ( $J, \Delta$ ) avec  $\Delta = \Delta_\sigma = \Delta_s$ . Nous étudierons également les variations thermiques des aimantations de sous-réseaux, et présenterons le diagramme de phase dans le plan ( $\Delta/J, k_B T/J$ ). Enfin, nous présenterons les conclusions de ce modèle concernant le montage de transition de phase, y a-t-il un point tricritique ? Quelles la température de compensation ? Le système affichera-t-il également un comportement de rentrée ?

## 1 Introduction

Au cours des dernières années, un intérêt considérable a été porté à l'étude théorique des systèmes d'Ising à spins mixtes dans le domaine des matériaux magnétiques à base moléculaire [1-5].

Ces systèmes ont moins de symétrie de translation que leurs homologues à un seul spin ; par conséquent, ils présentent de nombreux nouveaux phénomènes qui ne peuvent pas être observés dans les systèmes à un seul spin. Ces systèmes sont bien adaptés pour étudier un certain type de ferrimagnétisme, qui est d'un grand intérêt en raison de ses propriétés intéressantes et éventuellement utiles pour des applications technologiques et pour la recherche académique, pour comprendre le comportement thermodynamique des systèmes à spins mixtes à deux sous-réseaux.

L'intérêt croissant pour ces systèmes est principalement lié aux applications technologiques potentielles, dans divers domaines tels que les supports d'enregistrement thermomagnétiques [6-7], les systèmes micro-électromécaniques (MEMS) [8], l'informatique, l'optoélectronique et le stockage holographique. Afin d'atteindre une nouvelle génération de mémoires optiques amovibles avec des capacités de lecture et débits de lecture bien supérieurs à ceux des disques optiques actuels. [9-11].

L'aspect d'équilibre du modèle spin-3/2 Ising a été étudié séparément avec de nombreux modèles exacts ou approximatifs et qui est également mélangé avec d'autres spins magnétiques tels que spin-1/2, 1, 2, 5/2, etc...., Ces études ont montré que ces systèmes présentent des phénomènes critiques intéressants [12-17].

C'est ainsi que, comme décrit précédemment, ces systèmes mixtes ont été étudiés par les méthodes bien connues en physique statistique à l'équilibre, telles que l'approximation en champ moyen [18-27], les techniques de groupe de renormalisation [28-29], la théorie du champ effectif [30-37] et les simulations de Monte Carlo [38-42].

Néanmoins, certains désaccords sont apparus entre les études théoriques, comme l'existence de points tricritiques. De plus, certaines de ces études indiquent qu'il n'y a pas de point de compensation [46] si seulement l'interaction des plus proches voisins est considérée dans l'hamiltonien.

D'autre part, le système d'Ising des spins mixtes ( $3/2 ; 3$ ) a reçu moins d'attention. Il y a deux tentatives ; la première tentative d'exploration de ce système a été faite par Aycan Özkan [43] qui a étudié les comportements magnétiques et de compensation, les exposants critiques et le diagramme de phase fondamental en utilisant l'algorithme de refroidissement sur l'automate cellulaire pour les réseaux carrés avec des conditions aux limites périodiques. La deuxième tentative d'investigation a été effectuée par le même auteur Aycan Özkan [44] qui a appliqué les algorithmes de refroidissement et de chauffage améliorés de l'automate cellulaire CCA pour le modèle d'Ising unidimensionnel toujours avec des conditions limites périodiques.

Par ailleurs, le magnétisme de faible dimension fait l'objet d'études depuis de nombreuses années. Au cours des dernières décennies, de nouveaux matériaux ont été synthétisés pour obtenir un magnétisme à hautes températures. L'un de ces matériaux est l'assemblage à pont cyano 4f-3d. Les ions lanthanides sont liés à des blocs ayant de grands aimants magnétiques anisotropes donnant des aimants durs et un ordre magnétique à longue portée dans les solides [47-50]. Certains assemblages cyano-pontés 4f-3d présentent également une relaxation magnétique induite par le champ [49], un magnétisme dépendant de la vitesse de refroidissement [51], une magnétisation photo-induite [52] et une réponse à l'humidité [53]. Les interactions entre les ions / molécules déterminent les propriétés électroniques et magnétiques ainsi que la dimensionnalité de l'assemblage. Récemment, Guo et al. ont synthétisé l'assemblage bimétallique chrome (III) et terbium (III) Cyano-ponté  $[Tb(H_2O)_2(DMF)_4Cr(CN)_6]$ .  $H_2O$  (DMF = diméthylformamide) [47]. Ils ont suggéré que l'interaction antiferromagnétique entre les ions Tb (III) et Cr (III) représentés par  $S = 3$  et  $\sigma = 3/2$ , respectivement, conduit à une structure ferrimagnétique dans une chaîne zig-zag. Une transition vers l'ordre magnétique à longue portée tridimensionnelle à partir des chaînes ferrimagnétiques Tb (III) -Cr (III) se produit à  $T_C = 5$  K avec les interactions inter-chaînes faibles. Par conséquent, ils attirent l'attention sur la nécessité de poursuivre les études expérimentales et théoriques pour éclairer ce mécanisme d'interaction magnétique.

Par conséquent, dans ce travail, nous considérons le système d'Ising ferrimagnétique mixte de spin-3/2 et spin-3 sur un réseau carré en utilisant le formalisme de la théorie du champ moyen [45].

L'objectif de cette étude dans la première étape est de se focaliser sur le cas du système ferrimagnétique mixte Blume-Capel Ising spin-3/2 et spin-3 avec une anisotropie mono-ionique uniforme sur un réseau carré (c'est-à-dire  $\Delta_\sigma = \Delta_s$ ) dans le cadre de la théorie du champ moyen. Bien entendu, nous avons besoin de réponses aux questions suivantes que les auteurs posent souvent :

- ◆◆◆ Les transitions de phase du second ordre sont-elles valables pour toute la gamme de l'intensité de l'anisotropie, ou existe-t-il un point tricritique séparant les lignes des transitions du second ordre et du premier ordre ?
- ◆◆◆ Y a-t-il un phénomène réentrant dans la limite de phase du premier et du second ordre ?
- ◆◆◆ La ligne des transitions du premier ordre se situe-t-elle dans la région ferrimagnétique ordonnée ?
- ◆◆◆ Le système peut-il afficher un ou plusieurs points de compensation ?

Le reste de ce chapitre est organisé comme suit. Dans la section 2, nous introduisons le modèle et donnons les détails de la théorie du champ moyen. Nous discutons de nos résultats dans la section 3. Enfin, dans la section 4, nous présentons nos conclusions et suggérons quelques avenues de recherche.

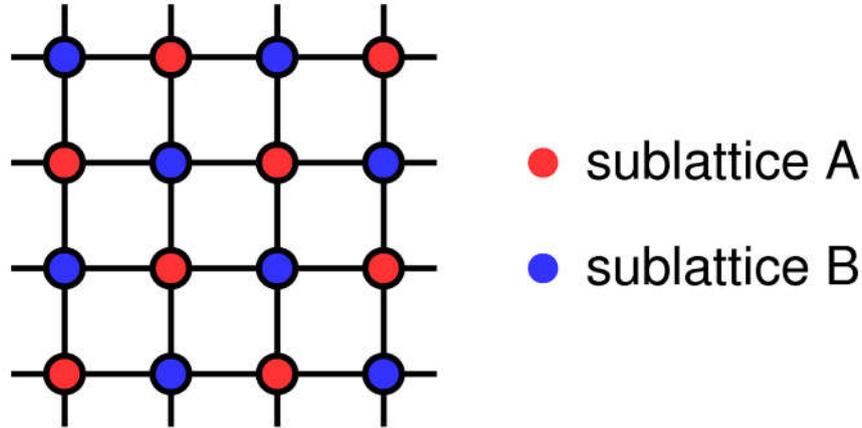
## 2 Modèle et théorie

Le système ferrimagnétique à spins mixtes qui nous intéresse est constitué de deux sous-réseaux bidimensionnels (figure 5.1). Un sous-réseau **A** qui possède des spins  $\sigma$  supposés prendre les valeurs :  $\pm 1/2$  et  $\pm 3/2$ , et un autre sous-réseau **B** qui a des spins **S** qui peuvent prendre les valeurs :  $\pm 3, \pm 2, \pm 1$  et 0, avec différentes anisotropies ioniques respectivement  $\Delta_\sigma$  et  $\Delta_s$  qui sont en unités d'énergie. Les spins  $\sigma$  ont uniquement les spins **S** comme proches voisins et vice versa. L'interaction entre les spins  $\sigma$  et **S** est supposée être un échange ferrimagnétique. Le hamiltonien du système est donné par

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j + \Delta_\sigma \sum_i \sigma_i^2 + \Delta_s \sum_j S_j^2 \quad (5.1)$$

Où  $N$  est le nombre total de sites en réseau ;  $\langle ij \rangle$  indique une paire de sites les plus proches

voisins. Le paramètre d'interaction d'échange  $J$  est supposé positif ( $J$  est en unité d'énergie). La première sommation est limitée sur les sites les plus proches voisins. Les deux dernières sommations sont effectuées sur chaque sous-réseau.



**Figure 5.1.** Partie d'un réseau carré sous investigation. Les cercles pleins rouges représentent les atomes magnétiques pour le sous-réseau A (spin  $\sigma = 3/2$ ) et les cercles solides bleus désignent les atomes magnétiques pour le sous-réseau B (spin  $S = 3$ ). Les lignes continues reliant les cercles bleus et rouges désignent le couplage d'échange  $J$  entre les spins les plus proches voisins.

Afin de dériver la meilleure approximation possible du modèle actuel pour un hamiltonien microscopique donné, nous employons une méthode variationnel basée sur l'inégalité de Bogoliubov pour l'énergie libre [45], à savoir :

$$F(H) \leq \mathcal{O} = F_0(H_0) + \langle H - H_0 \rangle_0 \quad (5.2)$$

Où  $F$  est l'énergie libre de  $H$  donnée par la relation (5.1),  $F_0$  est l'énergie libre d'un hamiltonien d'essai  $H_0$  en fonction de paramètres variationnels et  $\langle \dots \rangle_0$  désigne une moyenne thermique sur l'ensemble défini par  $H_0$ . Dans ce travail, nous considérons l'un des choix les plus simples de  $H_0$ , à savoir

$$H_0 = \underbrace{\eta_\sigma \sum_i^{N/2} \sigma_i + \Delta_\sigma \sum_i^{N/2} \sigma_i^2}_{\text{sous Réseau A}} + \underbrace{\eta_S \sum_j^{N/2} S_j + \Delta_S \sum_j^{N/2} S_j^2}_{\text{sous Réseau B}} \quad (5.3)$$

Où  $\eta_\sigma$  et  $\eta_S$  sont les deux paramètres variationnels liés aux deux spins différents, respectivement.

En minimisant l'équation (5.2) par rapport aux paramètres variationnels, on obtient l'énergie libre approximative par site, ce qui est donné comme suit :

$$\begin{aligned}
f = \frac{\mathcal{O}}{N} = & -\frac{1}{2\beta} \ln \left[ 2e^{-9\beta\Delta_B} \operatorname{ch}(3\beta\eta_B) + 2e^{-4\beta\Delta_B} \operatorname{ch}(2\beta\eta_B) + 2e^{-\beta\Delta_B} \operatorname{ch}(\beta\eta_B) + 1 \right] \\
& -\frac{1}{2\beta} \ln \left[ 2e^{\frac{9}{4}\beta\Delta_A} \operatorname{ch}\left(\frac{3\beta\eta_A}{2}\right) + 2e^{\frac{1}{4}\beta\Delta_A} \operatorname{ch}\left(\frac{\beta\eta_A}{2}\right) \right] \\
& + \frac{1}{2} (zJM_\sigma M_S - \eta_A M_\sigma - \eta_B M_S)
\end{aligned} \tag{5.4}$$

où  $z$  est le numéro de coordination lié à la dimension géométrique du réseau  $D$  par la relation

$$z = 2D ; \beta = \frac{1}{k_B T} \text{ et } k_B \text{ est le facteur de Boltzmann ; } M_\sigma \text{ et } M_S \text{ sont les aimantations de}$$

sous-réseaux par site définis comme suit :

$$M_\sigma = \langle \sigma \rangle_0 = -\frac{1}{2} \frac{3e^{-2\beta\Delta_A} \operatorname{sh}\left(\frac{3\beta\eta_A}{2}\right) + \operatorname{sh}\left(\frac{\beta\eta_A}{2}\right)}{e^{-2\beta\Delta_A} \operatorname{ch}\left(\frac{3\beta\eta_A}{2}\right) + \operatorname{ch}\left(\frac{\beta\eta_A}{2}\right)} \tag{5.5}$$

$$M_S = \langle S \rangle_0 = -2 \frac{3e^{-9\beta\Delta_B} \operatorname{sh}(3\beta\eta_B) + 2e^{-4\beta\Delta_B} \operatorname{sh}(2\beta\eta_B) + e^{-\beta\Delta_B} \operatorname{sh}(\beta\eta_B)}{2e^{-9\beta\Delta_B} \operatorname{ch}(3\beta\eta_B) + 2e^{-4\beta\Delta_B} \operatorname{ch}(2\beta\eta_B) + 2e^{-\beta\Delta_B} \operatorname{ch}(\beta\eta_B) + 1} \tag{5.6}$$

Ensuite, en minimisant l'énergie libre de l'équation (5.4) par rapport à  $M_\sigma$  et  $M_S$ , nous obtenons

$$\eta_\sigma = zJM_S \quad , \quad \eta_S = zJM_\sigma \tag{5.7}$$

$$M_\sigma = -\frac{1}{2} \frac{3e^{-\frac{2d_\sigma}{t}} \operatorname{sh}\left(\frac{3zM_S}{2t}\right) + \operatorname{sh}\left(\frac{zM_S}{2t}\right)}{e^{-2td_\sigma} \operatorname{ch}\left(\frac{3zM_S}{2t}\right) + \operatorname{ch}\left(\frac{zM_S}{2t}\right)} \tag{5.8}$$

$$M_S = -2 \frac{3e^{-\frac{9d_S}{t}} \operatorname{sh}\left(\frac{3zM_\sigma}{t}\right) + 2e^{-\frac{4d_S}{t}} \operatorname{sh}\left(\frac{2zM_\sigma}{t}\right) + e^{-\frac{d_S}{t}} \operatorname{sh}\left(\frac{zM_\sigma}{t}\right)}{2e^{-\frac{9d_S}{t}} \operatorname{ch}\left(\frac{3zM_\sigma}{t}\right) + 2e^{-\frac{4d_S}{t}} \operatorname{ch}\left(\frac{2zM_\sigma}{t}\right) + 2e^{-\frac{d_S}{t}} \operatorname{ch}\left(\frac{zM_\sigma}{t}\right) + 1} \tag{5.9}$$

$$\begin{aligned}
2\beta f = & -\frac{1}{t} zM_\sigma M_S - \ln \left[ 2e^{\frac{9d_\sigma}{4t}} \operatorname{ch}\left(\frac{3zM_S}{2t}\right) + 2e^{\frac{1d_\sigma}{4t}} \operatorname{ch}\left(\frac{zM_S}{2t}\right) \right] - \\
& \ln \left[ 2e^{-\frac{9d_S}{t}} \operatorname{ch}\left(\frac{3zM_\sigma}{t}\right) + 2e^{-\frac{4d_S}{t}} \operatorname{ch}\left(\frac{2zM_\sigma}{t}\right) + 2e^{-\frac{d_S}{t}} \operatorname{ch}\left(\frac{zM_\sigma}{t}\right) + 1 \right]
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Avec

$$\beta J = \frac{1}{t}, \quad d_\sigma = \frac{\Delta_\sigma}{J}, \quad \beta \Delta_\sigma = \frac{d_\sigma}{t}, \quad d_s = \frac{\Delta_s}{J} \quad \text{et} \quad \beta \Delta_s = \frac{d_s}{t} \quad (5.11)$$

Avant de présenter les résultats de notre modèle, l'obtention des températures de transition de phase de deuxième ou du premier ordre et des compensations et tricritique doit être présentée. A la température de transition de phase du second ordre  $t_c = k_B T_c / J$ , les aimantations de sous-réseaux vont continuellement à zéro tandis qu'à la température de transition du premier ordre  $t_f = k_B T_f / J$ , les aimantations de sous-réseaux présentent un saut discontinu [40]. Un point tricritique (TCP) est un point où l'ordre de la transition change son caractère du premier au second ordre.

De plus, dans un matériau ferrimagnétique, deux moments magnétiques inéquivalents en interaction peuvent engendrer une aimantation spontanée nulle inférieure à sa température critique  $t_c$ . Ensuite, un point spécial peut apparaître à une température inférieure à la température critique, où les aimantations de sous-réseaux s'annulent exactement les unes les autres. Ce point est ce qu'on appelle le point de compensation sa température notée  $t_{comp} = k_B T_{comp} / J$  [46], c'est-à-dire,

$$|M_\sigma(t_{comp})| = |M_s(t_{comp})| \quad (5.12)$$

avec les conditions :

$$\text{sign}(M_\sigma(t_{comp})) = -\text{sign}(M_s(t_{comp})) \quad \text{pour} \quad t_{comp} < t_c \quad (5.13)$$

Par conséquent, au point de compensation :

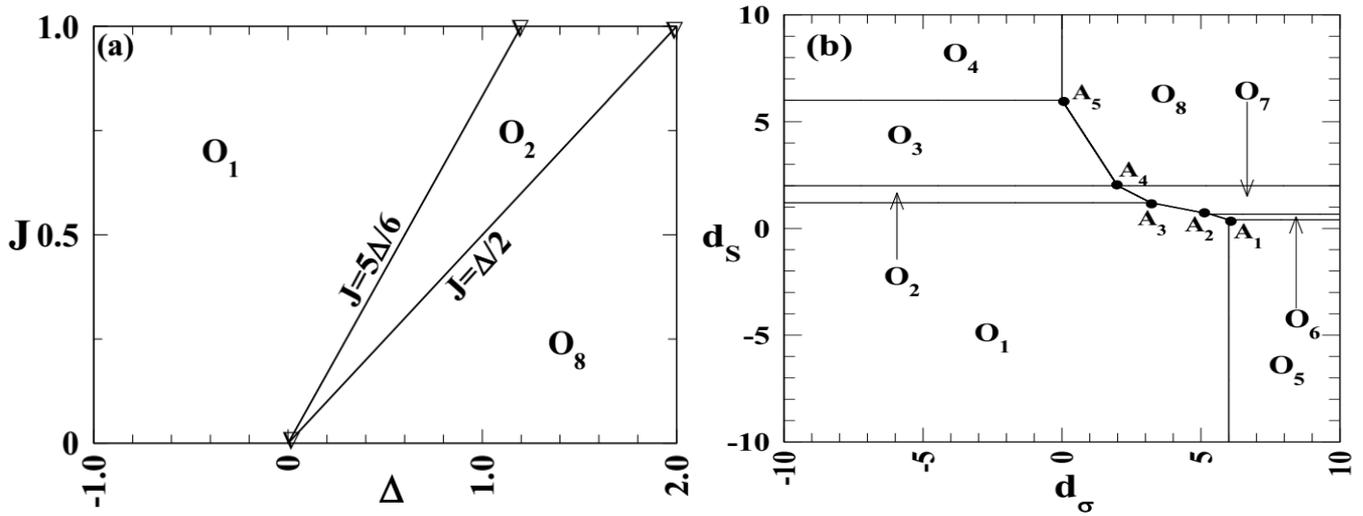
$$M_t = \frac{M_\sigma(t_{comp}) + M_s(t_{comp})}{2} = 0 \quad (5.14)$$

## 3 Résultats et discussion

### 3.1 L'état fondamental du système

Tout d'abord, nous déterminons la structure du diagramme de phase de l'état fondamental puisqu'il peut être calculé exactement. Ce diagramme est utile pour étudier les diagrammes de températures finies du système et il est pratique d'identifier les régions où le modèle d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (3/2, 3) peut afficher des comportements magnétiques intéressants et vérifier les lignes de transition du premier ordre. Aussi proche de

la température nulle, il est souvent difficile d'effectuer les calculs numériques et la convergence des grandeurs physiques est également difficile à réaliser.



**Figure 5.2.** Diagrammes de phases à l'état fondamental (a) dans le plan  $(\Delta ; J)$  lorsque  $\Delta = \Delta_\sigma = \Delta_s$ , le triangle correspond au point multicritique, (b) dans le plan  $(d_\sigma ; d_s)$ .  $A_k$  est le point multicritique. Pour les notations  $(O_1)$ , ...,  $(O_8)$  voir les tableaux 1 et 3.

Dans le premier cas, le diagramme de phase de l'état fondamental est obtenu avec des intensités de champ cristallin égales, c'est-à-dire  $\Delta = \Delta_\sigma$  pour spin-3/2 et  $\Delta = \Delta_s$  pour spin-3. Ce diagramme est tracé dans le plan  $(\Delta, J)$  (figure 5.2a) selon les conditions  $0 \leq J \leq 1$  et  $-1 \leq \Delta \leq 2$ , et cela en calculant et en comparant les énergies de toutes les configurations possibles.

**Table 1** Configurations des spins possibles et leurs énergies.

Region	Configuration	Phase	Énergie de l'état fondamentale	Condition
$(O_1)$	$(-3/2; +3)$	Ferrimagnétique	$E = -36J + 45\Delta/2$	$\Delta/J \leq 6/5$
$(O_2)$	$(-3/2; +2)$	Ferrimagnétique	$E = -24J + 25\Delta/2$	$6/5 \leq \Delta/J \leq 2$
$(O_8)$	$(-1/2; 0)$	Paramagnétique	$E = \Delta/2$	$2 \leq \Delta/J$

Dans le tableau 1, les configurations de l'état fondamental et les énergies correspondantes sont représentées. Les phases stables sont :  $(O_1) \equiv (-3/2, +3)$ ,  $(O_2) \equiv (-3/2, +2)$  et  $(O_8) \equiv (-1/2, 0)$  et il y a deux lignes de coexistence qui séparent les configurations, dont les équations sont présentées dans le diagramme, comme indiqué sur la figure 5.2a et dans le tableau 2. En outre, le tableau 2 montre les deux phases qui peuvent coexister et les deux valeurs critiques du champ du cristal réduit  $d = \Delta / J = 1,2$  et  $2$  qui sont représentés sur la figure 5.2a par des triangles.

**Table 2** Lignes et phases de coexistence.

Phase	Ligne de coexistence des phases	Valeurs critiques
(O <sub>1</sub> )-(O <sub>2</sub> )	$J=5\Delta/6$	$d=\Delta/J= 1.2$
(O <sub>2</sub> )-(O <sub>8</sub> )	$J=\Delta/ 2$	$d=\Delta/J= 2.0$

**Table 3** Configurations des spins possibles et leurs énergies.

Region	Configuration	Phase	Énergie de l'état fondamentale
(O <sub>1</sub> )	(-3/2 ; +3)	Ferrimagnétique	$E_1 = -36 + \frac{9}{2}d_\sigma + 18d_s$
(O <sub>2</sub> )	(-3/2 ; +2)	Ferrimagnétique	$E_2 = -24 + \frac{9}{2}d_\sigma + 8d_s$
(O <sub>3</sub> )	(-3/2 ; +1)	Ferrimagnétique	$E_3 = -12 + \frac{9}{2}d_\sigma + 2d_s$
(O <sub>4</sub> )	(-3/2 ; 0)	Paramagnétique	$E_4 = \frac{9}{2}d_\sigma$
(O <sub>5</sub> )	(-1/2 ; +3)	Ferrimagnétique	$E_5 = -12 + \frac{1}{2}d_\sigma + 18d_s$
(O <sub>6</sub> )	(-1/2 ; +2)	Ferrimagnétique	$E_6 = -8 + \frac{1}{2}d_\sigma + 8d_s$
(O <sub>7</sub> )	(-1/2 ; +1)	Ferrimagnétique	$E_7 = -4 + \frac{1}{2}d_\sigma + 2d_s$
(O <sub>8</sub> )	(-1/2 ; 0)	Paramagnétique	$E_8 = \frac{1}{2}d_\sigma$

Pour le dernier cas, le diagramme de phase de l'état fondamental du système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes spin-3/2 et spin-3 avec différentes anisotropies mono-ioniques  $\Delta_\sigma$  et  $\Delta_s$  est également obtenu, dans le plan ( $\mathbf{d}_\sigma = \Delta_\sigma/\mathbf{J}$  ;  $\mathbf{d}_s = \Delta_s/\mathbf{J}$ ) lorsque  $-10 \leq \mathbf{d}_\sigma \leq 10$  et  $-10 \leq \mathbf{d}_s \leq 10$ , comme le montre la figure 5.2 (b). Il a huit différentes régions avec cinq points multicritiques, à savoir **A<sub>1</sub>**, **A<sub>2</sub>**, **A<sub>3</sub>**, **A<sub>4</sub>** et **A<sub>5</sub>** (figure 5.2 (b)). Les configurations de spins dans chaque région, les équations des lignes de coexistence et les coordonnées des points multicritiques sont présentées dans les tableaux 3, 4 et 5, respectivement.

**Table 4** Lignes et phases de coexistence.

Phases	Ligne de coexistence des phases	Intervalle de $\mathbf{d}_\sigma$	Intervalle de $\mathbf{d}_s$
(O <sub>1</sub> )-(O <sub>2</sub> )	$d_s = 1.2$	$d_\sigma \leq 3.2$	$d_s = 1.2$
(O <sub>2</sub> )-(O <sub>3</sub> )	$d_s = 2.0$	$d_\sigma \leq 2.0$	$d_s = 2.0$
(O <sub>3</sub> )-(O <sub>4</sub> )	$d_s = 6.0$	$d_\sigma \leq 0.0$	$d_s = 6.0$

(O5)-(O6)	$d_s = 0.4$	$d_\sigma \geq 6.0$	$d_s = 0.4$
(O6)-(O7)	$d_s = 2 / 3$	$d_\sigma \geq \frac{16}{3}$	$d_s = \frac{2}{3}$
(O7)-(O8)	$d_s = 2.0$	$d_\sigma \geq 2.0$	$d_s = 2.0$
(O1)-(O5)	$d_\sigma = 6.0$	$d_\sigma = 6.0$	$d_s \leq 0.4$
(O1)-(O6)	$d_s = -\frac{2}{5}d_\sigma + \frac{14}{5}$	$\frac{16}{3} \leq d_\sigma \leq 6.0$	$0.4 \leq d_s \leq \frac{2}{3}$
(O1)-(O7)	$d_\sigma = -\frac{1}{4}d_s + 2$	$3.2 \leq d_\sigma \leq \frac{16}{3}$	$\frac{2}{3} \leq d_s \leq 1.2$
(O2)-(O7)	$d_s = -\frac{2}{3}d_\sigma + \frac{10}{3}$	$2.0 \leq d_\sigma \leq 3.2$	$1.2 \leq d_s \leq 2.0$
(O3) - (O8)	$d_s = -2d_\sigma + 6$	$0.0 \leq d_\sigma \leq 2.0$	$2.0 \leq d_s \leq 6.0$
(O4) - (O8)	$d_\sigma = 0.0$	$d_\sigma = 0.0$	$d_s \geq 6.0$

**Table 5** Phases coexistantes et points multicritiques.

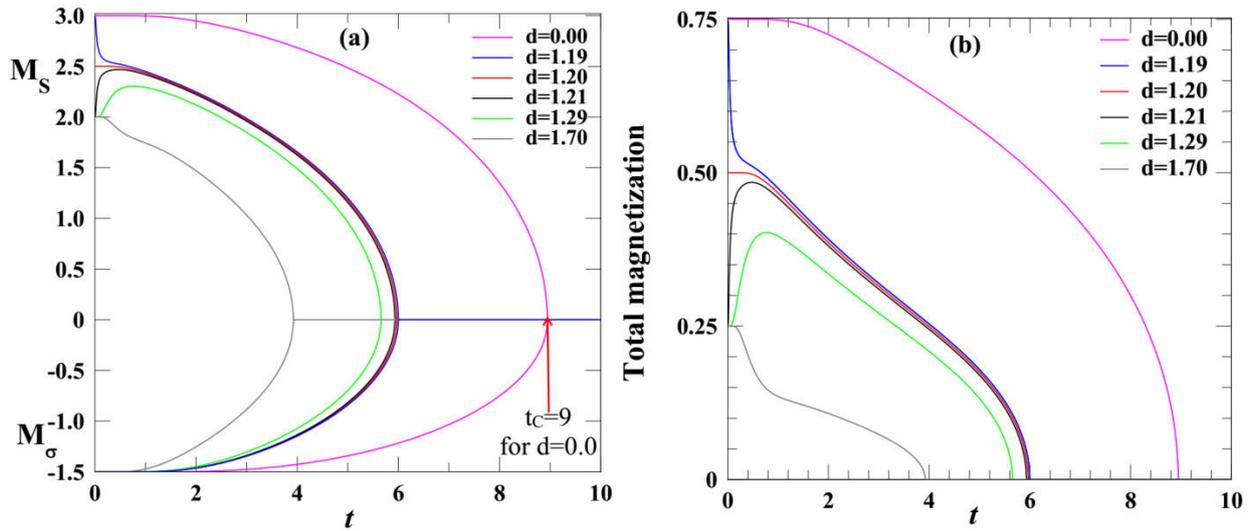
Points multicritiques	Phases	Les coordonnées du point multicritique	
		$d_\sigma$	$d_s$
A1	(O1) - (O5) - (O6)	6.0	0.4
A2	(O1) - (O6) - (O7)	16/3	2/3
A3	(O1) - (O2) - (O7)	3.2	1.2
A4	(O2) - (O3) - (O7) - (O8)	2.0	2.0
A5	(O3)-(O4)-(O8)	0.0	6.0

### 3.2 Propriétés magnétiques

Dans cette section, nous nous intéressons aux magnétisations qui caractérisent les différentes phases observées dans les diagrammes de phases précédents en fonction du champ cristallin réduit et de la température réduite pour  $d = d_\sigma = d_s$ .

Le comportement thermique des aimantations de sous-réseaux ( $\mathbf{M}_\sigma$  et  $\mathbf{M}_s$ ) et l'aimantation totale  $\mathbf{M}_t$  pour plusieurs valeurs de  $d$  sont obtenus en résolvant les équations (5.8), (5.9) et (5.10). Nous remarquons deux valeurs critiques de  $d$  qui sont 1.2 et 2.0 comme indiqué sur la figure 5.2 (a) et le tableau 5.2. Par conséquent, nous étudions quatre cas, à savoir,  $d < 1.2$ ,  $d = 1.2$ ,  $1.2 < d < 2.0$  et  $2.0 \leq d$ . Les résultats sont représentés sur les figures 5.3-5.8, pour toutes les valeurs de  $d$  dans l'intervalle  $[0, 2]$ .

Nous présentons sur la figure 5.3 les aimantations des sous réseaux  $\mathbf{M}_\sigma$  et  $\mathbf{M}_S$  (figure 5.3a) et l'aimantation totale  $\mathbf{M}_t$  (figure 5.3b) en fonction de la température pour certaines valeurs de  $d$ . Cette figure montre le point de transition bien connu, à la température critique réduite  $t_c = k_B T_c / J$ , qui sépare les phases ferrimagnétique et paramagnétique du système et diminue avec l'augmentation de  $d$ .

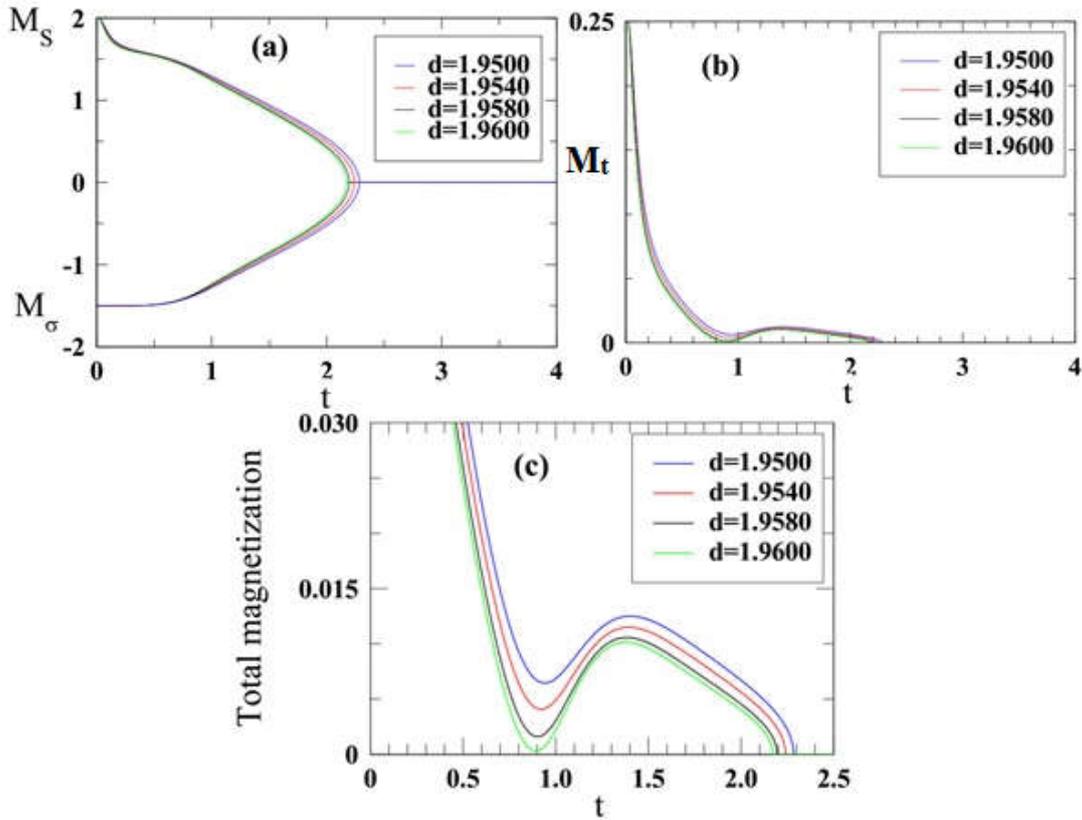


**Figure 5.3.** Aimantations des sous reseaux  $M_S$ ,  $M_\sigma$  (a) et total  $M_t = (M_\sigma + M_S)/2$  (b) en fonction de la température réduite pour six valeurs du champ cristallin réduit  $d$ : 0.00, 1.19, 1.2, 1.21, 1.29 et 1.70.

Pour  $d = 0.0$ , la variation thermique des magnétisations du sous-réseau montre un comportement normal, où l'on note que l'aimantation totale commence par la valeur de saturation  $\mathbf{M}_t = 0.75$ . Cela vient du fait que  $\mathbf{M}_S(t = 0) = 3$  et  $\mathbf{M}_\sigma(t = 0) = -3/2$ . Selon la théorie de Néel [45], le système se comporte comme un type Q. Il convient de noter ici que  $t_c$  est 9.

Pour la valeur critique  $d = 1.2$  à  $t = 0$ ,  $\mathbf{M}_t$  sature à  $\mathbf{M}_t = 0,5$  car l'état fondamental du spin- $\sigma$  est  $-3/2$  et  $5/2$  pour le spin-S. Effectivement, sur le sous-réseau S, les états  $S = 3$  et  $2$  coexistent avec une probabilité égale qui indique que la moitié des spins est égale à 3 et l'autre moitié est égale à 2 et la phase obtenue est  $(-3/2, 5/2)$ . Ceci est en bon accord avec la figure 5.2a. Un comportement similaire est également observé dans d'autres systèmes tels que  $(1/2, 3/2)$  [34] et dans le système mixte des spins  $(1, 1/2)$  [25].

Pour  $d = 1.29$  et  $1.70$ , on remarque que les aimantations de sous-réseaux commencent avec les valeurs de saturation  $\mathbf{M}_S(t = 0) = 2$  et  $\mathbf{M}_\sigma(t = 0) = -3/2$ , de ce fait  $\mathbf{M}_t(t = 0) = 0.25$ . Le comportement de  $\mathbf{M}_t$  peut changer du type S au type P avec la diminution de  $d$ .



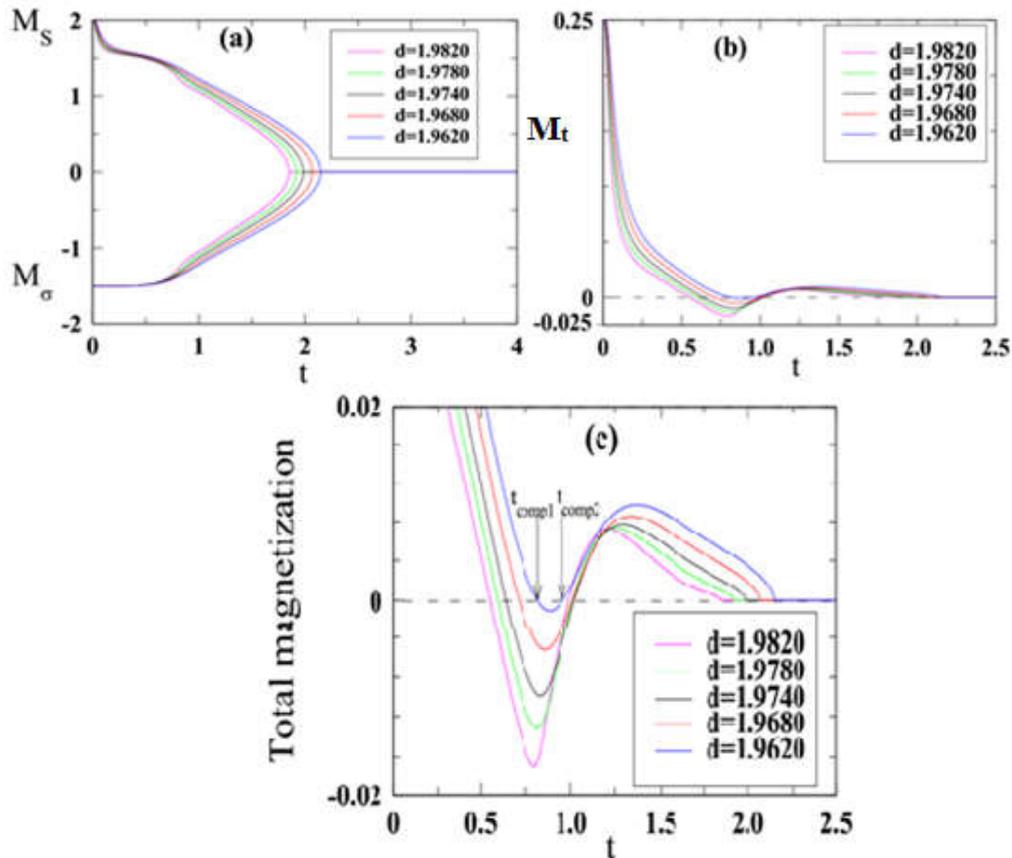
**Figure 5.4.** Variations thermiques des aimantations des sous-réseaux  $M_s$ ,  $M_\sigma$  (a), et de l'aimantation totale  $M_t$  (b) et (c) une vue rapprochée dans la région de  $t$  proche de  $t = 0$  ( $0 \leq t \leq 0.03$ ) pour  $d = 1.950$ , 1.954, 1.958 et 1.960.

Comme noté ci-dessus, lorsque  $d < 1.2$ , le spin de S est dans l'état  $S = 3$  et celui de  $\sigma$  est dans l'état  $\sigma = -3/2$  à  $t = 0$  et donc la saturation des aimantations de sous-réseaux est donnée par  $M_s = 3$  ;  $M_\sigma = -3/2$  et par conséquent  $M_t = 0.75$ . Quand  $1.2 < d < 2.0$ , l'état de spin de S est dans  $S = 3$  et celui de  $\sigma$  est dans l'état  $\sigma = -3/2$  à  $t = 0.0$  et donc la saturation des aimantations de sous-réseaux est donnée par  $M_s = 2$  ;  $M_\sigma = -3/2$  et par conséquent  $M_t = 0.25$ .

Nous notons, comme le montre la figure 5.3, que les valeurs des aimantations totales et sous-titrées à  $t = 0$ , pour différentes valeurs de  $d$ , sont cohérentes avec le diagramme de l'état fondamental de la figure 5.2 (a). On notera que la sélection de ces valeurs correspond aux transitions de phase du second ordre qui vont de la phase ferrimagnétique à la phase paramagnétique, car les aimantations des sous-réseaux vont à zéro en continu à mesure que la température augmente. De plus, les points de transition de phase du second ordre se produisent à des températures plus élevées lorsque  $d$  diminue.

De plus, une variation thermique intéressante de  $M_t$  non prédite dans la théorie de Néel a été obtenue dans la figure 5.3. En particulier, lorsque  $d$  augmente à partir de  $d = 0.0$ , la dépendance thermique de  $M_t$  peut présenter une diminution plutôt rapide de sa valeur de saturation  $M_t(t = 0) = 0.75$  et vice versa, lorsque  $d$  diminue à partir de  $d = 2.0$ , la dépendance

en température de  $\mathbf{M}_t$  peut montrer une augmentation plutôt rapide de sa valeur de saturation  $\mathbf{M}_t(t=0.0) = 0.25$ . Le phénomène est encore amélioré lorsque la valeur de  $d$  approche la valeur critique  $d = 1.2$ .

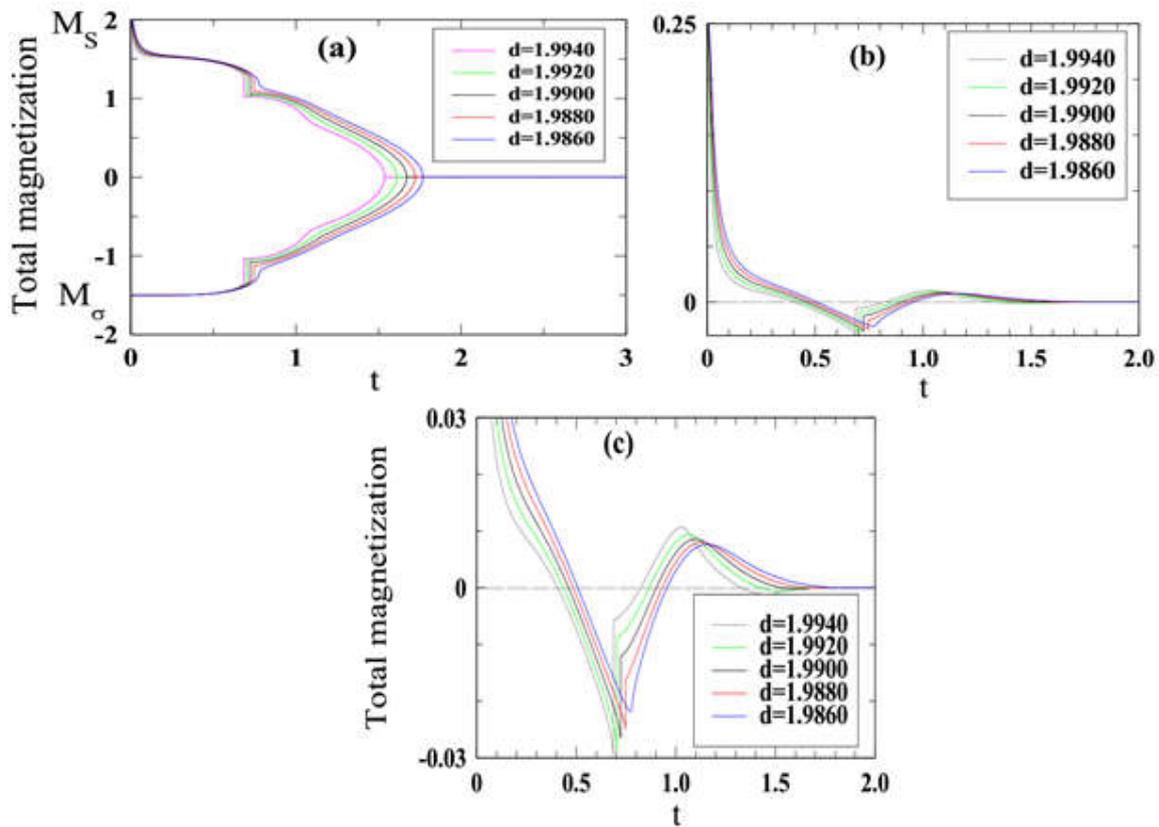


**Figure 5.5.** Variations thermiques des aimantations de sous-réseau  $M_s$ ,  $M_\sigma$  (a), de l'aimantation totale  $M_t$  (b) et (c) une vue rapprochée dans la région de  $t$  proche de  $t = 0$  ( $0 \leq t \leq 0.03$ ) pour  $d = 1.962, 1.968, 1.974, 1.978$  et  $1.982$ .

Sur la figure 5.4, les variations thermiques de  $\mathbf{M}_s$ ,  $\mathbf{M}_\sigma$  (figure 5.4a) et  $\mathbf{M}_t$  (figure 5.4b-c) ont été établies lorsque les valeurs de  $d$  passent de 1.95 à 1.96. Tout d'abord, nous notons que l'aimantation  $\mathbf{M}_t$  part de sa valeur maximale  $\mathbf{M}_t(t=0) = 0.5$  et décroît rapidement jusqu'à une valeur aussi proche que possible de zéro à une température inférieure à la température critique  $t_c$ , à partir de cette valeur, on observe une légère augmentation. Ensuite, la température diminue lentement avant d'atteindre zéro à  $t_c$ . Le comportement de  $\mathbf{M}_t$  est quelque peu similaire au comportement attendu des matériaux magnétiques de type N, que la théorie de Néel a également prédit. Pour  $1,95 \leq d \leq 1,96$ , la figure 5.4a montre que le système subit la transition de phase de second ordre de la phase ferrimagnétique  $(-3/2, 2)$  vers la phase paramagnétique (P), parce que la magnétisation des sous-réseaux diminue continuellement avec l'augmentation de la température des valeurs précédentes vers zéro.

Les variations thermiques des aimantations en sous-réseaux ( $M_S$ ,  $M_\sigma$ ) et du réseau total ( $M_t$ ) avec  $d$  dans la région  $1.962 \leq d \leq 1.92$ , sont illustrées à la figure 5.5. La figure 5.5 (c) montre clairement l'existence de deux points de compensation, ils sont notés par ( $t_{comp1}$  et  $t_{comp2}$ ). En particulier, à  $d = 1.962$ , nous obtenons  $t_{comp1} = 0.75$  et  $t_{comp2} = 0.875$ . Ces phénomènes de compensation présentent le même comportement classé par la théorie de Néel que le type-w [45].

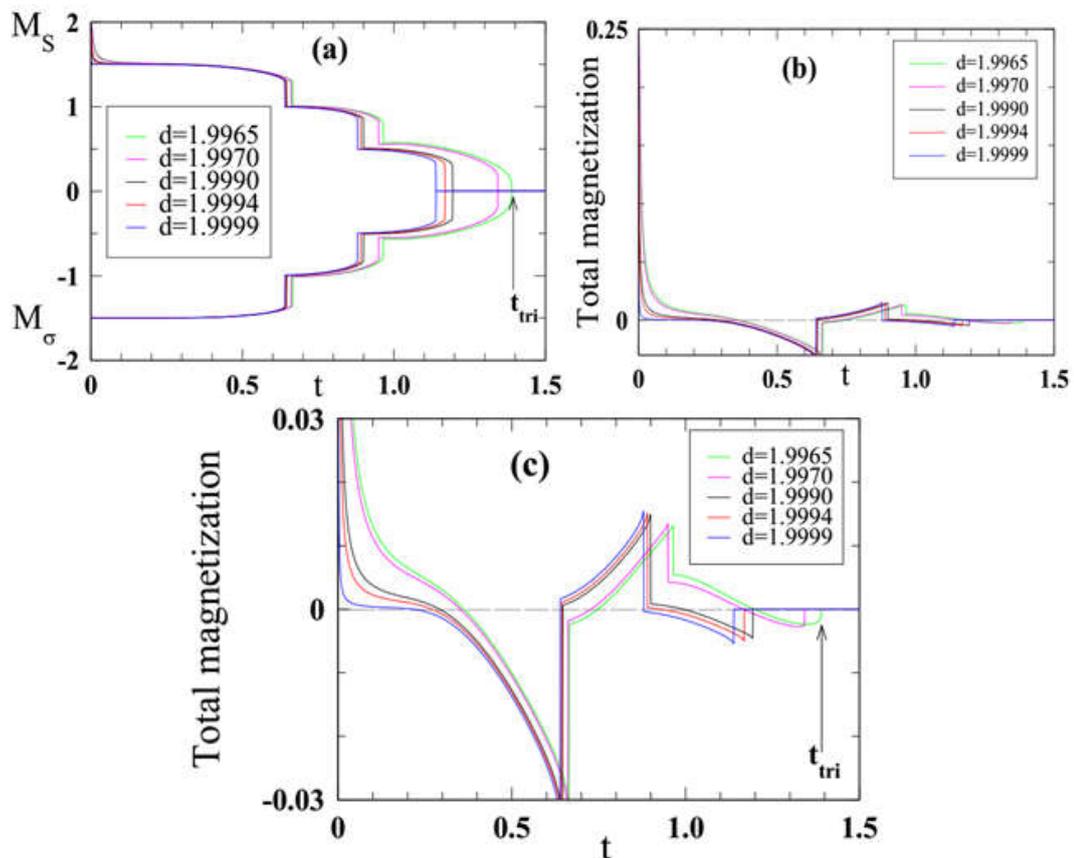
De la même manière que précédemment, sur la figure 5.5 (a), nous observons que les aimantations  $M_\sigma$  et  $M_S$  se dirigent continuellement (sans sauts) vers zéro avec l'augmentation de la température  $t$ ; Par conséquent, le système subit une phase de transition du second ordre de la phase ferrimagnétique  $(-3/2, 2)$  à la phase paramagnétique (P).



**Figure 5.6.** Variations thermiques des aimantations de sous-réseau  $M_S$ ,  $M_\sigma$  (a), de l'aimantation totale  $M_t$  (b) et (c) une vue rapprochée dans la région de  $t$  proche de  $t = 0$  ( $0 \leq t \leq 0.03$ ) pour  $d=1.9940, 1.9920, 1.9900, 1.9880$  et  $1.9860$ .

La figure 5.6 présente les variations thermiques de ( $M_\sigma$ ,  $M_S$ ) (figure 5.6 a) et  $M_t$  (figure 5.6 b-c) lorsque  $d$  varie dans l'intervalle  $1.986 \leq d \leq 1.994$ . Pour  $d = 1.986$ , les aimantations de sous-réseaux vont à zéro en continu lorsque la température réduite augmente, par conséquent, une transition de phase de second ordre se produit à  $t_c$ . Mais à partir de la valeur de 1.986, on remarque que les changements de l'aimantation subissent quelques sauts.

Nous concluons que le système subit deux transitions de phases successives à mesure que la température augmente : la première est une transition de phase du premier ordre, car une discontinuité d'environ 0.2 se produit sur les aimantations de sous-réseaux à une température voisine de  $t_{tr1} = 0.7$ . Ceci indique que les transitions de phase du premier ordre ferrimagnétique-ferrimagnétique se produisent. La seconde est une transition de phase de second ordre de la phase ferrimagnétique à la phase paramagnétique à  $t_c$ . En outre, les propriétés magnétiques des sous-réseaux ont été examinées, dans lesquelles deux points de compensation ont également été trouvés dans la gamme  $1.986 \leq d \leq 1.994$ .



**Figure 5.7.** Variations thermiques des aimantations de sous-réseau  $M_S$ ,  $M_\sigma$  (a), de l'aimantation totale  $M_t$  (b) et (c) une vue rapprochée dans la région de  $t$  proche de  $t = 0$  ( $0 \leq t \leq 0.03$ ) pour  $d=1.9965, 1.9970, 1.9990, 1.9994$  et  $1.9999$ .

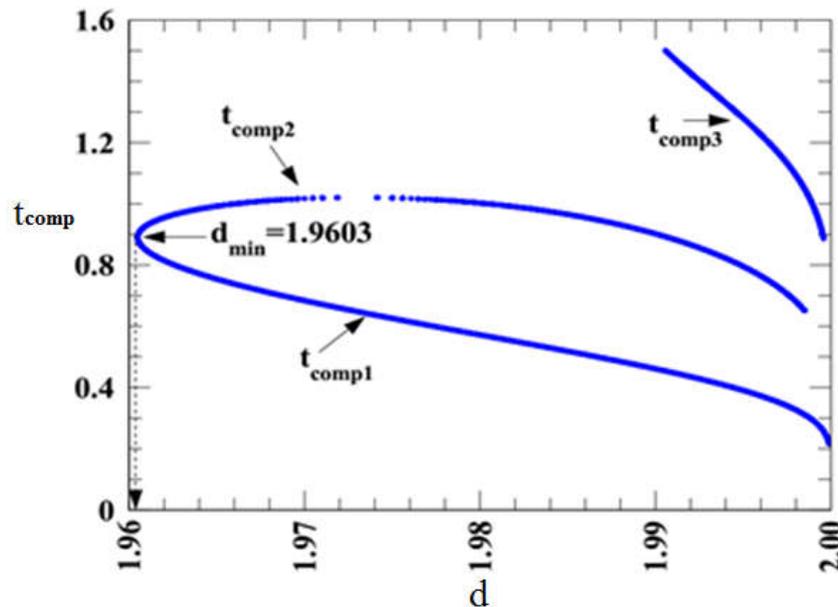
La figure 5.7 est obtenue pour  $1.965 \leq d \leq 1.9999$  (très proche de  $d = 2$ ). Sur cette figure, on peut voir que le système subit trois transitions consécutives avec l'augmentation de la température :

- La première est une transition de phase du premier ordre (ferri-ferri), car une discontinuité d'environ 0.5 se produit sur les aimantations de sous-réseaux, à une température proche de  $t_{tr1} = 0.65$ .

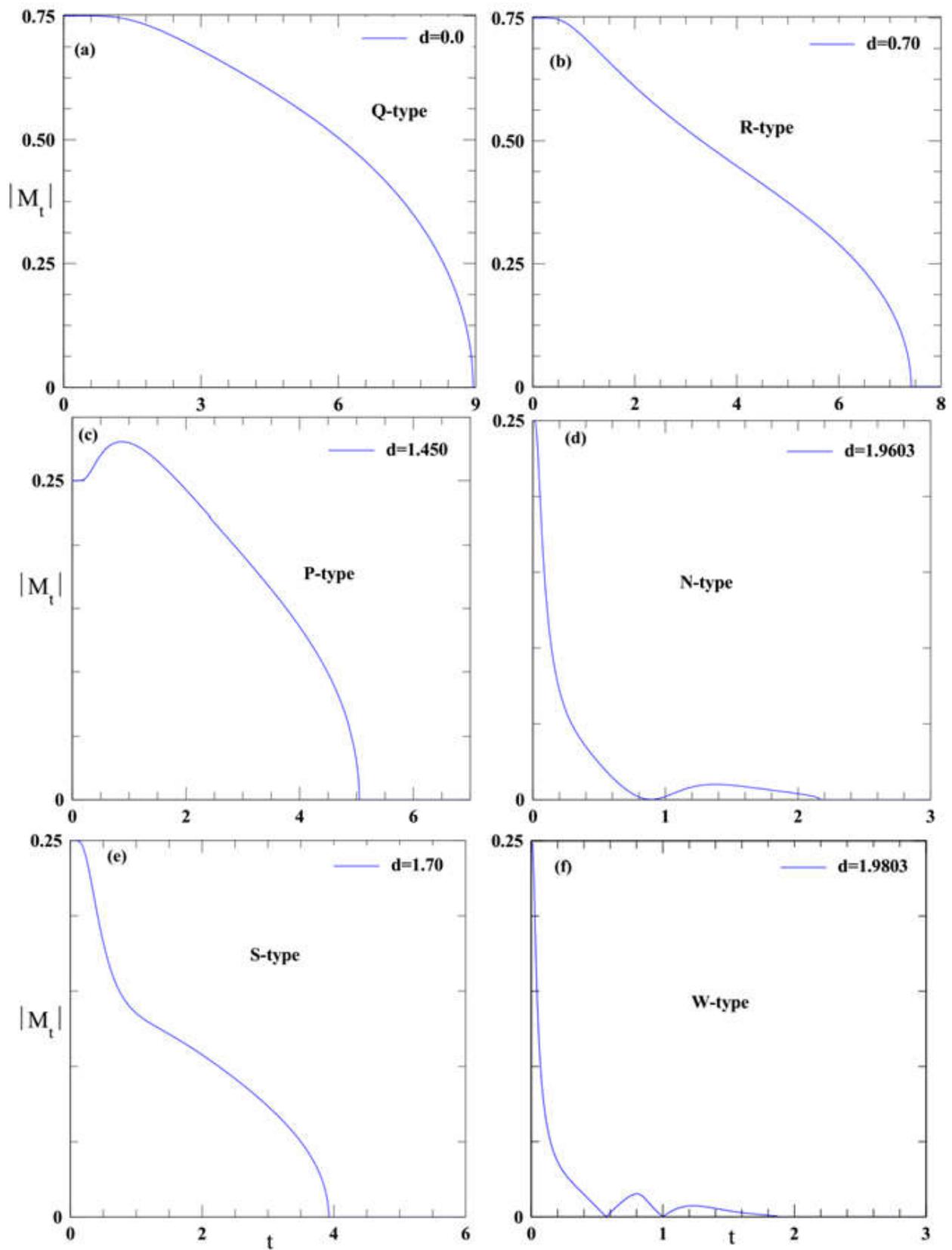
- La seconde est également une transition de phase du premier ordre (ferri-ferri) pour la même cause précédente, où l'on observe un saut d'environ 0,5 dans le magnétisme du sous-réseau, à une température autour de  $t_{\text{r}} = 0.90$ .
- La troisième est la transition de phase du premier ordre de la phase ferrimagnétique à la phase paramagnétique à  $t_{\text{c}}$ . Cependant, pour  $1.965 \leq d \leq 1.9999$ , la transition de phase ferrimagnétique-paramagnétique est du premier ordre seulement.

Nous notons que  $t_{\text{c}}$  diminue quand le paramètre  $d$  est augmenté.

En conclusion, en dessous du champ cristallin  $d = 1.9965$ , le modèle affiche une transition de phase du second ordre de température  $t$  au-dessus de la valeur 1.40 et vice versa. Ce qui veut dire qu'au-dessus du champ cristallin  $d = 1.9965$ , le modèle montre une transition de phase du premier ordre de température  $t$  inférieure à la valeur 1.40. Par conséquent, le système présente un comportement tricritique noté  $t_{\text{tri}}$ , c'est-à-dire le point critique auquel les transitions de phase passent du second au premier ordre. Comme le montre la figure 5.7 c, les coordonnées des points tricritiques sont ( $d_{\text{tri}} = 1.9965$ ,  $t_{\text{tri}} = 1.40$ ).



**Figure 5.8:** Courbe de température de compensation,  $t_{\text{comp}} = k_B T_{\text{comp}} / J$ , dans le plan  $(d, t)$ .



**Figure 5.9.** Nomenclature Néel de l'aimantation totale  $|M_t|$  par rapport à la température réduite  $t = k_B T / J$  pour les valeurs sélectionnées du champ cristallin réduit  $d$ .

De plus, cette figure montre que les spins mixtes du système ferromagnétique d'Ising (3/2, 3) peuvent avoir trois points de compensation différents désignés par :  $t_{\text{comp1}}$ ,  $t_{\text{comp2}}$  et  $t_{\text{comp3}}$ . La courbe étiquetée  $d = 1.9965$  est un exemple d'un tel comportement de  $t_{\text{comp}}$  avec ( $t_{\text{comp1}} = 0.362$ ,  $t_{\text{comp2}} = 0.747$  et  $t_{\text{comp3}} = 1.197$ ). Le comportement de changement de  $t_{\text{comp}}$  avec  $d$  sera discuté en détail dans le plan ( $d, t$ ) de la figure 5.8.

Sur la figure 5.8, nous montrons la température de compensation  $t_{\text{comp}}$  en fonction de  $d$ . A partir de cette figure, on peut observer que le système présente une, deux ou trois températures de compensation. Comme on le voit sur cette figure, pour  $d < 1.9603$  il n'y a pas de point de compensation alors que pour  $1.9603 < d < 1.9902$  il y a deux points de compensation  $t_{\text{comp1}}$  et  $t_{\text{comp2}}$ . De sorte que ces points de compensation n'apparaissent que lorsque  $d$  dépasse une valeur minimale  $d_{\text{min}} = 1.9603$ .

Ce comportement continue jusqu'à ce que la valeur de  $d$  soit égale à 1.9902 à partir de laquelle une température de compensation supplémentaire  $t_{\text{comp3}}$  apparaît dans le système. Nous avons observé que les courbes  $t_{\text{comp1}}$  et  $t_{\text{comp2}}$  émergent de ( $t = 0.9$ ,  $d = 1.9603$ ) où  $t_{\text{comp2}}$  augmente d'abord puis décroît lentement, alors que  $t_{\text{comp1}}$  et  $t_{\text{comp3}}$  diminuent de façon monotone par rapport à  $d$ . On peut également remarquer que les variations de  $t_{\text{comp}}$  par rapport à  $d$  est une fonction continue.

Il convient également de noter ici que la figure 5.8, montre des topologies similaires à celles de la figure 5 de [23] et de la figure 4 sur [48].

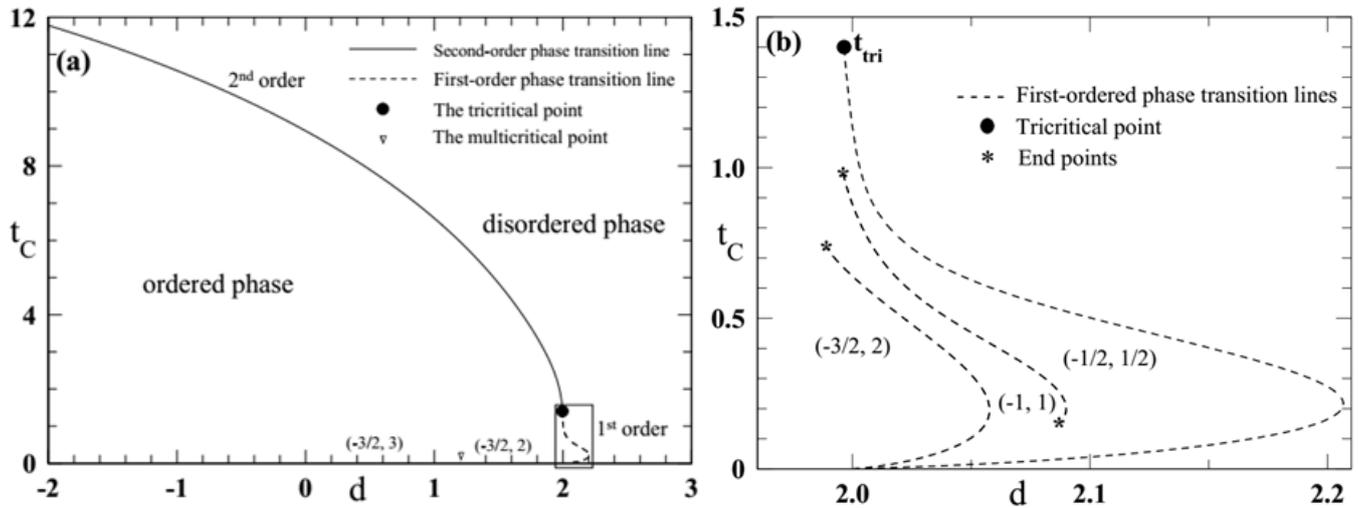
Nous avons tracé sur la figure 5.8 (a-c) les variations thermiques de l'aimantation totale  $|M_t|$  Pour les valeurs sélectionnées de  $d$ . Comme on le voit sur les figures 5.9 (a-f), l'aimantation totale présente les courbes de type Néel Q, R, P, N, S et W, respectivement. En revanche, les courbes de type L et M ne sont pas observées pour ce système.

La courbe de la figure 5.9 d peut présenter un point de compensation, mais les courbes de la figure 5.9 (a, b, c) et de la figure 5.9 e qui sont obtenues pour des champs cristallins égaux respectivement aux valeurs suivantes : 0.0, 0.7, 1.45 et 1.7 ne montrent aucune température de compensation, tandis que la courbe de la figure 5.9 f obtenue à  $d = 1.9803$  peut avoir deux températures de compensation.

### 3.3 Les diagrammes de phase à température finie ( $t > 0$ )

Dans cette sous-section, nous montrerons quelques résultats typiques pour le modèle d'Ising à spins mixtes (3/2, 3) toujours avec des champs cristallins monoatomiques égaux, c'est-

à-dire  $d = d_\sigma = d_s$ . À la suite de l'étude des variations thermiques de l'une ou l'autre des magnétisations des sous-réseaux ou du réseau global, on peut obtenir le diagramme de phase du système d'Ising ferrimagnétique mixte de spin-3/2 et spin-3. Les résultats (ou diagramme de phase) du système sont représentés sur la figure 5.10a-b, dans le plan  $(t_c, d)$ . Dans ce diagramme de phase, les triangles correspondent aux points multicritiques marqués dans le diagramme de phase de l'état fondamental, comme le montre la figure 5.2 (a). Il sépare la phase ferrimagnétique  $(-3/2, 3)$  de la phase ferrimagnétique  $(-3/2, 2)$ .



**Figure 5.10.** Diagrammes de phase dans le plan  $(d, t_c)$ . Les lignes pleines et en pointillés représentent respectivement les lignes de transition de phase du deuxième et du premier ordre. Le cercle plein représente le point tricritique, le triangle correspond au point multicritique. Encart (b), montrant les lignes de transition du premier ordre près de  $d = 2$ . Le grand cercle plein et les étoiles désignent respectivement le point tricritique et les points critiques isolés (end points).

La ligne pleine et pointillée représente les transitions des phases du deuxième et du premier ordre respectivement, le point tricritique est indiqué par un cercle plein.

Évidemment, les lignes de transition de phase du deuxième et du premier ordre séparent les phases ferromagnétiques de la phase magnétique (P), les deux lignes se rejoignant au point tricritique  $(d_{tri}, t_{tri})$ . En tant que tel, nous estimons grossièrement le point tricritique à  $(d_{tri} = 1.9965, t_{tri} = 1.40)$ .

Par conséquent, en dessous de la température tricritique,  $t < 1.40$  ou pour les champs cristallins  $d > 1.9965$ , le système subit une transition de phase du premier ordre, tandis qu'au-dessus de la température  $t = 1.40$  et pour des champs cristallins inférieurs à  $d = 1.9965$ , le modèle ne montre que des transitions de deuxième phase.

De plus, on voit sur la figure 5.10 (c) que pour  $2 < d < 2.208$  et des faibles valeurs de  $t$  lorsque la température augmente, le système passe de la phase P à la phase ferrimagnétique, puis de nouveau à la phase P. Ce phénomène est connu comme un comportement réentrant [12,

**19, 24, 26, 27, 30]**. Il peut être causé par la compétition entre l'interaction d'échange  $J$  et la force de l'anisotropie  $d$ .

Comme cela est montré dans l'encadré de la figure 5.10b, le système présente deux lignes de transition de premier ordre, à basses températures. Les deux lignes émergent de  $(d = 2, t = 0)$  et  $(d = 2.087, t = 0.1503)$ , respectivement, et se terminent par deux points critiques isolés : le premier à  $(d = 1.9891, t = 0.7341)$  et le second situé à  $(d = 1.9961, t = 0.9793)$ . Les deux droites séparent les phases  $(\mathbf{M}_\sigma = -3/2, \mathbf{M}_s = 3/2)$  et  $(\mathbf{M}_\sigma = -1, \mathbf{M}_s = 1)$ , et les phases  $(\mathbf{M}_\sigma = -1, \mathbf{M}_s = 1)$  et  $(\mathbf{M}_\sigma = -1/2, \mathbf{M}_s = 1/2)$ , respectivement. Cette transition supplémentaire des lignes de premier ordre qui apparaît entre  $d = 1.991$  et  $d = 2.087$  est due à l'excitation thermique sur le réseau et on peut voir que le système a un point triphasé en  $(t = 0, d = 2)$ . Enfin, nous mentionnons également que nous observons un diagramme de phase sur la figure 5.10 (a) très similaire à celui des études précédentes des systèmes d'Ising à spins mixtes à titre d'exemple :  $(1/2, 1)$  [7,8],  $(1/2, 3/2)$  [12],  $(1, 3/2)$  [13] et  $(1, 2)$  [14]. De plus, des diagrammes de phase très similaires aux figure 5.2 (c) -5.2(f) ont également été découverts dans d'autres modèles de spins mixtes tels que  $(1/2, 1)$  [8],  $(1/2, 3/2)$  [12]. Les figures 5.2 (b) et 5.2(g) sont de nouveaux diagrammes de phase qui n'ont pas été obtenus dans les études précédentes des systèmes d'Ising de spins mixtes [8, 9, 12-14].

## 4 Conclusions

En utilisant l'approximation du champ moyen, nous avons étudié les propriétés critiques et magnétiques du système d'Ising ferrimagnétique de spins mixtes spin-3/2 et spin-3 sur deux sous réseaux carré interpénétrant, avec une anisotropie mono-ion uniforme sur tout le réseau.

Nos résultats ont révélé de nombreux phénomènes intéressants. En particulier, le diagramme de phase dans le plan  $(\Delta / J, k_B T / J)$  tel que montré sur la figure 5.10 présente un point tricritique, à savoir  $(\Delta / J = 1.99965, k_B T / J = 1.40)$ . Des lignes de transition de phase du premier ordre supplémentaires dans la phase ordonnée séparent les phases ferrimagnétiques  $\{(-3/2, 2), (-1, 1)$  et  $(-1/2, 1/2)\}$ . Ces lignes de transition se terminent par des points critiques isolés. D'autre part, cette étude a montré que le système a trois températures compensatoires dans certaines conditions par rapport au champ cristallin  $\Delta$  et à l'interaction d'échange  $J$ . Ceci malgré le fait que nous ne prenons en compte que l'interaction des plus proches voisins et l'anisotropie uniforme des ions uniques dans l'Hamiltonien. Par ailleurs, de nouveaux types de courbes d'aimantation non prédites dans la théorie de Néel du ferrimagnétisme sont obtenus.

## *Références*

- [1] M. Azhari, N. Benayad, M. Mouhib, *Superlattices and Microstructures* 79 (2015) 96.
- [2] L.W. Jie, X.Z. Hua, C.S. Lun and Z.C. Yan, *Chin. Phys. B* 22 (2013) 027501.
- [3] B. Deviren, Y. Polat, M. Keskin, *Chin. Phys. B* 20 (2011) 060507.
- [4] M. Ertaş, *Superlattices and microstructures* 85 (2015) 734.
- [5] B. Deviren, M. Batı and M. Keskin, *Phys. Scr.* 79 (2009) 065006.
- [6] Han-Ping D. Shieh and Mark H. Kryder, *Appl. Phys. Lett.* 49 (1986) 473-474.
- [7] M. Mansuripur, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 1580.
- [8] MladenBarbic, *J. of Magnetism and Magnetic Materials* 249 (2002) 357–367.
- [9] D. L. Polla, *Microelec. Eng.* 29 (1995) 51.
- [10] G. Teowee, J. T. Simpson, T. J. Zhao, M. Mansuripur, J. M. Boulton, D. R. Uhlmann, *Microelec. Eng.* 29 (1995) 327.
- [11] H. Achard, H. Mace, L. Peccoud, *Microelec. Eng.* 29 (1995)19.
- [12] Octavio D. Rodriguez Salmon, José Ricardo de Sousa, Minos A. Neto, Igor T. Padilha, J. Roberto VianaAzevedo, Francisco DinólaNeto, *Physica A* 464 (2016) 103–114.
- [13] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, D. Peñá Lara and J. A. Plascak *Physica Review B* 57, Number 18 (1998)11 575-11 581.
- [14] A. Bakchich and M. El Bouziani, *J. Phys.: Condens. Matter* 13 (2001) 91–99.
- [15] J. A. Plascak and D. P. Landau, *Physica Review E* 67 (2003) 015103-015106.
- [16] O. Ozsoy, E. Albayraka, Mustafa Keskin, *Physica A* 304 (2002) 443–460.
- [17] R. Boudefla, S. Bekhechi, F. Hontinfinde, *Condensed Matter Physics* 18(2015) 33703–33703.
- [18] W. G. Zhu, M. H. Ling, *Commun Theor Phys.* 51(2009)756-760.
- [19] A. Bobák and F. O. Abubrig, *Physical Review B* 68 (2003)224405.
- [20] A. Bobák and J. Dely, *J. of Magnetism and Magnetic Materials* 310 (2007) 1419–1421.
- [21] I.J. Souza, P.H.Z. de Arruda, M. Godoy, L. Craco, A.S. de Arruda, *PhysicaA* 444 (2016) 589–600.
- [22] F. Abubrig, A. Elgwel, *J. of Humanities and Applied Science (JHAS)* Issue No. 27 (2015) 14-27.
- [23] F. Abubrig, *Open J. of Applied Sciences* 3 (2013) 218-223.
- [24] O.F. Abubrig, D. Horváth, A. Bobák, M. Jaščur, *Physica A* 296 (2001) 437–450.
- [25] L. Bahmad, M.R. Benayad, A. Benyoussef and A. El Kenz, *ActaPhysicaPolonica A* 119 (2011) 740-746.
- [26] K. M. Hadey, *International Letters of Chemistry, Physics and Astronomy* 57 (2015) 114-121.
- [27] Hailing Miao, Guozhu Wei, JiajiaGeng, *J. of Magnetism and Magnetic Materials* 321 (2009) 4139–4144.
- [28] M. Madani, A. Gaye, M. El Bouziani, A. Alrajhi, *Physica A* 437 (2015) 396–404.
- [29] M. Bourass, A. Zradba. S. Zouhair, A. El Antari, M. El Bouziani, M. Madani, A. Alrajhi

- 2017 J. Supercond. Nov. Magn. DOI: 10.1007/s10948-017-4242-y.
- [30] B. Deviren, E. Kantar, M. Keskin, J. of the Korean Physical Society 56, No. 6(2010) 1738-1747.
- [31] Deviren B, Polat Y, Keskin M., Chin Phys B. 20 (2011) 060507.
- [32] Y. Belmamoun and M. Kerouad, Chinese J. of Physics 47 (2009) 100-113.
- [33] A. Bobák, Physica A 286 (2000) 531-540.
- [34] T Kaneyoshi, M. Jaščur and Tomczak, J. Phys. Condens. Matter.4 (1992) L653-L658.
- [35] A. Bobák, Physica A 258 (1998) 140-156.
- [36] M. Aouzi and M. El Hafidi, M. J. Condensed Matter, 5(2004) 10-21.
- [37] A. Bobák, Abubrig OF, Horvath D., J. Magn. Magn Mater. 246 (2002)177-183.
- [38] Y. Nakamura, J. W. Tucker, Ieee Trans. Magn. 38 (2002) 2406-2408.
- [39] A. Zaim, M. Kerouad, Phys A. 389(2010)3435-3442.
- [40] J.D. Alzate-Cardona, M.C. Barrero-Moreno and E. Restrepo-Parra, J Phys Condens Matter. 44 (2017)445801
- [41] Jiang-lin Bi, Wei Wang, Qi Li, Superlattices and Microstructures, 107(2017)104-117
- [42] N. De La Espriella Velez, J. Madera Yancez, M. S. Páez Mesa, Revista Mexicana de Física 60 (2014) 419-424.
- [43] Y. Guo, G.-F. Xu, C. Wang, T.-T. Cao, J. Tang, Z.-Q. Liu, Y. Ma, S.-P. Yan, P. Cheng, D.-Z. Liao, Dalton Trans. 41 (2011) 1624.
- [44] A. Ozkan, B. Kutlu, J. of Magn. and Magn. Mat. 425, (2017) 78.
- [45] H. Falk, Am. J. Phys. 38 (1970) 858.
- [46] GM. Buendia, MA. Novotny, J Phys Condens Matter. 9 1997, 5951-5964.
- [47] Guo, G.-F. Xu, C. Wang, T.-T. Cao, J. Tang, Z.-Q. Liu, Y. Ma, S.-P. Yan, P. Cheng, D.-Z. Liao, Dalton Trans. 41 (2011) 1624.
- [48] F. Hulliguer, M. Landolt, H. Vetsch, J. Solid State Chem. 18 (1976) 283.
- [49] Y.-Z. Zhang, G.-P. Duan, O. Sato, S. Gao, J. Mater. Chem. 16 (2006) 2625.
- [50] H. Zhou, A.-H. Yuan, S.-Y. Qian, Y. Song, G.-W. Diao, Inorg. Chem. 49 (2010) 5971.
- [51] T. Hozumi, S.-I. Ohkoshi, Y. Arimoto, H. Seino, Y. Mizobe, K. Hashimoto, J. Phys. Chem. B 107 (2003) 11571.
- [52] H. Svendsen, J. Overgaard, M. Chevallier, E. Collet, Y.-S. Chen, F. Jensen, B.B. Iversen, Chem. Eur. J. 16 (2010) 7215.
- [53] S.-I. Ohkoshi, K.-I. Arai, Y. Sato, K. Hashimoto, Nat. Mater. 3 (2004) 857.

---

## *Conclusion générale*

---

Dans cette thèse, nous avons étudié deux systèmes d'Ising à spins mixtes (1/2, 2) et (3/2, 3) sur un réseau divisé en deux sous-réseaux interpénétrants. Le sous-réseau **A** avec des spins  $S_A$  et  $S_B$  pour le sous-réseau **B**. l'objectif étant de dévoiler le comportement magnétique des matériaux en fonction de divers paramètres (interne et externe). Afin d'y parvenir, Nous avons utilisé trois méthodes spécifiques dont la simulation de Monte Carlo, la théorie du champ moyen et le groupe de renormalisation. Pour ce fait, nous présentons en détail, ces méthodes ainsi que l'origine du magnétisme dans différents matériaux, leurs comportements en fonction de l'évolution des paramètres.

En premier lieu, nous avons examiné le système d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes (1/2, 2) aux sites d'un réseau carré. Cette étude a été menée dans le cadre de l'approximation du champ moyen, en utilisant le principe variationnel sous l'effet d'un champ cristallin aléatoire ( $\Delta_j$ ) d'ions uniques aux sites de spin  $S = 2$ . Le champ cristallin aléatoire  $\Delta_j$  est réparti selon la distribution de probabilité bimodale :  $p(\Delta_j) = \frac{1}{2} [\delta(\Delta_j - \Delta(1+\alpha)) + \delta(\Delta_j - \Delta(1-\alpha))]$ , où  $\alpha$  est une constante positive, la moitié des sites de ce réseau est soumise à un champ cristallin  $\Delta(1+\alpha)$  alors que le reste a pour champ cristallin  $\Delta(1-\alpha)$ . L'introduction de ce type de loi de probabilités nous a permis de mener une étude plus générale. En effet, selon les valeurs du paramètre  $\alpha$ , nous avons trouvé plusieurs cas particuliers, ce qui permet une étude explicite de l'influence de la forme de la loi de probabilité sur le comportement critique du système. Ainsi, les différents comportements thermiques de l'aimantation sont illustrés. En particulier, on voit apparaître un ou deux points de compensation. Les résultats de cette étude indiquent que la température de compensation des systèmes de spins ferrimagnétiques réels peut être ajustée en changeant le paramètre  $\alpha$ , afin d'obtenir la température de compensation souhaitée. En outre, de nombreux types de diagrammes de phases avec des lignes de transition de phases du premier et du second ordre, ainsi que des points critiques isolés et tricritiques.

D'autre part, dans une seconde étude, nous avons utilisé la méthode du Groupe Renormalisation pour examiner ce système et donner les diagrammes de phases dans les plans  $(J, \Delta)$  et  $(1/J, \Delta/J)$ . Le flot dans l'espace des paramètres de l'hamiltonien et les fonctions thermodynamiques sont déterminés. En effectuant une recherche très minutieuse, nous n'avons trouvé que des transitions de deuxième ordre. Par conséquent, cette étude révèle qu'il n'y a pas de point triple critique dans le diagramme de phases du modèle.

Dans la troisième étude, nous avons effectué des simulations de Monte Carlo, afin d'examiner ce système sur un réseau en nid d'abeilles. Nous avons fait une étude analytique qui nous a permis d'avoir les énergies des différentes configurations. D'un autre côté, nous avons mené une étude numérique qui nous a montré les phases les plus stables que nous avons

présentés dans le diagramme de phases. Nous avons montré qu'il ne présente que des lignes de transition de phases de second ordre. De ce fait, le point tricritique n'existe pas. En outre, nous avons constaté que le système ne pouvait pas afficher de point de compensation avec les interactions les plus proches voisines et l'effet du champ cristallin.

Dans chacune des études précédentes, nous avons également établi le diagramme de l'état fondamental du système en fonction des paramètres du modèle.

Enfin, dans le cadre de la théorie du champ moyen, nous avons étudié les propriétés critiques et de compensation du système d'Ising ferrimagnétique mixte (3/2 ; 3) avec une anisotropie mono-ionique uniforme sur un réseau carré.

Nos résultats ont révélé de nombreux phénomènes intéressants. En particulier, nous trouvons que le présent système peut présenter la possibilité des trois points de compensation induits par le champ de cristallin dans une région très étroite  $1.96 < d < 2$ , ainsi que les différentes courbes de dépendances thermiques d'aimantation habituellement observées dans les alliages. Ainsi, le présent système peut présenter des nouveaux types de courbe d'aimantation.

Outre les transitions de second ordre, on trouve des lignes de transitions de premier ordre se terminant soit en un point tricritique, soit en un point critique isolé.

En guise de conclusion, disons que le système de spin ferrimagnétique mixte à deux sous-réseaux avec une interaction cristal-champ peut être un système simple mais fructueux du point de vue de la science des matériaux.

Effectivement, le système ferrimagnétique mixte d'Ising spin-3/2 et de spin-3 avec différentes anisotropies mono-ioniques (c'est-à-dire  $\Delta_\sigma \neq \Delta_s$ ) peut avoir de riches variétés de transitions de phases. C'est notre objectif comme perspective de l'après cette thèse.

Enfin, nous espérons que nos recherches théoriques détaillées pourraient stimuler d'autres études théoriques ou expérimentales sur les systèmes ferri-ferromagnétiques à spins élevés.

L'ensemble de ce travail de thèse a déjà fait l'objet d'un certain nombre de publications :

1- [Monte Carlo Study of the Mixed-Spin \(1/2, 2\) Ferrimagnetic Ising System on a Honeycomb Lattice.](#)

**H. Zahir**, T. Bahlagui, A. El Kenz, M. El Bouziani, A. Benyoussef, A. Hasnaoui, K. Sbiaai, J. Supercond. Nov. Magn. (2018). DOI: <https://doi.org/10.1007/s10948-018-4768-7>.

Received: 22 May 2018 / Accepted: 31 May 2018.

2- [Mixed Spin-1/2 and Spin-5/2 Model by Renormalization Group Theory: Recursion Equations and Thermodynamic Study.](#)

- A. El Antari, **H. Zahir**, A. Hasnaoui, N. Hachem, A. Alrajhi, M. Madani, M. El Bouziani, Int. J. Theor. Phys. (2018). DOI: <https://doi.org/10.1007/s10773-018-3756-9>.
- 3-** Random crystal-field effects in a mixed spin-1/2 and spin-2 ferrimagnetic Ising system.  
**H. Zahir**, A. Hasnaoui, K. Sbiaai, A. Lafhal, N. Hachem, A. Alrajhi, M. Madani, M. El Bouziani, Chinese Journal of Physics (2018), doi: <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2018.09.008>.
- 4-** [The Spin-2 Blume-Capel model by Position Space Renormalization Group](#).  
N. Hachem, A. Lafhal, **H. Zahir**, M. El Bouziani, M. Madani, A. Alrajhi, Superlattices and Microstructures (2017), DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2017.07.057>.
- 5-** Finite Temperature Phase Diagrams of the Mixed Spin-1 and Spin-2 Blume–Capel Model by Renormalization Group Approach.  
A. Lafhal, N. Hachem, **H. Zahir**, M. El Bouziani, M. Madani, A. Alrajhi, Journal of Statistical Physics, Janvier 2019, Volume 174, Numéro 1, pp 40–55, DOI: <https://doi.org/10.1007/s10955-018-2172-0>.
- 6-** Phase Diagrams of the Ferrimagnetic Mixed Spin-1/2 and Spin-5/2 Ising Model under a Longitudinal Magnetic Field.  
N. Hachem, M. Alehyane, A. Lafhal, **H. Zahir**, M. Madani, A. Alrajhi and M. El Bouziani, Publié le 23 janvier 2019, [Physica Scripta](#), Volume 94, Numéro 2, DOI : <https://doi.org/10.1088/1402-4896/aaf53e>.
- 7-** [Phase Diagrams of Ising Mixed Integer Spins with Random Anisotropy](#).  
A. Lafhal, N. Hachem, **H. Zahir**, M. El Bouziani, M. Madani, A. Alrajhi, Journal of **Advanced Physics**, Vol. 7, pp 1-9, 2018.
- 8-** **H. Zahir**, A. Hasnaoui, R. Aharrouch, M. Madani, A. Lafhal, N. Hachem, M. El Bouziani : ["Effets de dimensionnalité sur le modèle mixte de Blume-Capel spin-1/2 et spin-2"](#). Soumission à International Journal of Theoretical Physics (IJTP) 2021.

## Annexe A

### • Les équations de récurrence Migdal-Kadanoff (équations 3.8) :

Tout d'abord, nous remplaçons l'expression par la formule (3.4) sur le premier côté de l'équation (3.6) avec  $\sigma_1 = \{\pm 1/2\}$  et  $S_2 = \{0, \pm 1 \text{ et } \pm 2\}$ , ce qui nous donne dix formes. Mais étant donné que les cas  $(\sigma_1, S_2)$  et  $(-\sigma_1, -S_2)$  sont équivalents, nous n'obtenons que cinq formes différentes  $F_{\sigma_1, S_2}$  :

- Pour  $(\sigma_1, S_2) = \{(1/2, 2); (-1/2, -2)\}$

$$F_{\frac{1}{2}, 2} = F_{\frac{-1}{2}, -2} = 2e^{\frac{12\Delta}{z} + 48\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{J+4C} \operatorname{ch}(2J+8C) + e^{-J-4C} \right] \\ + 2e^{\frac{6\Delta}{z} + 18\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{-\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{4\Delta}{z} + 16\frac{\Delta_4}{z}} \operatorname{ch}(J+4C) \quad (3.10)$$

- Pour  $(\sigma_1, S_2) = \{(-1/2, 2); (1/2, -2)\}$

$$F_{\frac{-1}{2}, 2} = F_{\frac{1}{2}, -2} = 2e^{\frac{12\Delta}{z} + 48\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{-J-4C} \operatorname{ch}(2J+8C) + e^{J+4C} \right] \\ + 2e^{\frac{6\Delta}{z} + 18\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{-\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{4\Delta}{z} + 16\frac{\Delta_4}{z}} \operatorname{ch}(J+4C) \quad (3.11)$$

- Pour  $(\sigma_1, S_2) = \{(1/2, 1); (-1/2, -1)\}$

$$F_{\frac{1}{2}, 1} = F_{\frac{-1}{2}, -1} = 2e^{\frac{9\Delta}{z} + 33\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{J+4C} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{-J-4C} \operatorname{ch}\left(\frac{J+7C}{2}\right) \right] \\ + 2e^{\frac{3\Delta}{z} + 3\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}(J+C) + e^{-\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{\Delta}{z} + \frac{\Delta_4}{z}} \operatorname{ch}\left(\frac{J+C}{2}\right) \quad (3.12)$$

- Pour  $(\sigma_1, S_2) = \{(-1/2, 1); (1/2, -1)\}$

$$F_{\frac{-1}{2}, 1} = F_{\frac{1}{2}, -1} = 2e^{\frac{9\Delta}{z} + 33\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{-J-4C} \operatorname{ch}\left(\frac{3J+9C}{2}\right) + e^{J+4C} \operatorname{ch}\left(\frac{J+7C}{2}\right) \right] \\ + 2e^{\frac{3\Delta}{z} + 3\frac{\Delta_4}{z}} \left[ e^{-\frac{J+C}{2}} \operatorname{ch}(J+C) + e^{\frac{J+C}{2}} \right] + 2e^{\frac{\Delta}{z} + \frac{\Delta_4}{z}} \operatorname{ch}\left(\frac{J+C}{2}\right) \quad (3.13)$$

- Pour  $(\sigma_1, S_2) = \{(1/2, 0); (-1/2, 0)\}$

$$F_{\frac{1}{2},0} = F_{-\frac{1}{2},0} = A_0 = 4e^{\frac{8\Delta+32\Delta_4}{z}} ch^2 (J+4C) + 4e^{\frac{2\Delta+2\Delta_4}{z}} ch^2 \left( \frac{J+C}{2} \right) + 2 \quad (3.14)$$

Donc, selon l'équation 6, nous obtenons un système de six équations qui nous donne les interactions après la décimation (Eq.7). En déplaçant les potentiels, nous avons obtenu les interactions renormalisées (Eqs. 8).

## ***Annexe B***

### **• Les sous-espaces invariant $J=C=0$ :**

Lorsque  $J = C=0$ , et à partir des relations (3.10-3.13) nous concluons ce qui suit :

$$F_{\frac{1}{2},2} = F_{-\frac{1}{2},2} \quad \text{et} \quad F_{\frac{1}{2},1} = F_{-\frac{1}{2},1}$$

$$\text{Ce qui nous donne} \quad F_{\frac{1}{2},2} / F_{-\frac{1}{2},2} = F_{\frac{1}{2},1} / F_{-\frac{1}{2},1} = 1$$

D'où

$$\ln \left( F_{\frac{1}{2},2} / F_{-\frac{1}{2},2} \right) = \ln \left( F_{\frac{1}{2},1} / F_{-\frac{1}{2},1} \right) = 0 \quad (3.15)$$

Nous avons donc obtenu :

$$J'=C'=0 \quad (3.16)$$

Enfin, nous voyons que le sous-espace  $J = C = 0$  est invariant par la transformation du groupe (Equation 3.8). Les équations de récurrence dans ce sous-espace sont écrites comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta' = b^{d-1} \Delta \\ \text{et} \\ \Delta_4' = b^{d-1} \Delta_4 \end{array} \right. \quad (3.17)$$

Les équations de récurrence (3.17) indiquent que toute valeur positive de  $\Delta$  amène le système à  $\Delta' = +\infty$ , mais toute valeur négative  $\Delta$  amène le système à  $\Delta' = -\infty$ . On peut aussi suivre le même raisonnement pour  $\Delta_4$ . Cela nous donne les quatre points fixes suivants :  $(0, 0, +\infty, -\infty)$ ,  $(0, 0, -\infty, -\infty)$ ,  $(0, 0, +\infty, +\infty)$  et  $(0, 0, -\infty, +\infty)$ . De plus, pour  $\Delta = 0$  est ramené  $\Delta' = 0$  également, et aussi  $\Delta_4 = 0$  conduit également à  $\Delta_4' = 0$ ; nous obtenons donc les cinq points

fixes:  $(0, 0, 0, +\infty)$ ,  $(0, 0, 0, -\infty)$ ,  $(0, 0, +\infty, 0)$ ,  $(0, 0, -\infty, 0)$  et  $(0, 0, 0, 0)$ . Enfin, nous concluons que les équations (3.17) nous donnent neuf points fixes triviaux.

- **Le point fixe  $C^*$**

Au point fixe  $C^*$ , nous avons les relations suivantes entre les interactions :  $J = -7 C$ ,  $\Delta = +\infty$  et  $\Delta_4 = -\infty$ , avec  $|\Delta| \gg |\Delta_4|$ . D'où:

$$F_{\frac{1}{2},2} = A_0 \cdot \exp\left(\tilde{x} + 4 \frac{\tilde{\Delta}}{z}\right) = \exp(x) \cdot \cosh(2x) + \exp(-x) \quad (3.18)$$

$$F_{-\frac{1}{2},2} = A_0 \cdot \exp\left(-\tilde{x} + 4 \frac{\tilde{\Delta}}{z}\right) = \exp(-x) \cdot \cosh(2x) + \exp(x) \quad (3.19)$$

où  $\tilde{x} = \frac{3\tilde{J}}{7}$  et  $x = \frac{3J}{7}$ ,

La division de (3.18) par (3.19) nous donne :

$$\exp(2\tilde{x}) = \frac{\exp(x) \cdot \cosh(2x) + \exp(x)}{\exp(-x) \cdot \cosh(2x) + \exp(x)} \quad (3.20)$$

- Pour  $d=2$ :

L'interaction renormalisée ( $x' = b^{d-1} \cdot \tilde{x}$ ) devient ( $x' = 3 \cdot \tilde{x}$ ), et l'équation (3.20) s'écrit comme suit:

$$\exp\left(\frac{2}{3} x'\right) = \exp(2x) \cdot \frac{3 + \exp(4x)}{1 + 3 \cdot \exp(4x)} \quad (3.21)$$

Puisque au point fixe  $x'=x$ , on a:

$$\exp\left(\frac{4}{3} x\right) = \frac{1 + 3 \exp(4x)}{3 + \exp(4x)} \quad (3.22)$$

On pose  $y = \exp\left(\frac{4}{3} x\right)$ , ainsi, l'équation (3.22) devient :

$$y^4 - 3y^3 + 3y - 1 = 0 \quad (3.23)$$

L'équation (3.23) nous donne quatre solutions:  $y = \pm 1$  et  $\frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}$ , mais puisque  $y > 0$ , les solutions acceptées sont :  $y = 1$  et  $\frac{3 + \sqrt{5}}{2}$ , et en utilisant les relations entre  $y$ ,  $x$  et  $J$ , nous avons trouvé  $J = 0$  et  $\frac{7}{4} \ln \left( \frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right)$ . Enfin, il est clair que les coordonnées du point  $C^*$  sont :  $\left( \frac{7}{4} \ln \left[ \frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right], -\frac{1}{4} \ln \left[ \frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right], +\infty, -\infty \right)$  ou **(1.6842, -0.2406,  $+\infty$ ,  $-\infty$ )** représentant la transition ferromagnétique-paramagnétique du second ordre. Cependant, les points qui ont les coordonnées suivantes :  $\left( \frac{7}{4} \ln \left[ \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \right], -\frac{1}{4} \ln \left[ \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \right], +\infty, -\infty \right)$  où **(-1.6842, 0.2406,  $+\infty$ ,  $-\infty$ )** décrivent la transition antiferromagnétique-paramagnétique de second ordre.

- Pour  $d = 3$ :

L'interaction renormalisée ( $x' = b^{d-1} \cdot \tilde{x}$ ) devient ( $x' = 9 \cdot \tilde{x}$ ), En suivant les mêmes étapes qu'en  $d=2$ , l'équation (3.20) s'écrit sous la forme:

$$\exp\left(\frac{32}{9}x\right) = \frac{1 + 3\exp(8x)}{3 + \exp(8x)} \quad (3.24)$$

L'équation (3.24) nous donne trois solutions :  $x = \pm 0.17709560$  et  $0$ , et puisque nous savons que  $x = 3J / 7 > 0$ , la valeur de  $x$  qui correspond à  $C^*$  est **0.17709560** et donc les coordonnées du point  $C^*$  sont : **(0.4132, -0.0590,  $+\infty$ ,  $-\infty$ )** représentant la transition ferromagnétique-paramagnétique du second ordre. Concernant la solution négative de  $x$ , elle correspond à une transition antiferromagnétique-paramagnétique de second ordre ; les coordonnées de  $C^*$  dans ce cas sont : **(-0.4132, 0.0590,  $+\infty$ ,  $-\infty$ )**.

