

THESE

En vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

Structure de Recherche : Physique des Hautes Energies – Modélisation et Simulation

Discipline : Physique

Spécialité : Physique des nouveaux Matériaux- Modélisation et Simulation

Présentée et soutenue le 20/04/2019 par :

Saâdia SABRI

INFLUENCE DU CHAMP CRISTALLIN SUR LES
SYSTEMES MAGNETIQUES MIXTES : ETUDE STATIQUE ET DYNAMIQUE

JURY

Hamid EZ-ZAHRAOUY	PES	Faculté des sciences de Rabat	Président
Abdellah EL KENZ	PES	Faculté des sciences de Rabat	Encadrant de thèse
Abdelilah BENYOUSSEF	PES	Académie Hassan II des Sciences Techniques	Rapporteur
Mohammed ELBOUZIANI	PES	Faculté des Sciences d'El Jadida	Rapporteur
Mourad EL YADARI	PH	Ecole Supérieure de Technologie Meknès	Examineur

THESE

En vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

Structure de Recherche : Physique des Hautes Energies – Modélisation et Simulation

Discipline : Physique

Spécialité : Physique des nouveaux Matériaux- Modélisation et Simulation

Présentée et soutenue le 20/04/2019 par :

Saâdia SABRI

INFLUENCE DU CHAMP CRISTALLIN SUR LES
SYSTEMES MAGNETIQUES MIXTES : ETUDE STATIQUE ET DYNAMIQUE

JURY

Hamid EZ-ZAHRAOUY	PES	Faculté des sciences de Rabat	Président
Abdellah EL KENZ	PES	Faculté des sciences de Rabat	Encadrant de thèse
Abdelilah BENYOUSSEF	PES	Académie Hassan II des Sciences Techniques	Rapporteur
Mohammed ELBOUZIANI	PES	Faculté des Sciences d'El Jadida	Rapporteur
Mourad EL YADARI	PH	Ecole Supérieure de Technologie Meknès	Examineur

Dédicaces

A mes très chers parents

A mon mari

A mes enfants Yassir, Assaad et Arwa

A mes frères et sœurs

A la mémoire de mon beau père

A ma belle mère

A tous mes proches

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires(LaMCS*c*). Sous la direction du Professeur **Abdallah EL KENZ**.

J'espère que Monsieur **Abdallah EL KENZ**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, trouvera ici l'expression de ma profonde gratitude pour la gentillesse qu'il m'a accordée pour diriger ce travail de recherche et pour ses encouragements dans les moments difficiles pour achever la préparation de ma thèse. Je le remercie sincèrement.

Je remercie Monsieur **Hamid EZ-ZAHRAOUY**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat et directeur de Laboratoire Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires(LaMCS*c*), pour la confiance qu'il m'a témoigné pour présider le jury de ma thèse.

Je tiens à remercier le Professeur **Abdelilah BENYOUSSEF**, membre résident de l'Académie Hassan II des Sciences Techniques et directeur du Centre Matériaux-Nanomatériaux de la fondation MAS*c*IR de ses conseils avisés qui m'ont permis de mener à bien ce travail et pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'être le rapporteur de ma thèse.

Je remercie vivement Monsieur **Mohammed EL BOUZIANI**, Professeur à la Faculté des Sciences d'EL Jadida, d'avoir accepté la lourde tâche de rapporteur de thèse et d'avoir siégé parmi le jury.

Je voudrais aussi exprimer ma profonde gratitude à Monsieur **Mourad EL YADARI**, Professeur habilité à l'école Supérieure de Technologie Meknès pour sa collaboration et les discussions fructueuses. Je le remercie aussi d'avoir voulu faire partie du jury.

Je remercie également tous mes collègues du Laboratoire Matière Condensée et

Sciences Interdisciplinaires(LaMCSc) et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail. Je remercie tout le personnel de CEDoC, notamment mon amie **Karima Ehtioui**, qui n'a cessé de m'encourager le long de la préparation de cette thèse.

RÉSUMÉ

Cette thèse porte sur l'étude théorique de l'effet du champ cristallin aléatoire sur les transitions de phase des systèmes d'Ising de spins mixtes. Nous envisageons les cas statique et dynamique en présence d'un champ magnétique extérieur oscillant.

En utilisant l'approximation du champ moyen basée sur l'inégalité de Bogoliubov nous avons montré que le système d'Ising de spins mixte étudié présente une variété des lignes de transitions de premier et de second ordre avec l'apparition des points multicritiques. A très basse température, le système exhibe des lignes de transition de premier ordre qui se terminent par des points critiques isolés, mais elles disparaissent avec l'augmentation de la température. L'exploration du système a révélé l'existence des phénomènes de réentrance et de compensation. En combinant la théorie du champ moyen et la dynamique stochastique de Glauber en présence d'un champ magnétique externe dépendant du temps, nous avons examiné l'effet du champ cristallin sur le système ferrimagnétique sur un réseau $2d$ et sur les systèmes semi-infinis. Nous avons obtenu une variété des diagrammes de phase statiques et dynamiques représentés dans l'espace des phases respectivement par des points fixes et des cycles limites.

Mots clés : Systèmes Mixtes; Système Semi-Infini; Réentrance; Points de Compensation; Champ Cristallin; Dynamique de Glauber.

ABSTRACT

The aim of this dissertation is to pinpoint the effect of the random crystal field on the phase transitions of the mixed spin Ising systems with considering the static and the dynamic cases.

Dealing with the mean field approximation based on Bogoliubov inequality we have shown that the mixed spin Ising system ($S_a = 1, S_b = 3/2$) presents a variety of phase transition lines with first and second order phase lines transitions. The system presents tricritical and triple points. It is also has been found the emphasis of the one and double compensation points for selected values of crystal field. We also observed that the system exhibits reentrant phenomenon.

Secondly, we addressed the effect of random crystal field on the stationary states of the mixed spin-1 and spin-3/2 Blume-Capel model within the framework of the mean field approach. The Glauber-type stochastic dynamics is used to describe the time evolution of the system which is subjected to a time-dependent oscillating external magnetic field. The model exhibits first and second order transitions as well as dynamical tricritical, triple and an isolated critical end points. We found that the system displays reentrant phenomenon for both $\alpha = 0$ and $\alpha > 0$. Moreover, the system exhibits in the phase space a fixed points and limit cycles with circle, elliptic and parallelogram shapes.

Using the same frame work, we investigated the kinetic of the semi-infinite cubic ferromagnet with spin-1 at the bulk and spin-1/2 at the surface. We have found that the system reveals a riche variety of topology of phase diagrams including ordinary and extraordinary phase dynamical transitions. Furthermore, the model exhibits dynamical tricritical phenomenon dynamical first and second order phase transition.

Index Terms : Phase Transition ; Critical Behavior ; Mean Field Theory ; Compensation Temperature ; Reentrance ; Kinetic Mixed Spin System ; Semi-Infinite System.

Table des matières

Introduction	1
1 Généralités : Systèmes magnétiques, transitions de phase, modèles et méthodes	5
1.1 Interaction d'échange	6
1.1.1 Origine du magnétisme	6
1.1.2 Interactions d'échange	9
1.1.3 Anisotropie magnéto-cristalline et champ cristallin	11
1.1.4 Notion de champ cristallin	12
1.2 Modèles de spins	12
1.2.1 Modèle d'Ising	12
1.2.2 Modèle de Heisenberg	13
1.2.3 Modèle XY	14
1.2.4 Modèle de Potts	15
1.2.5 Modèle de Blume-Capel	15
1.3 Eléments sur les transitions de Phase et les phénomènes critiques . . .	17
1.3.1 Phase et diagramme de phase	17
1.3.2 Transition de phases	19
1.3.3 Phénomène critique	19
1.4 Méthodes approximatives et numérique	21
1.4.1 Approximation du champ moyen	21
1.4.2 Méthode du champ effectif	26
1.4.3 Méthodes numériques : Technique Monte Carlo	28

2 Etude statique des transitions de phases des systèmes magnétiques mixtes en présence d'un champ cristallin aléatoire	31
2.1 Introduction	32
2.2 Modèle et théorie	32
2.3 Diagrammes de Phases et discussions	36
2.4 Les propriétés magnétiques	40
2.5 Conclusion	49
3 Effet du champ cristallin aléatoire sur la dynamique du système d'Ising de spins mixtes Spin-1 et Spin-3/2 soumis à un champ magnétique oscillant	51
3.1 Introduction	51
3.2 Dynamique du modèle d'Ising	52
3.2.1 Le modèle de Glauber	52
3.3 Dynamique du système d'Ising : Spins mixtes (1, 3/2)	55
3.3.1 Modèle du système et méthode DMFA	55
3.3.2 Diagrammes de phases dynamiques	58
3.3.3 Comportement thermique de l'aimantation	62
3.4 Conclusion	65
4 Transition de phase dynamique pour le modèle d'Ising semi-infini avec un volume $S = 1$ et une surface libre $\sigma = \frac{1}{2}$ sous un champ magnétique oscillant	67
4.1 Formulation du modèle	69
4.2 Diagrammes de phases dynamiques	71
4.3 Paramètre d'ordre dynamique et trajectoires dans l'espace des phases .	76
4.4 Conclusion	80
Conclusion	82
Bibliographie	89

Table des figures

1.1	Moment magnétique élémentaire	6
1.2	Matériau diamagnétique (a) et paramagnétique (b) en absence et en présence d'un champ magnétique extérieur	8
1.3	(a) Matériau ferromagnétique en absence et en présence d'un champ magnétique extérieur (b) composé antiferromagnétique (c) composé ferromagnétique	9
1.4	(a) Diagramme de phase (T, p) ; montre l'existence de trois phase (solide, liquide, gaz). Il présente deux points particuliers : point critique(cercle plein bleu) qui marque la fin d'une transition de premier ordre entre les phase liquide et gaz ; le point triple qui montre l'existence de trois phases. (b)Diagramme de phase du ferromagnétisme (T, h) ; le point (T_C, h_C) est un point critique qui marque la fin d'une transition de la phase ferromagnétique à la phase paramagnétique $T < T_C, h_C = 0$	18
2.1	Diagramme de phases de l'état fondamental établi à $T = 0$ dans le plan (d, α)	35
2.2	la première topologie des diagrammes de phases, tracés dans le plan $(d = \Delta/J, t = T/J)$, pour $\alpha = 0, 0.4$ et $\alpha = 0, 65$ La température critique réduite tracée en fonction du champ cristallin réduit d pour les valeurs de $\alpha = 0(a), 0.4(b), 0.65(c)$. Les points tricritiques et isolés sont représentés successivement par des grands et petits carrés. Les points triples sont indiqués par des cercles pleins.	38

2.3	la deuxième topologie des diagrammes de phases, tracés dans le plan ($d = \Delta/J, t = T/J$), pour $\alpha = 1$ et $\alpha = 1,5$	40
2.4	(a) Les aimantations partielles m_a et m_b en fonction de la température pour $\alpha = 0.65$ et pour une série de valeurs du champ cristallin. (b),(c) Les aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin tracées pour $\alpha = 0.65$ et pour deux valeurs de températures $t = 0,017$ et $t = 0.063$	42
2.5	(a) Variation des aimantations partielles m_a et m_b en fonction de la température pour des valeurs de champ cristallin $d = 2.5, 1, 0, -10, -5$, (b) (c) Les aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin tracées pour $\alpha = 1.5$ et pour deux valeurs de températures $t = 0,017$ et $t = 0.1$	43
2.6	Les aimantations m_a, m_b en fonction du champ cristallin réduit pour $\alpha = 1.5$ et $t = 3$. (a) comportement opposé de réentrance,(b) comportement normale de réentrance	44
2.7	Température de compensation réduite en fonction du champ cristallin réduit selon une série de valeurs de paramètre $\alpha = 0, 0.1, 0.2, 0.3$, . . .	45
2.8	(a),(c) Variation des aimantations partielles m_a, m_b et $(m_a + m_b)/2$ et totale en fonction de la température (b) $M = 0$ deux points de compensation,(d) $M = 0$, un seul point de compensation	46
2.9	Classification de Néel du système d'Ising de spins mixtes spin-1 et spin-3 /2.	48
2.10	Classification de Néel, représentation générale	49

3.1	<i>diagramme de phases dynamiques du système d'Ising de spins mixtes spin-1 spin-3/2 dans le plan (d, T) pour différentes valeurs du paramètre α. on distingue le cas d'application d'un champ oscillant faible et fort. Les points tricritiques et isolés sont représentés successivement par des grands et petits carrés. Les points triples sont indiqués par des cercles pleins.</i>	61
3.2	<i>Comportement des aimantations partielles m_a et m_b en fonction de la température réduite T pour $\alpha = 0$ et $h = 0.02$.</i>	64
3.3	<i>Comportement des aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin réduit d pour $\alpha = 0$ et $h = 1$.</i>	64
3.4	<i>Variation des aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin réduit d pour $\alpha = 1.5$ et $h = 0.6$ pour des valeurs choisies de la température réduite $T = 0.5$ et 2, les figures (a) et (b) exhibent le phénomène réentrant opposé.</i>	65
4.1	<i>Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h). (a) $d = -3.7$, $r = 1$, et (b) $d = -2$, $r = 1$ Les lignes solides et pointillées sont respectivement les lignes de transitions du second et du premier ordre. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts. Les symboles SP, BP, SF et BF désignent respectivement, la surface paramagnétique, le volume paramagnétique, la surface ferromagnétique et le volume ferromagnétique.</i>	72
4.2	<i>Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h). (a) $d = -3.5$, $r = 4$, et (b) $d = -3.5$, $r = 6$. Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions du second et du premier ordre. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts. Les symboles SP, BP, SF et BF désignent respectivement, la surface paramagnétique, le volume paramagnétique, la surface ferromagnétique et le volume ferromagnétique.</i>	72

-
- 4.3 Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h) . Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions de phases de premier et second-ordres. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts, (a) $d = -2, r = 4$, et (b) $d = 2, r = 6$ 74
- 4.4 Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h) . Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions de phases de premier et second-ordres. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts, pour $d = 2, r = 4$. . . 74
- 4.5 Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T_c, d) pour $h = 0.05$, (a) $r = 0.3$, (b) $r = 1$, (c) $r = 3$, et (d) $r = 6$. Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions de phases de premier et second-ordres. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts. 75
- 4.6 Les aimantations de la surface (a) et du volume (b) en fonction de la température pour $r = 1$ et $h = 0.05$ et pour une série de valeurs du champ cristallin. Une transition discontinue de la surface est observée en (c) pour $d = -3.7, r = 1$ et $h = 1.5$ et devient continue pour des valeurs élevées de h et r (e). Une transition extraordinaire est représentée sur (d) pour $d = -3.5, r = 4$ et $h = 0.5$ 77
- 4.7 Solutions pour différentes conditions initiales avec $r = 1$ et $d = -2$. Figures (a) et (b) sont respectivement tracées pour $h = 0.05$ et les valeurs choisies de $T = 0.02$ et $T = 2.5$. Figure (c) est tracée pour $h = 3$ et $T = 0.05$. Les points fixes correspondants et les cycles limites sont représentés sur l'espace des phases. 79

4.8 Solutions du système dans l'espace des phases en présence d'un champ magnétique fort pour $r = 6$, $d = -3.5$ et $T = 6$. le système est très perturbé une phase paramagnétique représentée par une ellipse centrée autour du point zéro.	80
---	----

Introduction Générale

Depuis sa découverte, le magnétisme n'a pas cessé de jouer un rôle crucial dans le développement des divers disciplines de la science, du macro au micro le magnétisme est omniprésent dans plusieurs domaines : L'industrie, l'énergie, la technologie de l'information, la médecine. Les progrès technologiques et techniques réalisés dans l'exploration de la matière à l'échelle microscopique ont permis d'observer des objets à l'échelle nanométrique qu'on appelle nanoparticules dont les dimensions sont comprises entre 1 et 100 nm et constituées généralement de quelques centaines à quelques milliers d'atomes . En plus de leur intérêt fondamental, ces nouveaux objets font à l'heure actuelle l'objet de nombreuses applications intéressantes.

On peut citer par exemple le stockage réversible de l'information de très haute densité en exploitant la bi-stabilité des nanoparticules entre deux états électroniques haut spin et bas spin. On mentionne ici le prix Nobel octroyé à Alber Fert [1] et Peter Grünberg [2] pour leurs travaux sur la magnéto-résistance géante GMR(Geant Magneto Resistance). Un autre phénomène a été découvert en 1995, la magnéto-résistance tunnel TMR (Tunneling Magneto Resistance) à température ambiante, [3] il se manifeste dans des matériaux composés de deux couches magnétiques séparés par une couche mince isolante. Ces résultats ont été utilisés pour développer l'électronique de spin et par la suite pour améliorer la capacité de stockage de l'information sur des supports magnétiques modernes et réduire le temps d'accès aux données [4].

Au niveau biomédicale, dans le traitement du cancer on peut utiliser une ap-

proche appelée hyperthermie magnétique (MFH) (Magnetic fluid hyperthermia), cette technique consiste à injecter des nanoparticules magnétiques à l'intérieur de la tumeur, ensuite on fait exposer le patient à un champ magnétique oscillant pour élever la température des cellules cancéreuses jusqu'à 43°-45°. Les cellules tumorales, très sensibles aux échauffements, sont soit détruites, soit sensibilisées davantage à la chimiothérapie ou la radio-thérapie[5]. Cette technique est testée cliniquement sur plusieurs patients pour traiter les tumeurs cérébrales dans des hôpitaux de l'UE (Union Européenne), notamment en Allemagne [6].

Le phénomène d'élévation de la température dans le deuxième exemple peut être expliqué théoriquement par un mécanisme dominant qui consiste en la production de la chaleur par le renversement de l'aimantation dans les particules magnétiques en appliquant un champ magnétique oscillant. La chaleur libérée par nanoparticule est assez faible sauf si on augmente leurs nombres. Plusieurs alternatives peuvent être adoptées pour élever la température d'échauffement des nanoparticules, par exemple en considérant une structure en double couche avec deux matériaux différents ou en fabriquant des nanoparticules bimétalliques (nano-alliages).

En général, les alliages binaires présentent des propriétés physiques et chimiques diversifiées et riches par rapport aux systèmes purs. Ces systèmes mixtes sont constitués par deux sous réseaux chacun est occupé par deux atomes différents A et B . Si la température est assez élevée, les sites du réseau cristallin peuvent être occupés de manière aléatoire par les deux atomes (phase désordonnée). A basse température, on se retrouve avec une phase ordonnée et un paramètre d'ordre bien défini.

Les systèmes binaires ferrimagnétiques sont des matériaux intéressants pour analyser les mécanismes de transfert de spin, vis à vis de leur dynamique d'aimantation originale, ils sont largement utilisés dans les dispositifs de stockage de l'information tels que les disques durs, les CD ROM... Les aimantations des deux sous-réseaux se compensent avant la température critique et l'aimantation résultante peut s'annuler à une

température dite de compensation [7; 8]. L'existence d'un tel point permet d'expliquer sa coercitivité et sa fluctuation thermique [9]. Le champ coercitif diverge au point de compensation et s'annule à la température de Curie, il est responsable de la stabilité des domaines magnétiques enregistrés et joue un rôle primordiale dans l'écriture, la lecture et l'écrasement des données sur les supports magnétiques [10].

Plusieurs études ont été menées pour bien comprendre les comportements thermodynamiques et magnétiques en équilibre de ces matériaux, Les systèmes d'Ising de spins mixtes fournissent un modèle simplifié pour prévoir les points de compensation et les différentes transitions de phase à basse et à haute température, on cite à titre d'exemples , la théorie du champ effectif [11–16], l'approximation du champ moyen (MFA) basée sur l'inégalité de Gibbs-Bogoliubov pour l'énergie libre [17; 18], la méthode du variation du cluster [19] et Les simulations Monte-Carlo [20–22]. La formulation exacte des spins mixtes spin-1 et spin-3/2 des systèmes ferrimagnétiques dans le réseau de Bethe utilisant les équations de récursion exacte [23; 24], la méthode de groupe de renormalisation Migdal Kadanoff [25; 26] et la fonction Green [27].

Malgré les progrès accomplis, au cours de ces vingt dernières années, pour développer le formalisme de la physique statistique hors équilibre, la description des propriétés dynamiques, en présence d'un champ magnétique oscillant des systèmes d'Ising de spin mixtes n'est pas encore élaboré de manière complète. Peu de travaux ont été réalisés dans cette direction on cite par exemple l'étude de l'aspect dynamique des modèles ferromagnétique des spins mixtes spin-1 et spin-3/2 réalisée par Keskin et al [28; 29]. Le modèle a été utilisé par E. Vatansever et al.[30] pour étudier les nanoparticules en utilisant les simulations (MC), Shi et al. [31] ont examiné la réponse dynamique sur le systèmes Ising mixtes spin-1 et spin-3/2 avec la structure Fe_4N en présence d'un champ magnétique oscillant en utilisant la théorie du champ moyen dynamique. Bayaram et al. [32] ont analysé l'effet d'un champ cristallin d'interaction core-shell. Récemment, Ertas et Keskin [33] ont exploré les comportements hystérésis dynamiques

en deux dimensions du système spin-1 et spin-3/2 dans le cadre de la théorie du champ effectif dynamique.

D'où l'intérêt de ce travail qui consiste à contribuer à ces sujets en proposant une étude théorique statique et dynamique des systèmes d'Ising de spins mixtes en présence d'un champ cristallin aléatoire.

Le manuscrit est organisé selon quatre chapitres :

Le premier chapitre introduit brièvement les propriétés magnétiques des matériaux et leurs classification, il présente également certains modèles pour décrire et modéliser les interactions locales dans les systèmes complexes. Ensuite, nous exposons les méthodes d'approximations et numériques pour étudier les transitions de phase.

Le second chapitre aborde en détail l'étude statique des transitions de phases pour les systèmes magnétiques de spins mixtes en présence d'anisotropie. Nous nous intéressons plus particulièrement aux systèmes d'Ising de spins mixtes (1, 3/2) en présence d'un champ cristallin aléatoire.

Le troisième chapitre, examine l'effet du champ cristallin aléatoire sur le système d'Ising Spin-1 et Spin-3/2 en présence d'un champ magnétique oscillant.

Le dernier chapitre concerne l'étude de l'effet d'un champ cristallin sur la dynamique du système d'Ising semi-infini soumis à l'action d'un champ magnétique variable dans le temps.

Chapitre 1

Généralités : Systèmes magnétiques, transitions de phase, modèles et méthodes

Dans ce chapitre nous abordons les notions essentielles qui sont utilisées dans ce manuscrit à savoir l'origine du magnétisme, les interactions d'échange, l'anisotropie et les phénomènes critiques. Nous présentons également, certains modèles de spin qui sont utilisés souvent pour étudier les systèmes de spin. En suite, nous rappelons brièvement quelques méthodes d'approximations et numériques pour étudier les transitions de phases.

1.1 Interaction d'échange

1.1.1 Origine du magnétisme

Lors d'une application d'un champ magnétique extérieur, le mouvement des charges électriques, par exemple le mouvement orbital des spins des électrons, engendre un moment magnétique. Pour un atome, le moment résultant est nul lorsque tous les électrons sont appariés. Dans le cas d'existence d'électrons qui ne sont pas appariés (dipôle magnétique) ou plus précisément le spin associé à un électron non apparié le moment résultant n'est pas nulle. C'est le cas par exemple des orbitales atomiques, "**d**", des métaux et "**p**" et "**s**" [34] pour les composés organiques et "**f**" [35] pour les terres rares.

L'aimantation de l'atome provient en général de 3 sources :

- Le moment magnétique orbital dû au mouvement des électrons autour du noyau.
- Le moment magnétique de spin associé au mouvements intrinsèques des électrons dont la projection suivant la direction du champ magnétique extérieur.
- le moment magnétique nucléaire qui est négligeable devant les moments magnétiques de spin ou d'orbite.

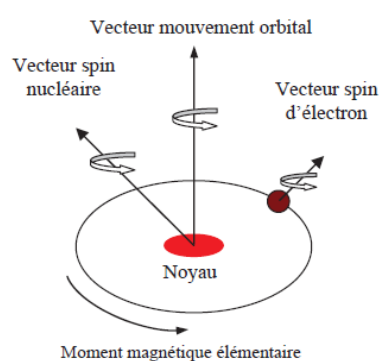


FIGURE 1.1 – Moment magnétique élémentaire

Dans les matériaux, les moments magnétiques sont formés essentiellement à partir des couches atomiques incomplètes **d** ou **f**. Pour les isolants, les électrons des couches ex-

ternes participent aux liaisons atomiques alors qu'ils sont délocalisés dans une bande d'énergie pour les métaux.

Les électrons occupent des orbitales atomique ou moléculaire en obéissant à la règle d'exclusion de Pauli. Ceci permet au matériau d'acquérir selon la configuration appréhendée des états magnétiques précis [36–38] :

- Le diamagnétisme (**Fig.1.2a**) : Tous les électrons sont appariés et le moment magnétique total est nul. L'application d'un champ magnétique extérieur déforme les orbitales et le mouvement des électrons génère une aimantation faible qui s'oppose au champ extérieur. Les matériaux diamagnétiques les plus connus sont le cuivre, l'argent, l'or et les molécules organiques.
- Le paramagnétisme (**Fig.1.2b**) : Les électrons occupant les orbitales atomiques ne sont pas appariés, un état désordonné des moments magnétiques atomiques apparait sous l'effet de l'agitation thermique. Les moments se compensent mutuellement de telle façon que l'aimantation globale s'annule. Si on applique un champ magnétique extérieur les moments magnétiques de spin tendent à s'aligner avec le champ extérieur qui induit une augmentation de l'intensité du champ à l'intérieur du matériau.
- Le ferromagnétisme (**Fig.1.3a**) : Les électrons occupent les sous couches d et les moments magnétiques des spins adjacents sont orientés parallèlement par une interaction mutuelle coopérative. Les matériaux ferromagnétiques possèdent une polarisation spontanée qui se manifeste par l'apparition des domaines magnétiques appelés "domaines de Weiss". En l'absence d'un champ magnétique extérieur l'élévation de la température produit un désordre thermique et le moment magnétique total est nul et le matériau devient paramagnétique à partir d'une température dite de Currie ou température critique T_c . Parmi les matériaux ferromagnétiques qui existent, on cite : le Fer Fe , Cobalt Co , Nickel Ni , $MnBi$, $MnAs$
- L'antiferromagnétisme (**Fig.1.3b**) : Dans les matériaux, les moments magnétiques des spins des électrons adjacents sont antiparallèles. En absence d'un champ ma-

gnétique externe, le moment magnétique résultant à l'échelle macroscopique est nul. Lorsque la température augmente le couplage antiferromagnétique disparaît à partir d'une température bien déterminée appelée température de Néel T_N . Les composés antiferromagnétiques sont souvent formés par deux sous réseaux inter-pénétrants comme Mns , $CrSb$, MnF_2 et les oxydes MnO , FeO , NiO .

- Le ferrimagnétisme (**Fig.1.3c**) : Dans ce type de matériaux qui appartiennent à une classe d'oxyde appelés ferrites, les moments magnétiques de spin adjacents sont antiparallèles et possèdent des intensités différentes. Le couplage antiferromagnétique qui existe entre les spins provoque une polarisation spontanée. Les ferrimagnétiques sont constitués de plusieurs sous-réseaux avec des moments inéquivalents. Dans certaines cas les aimantations du sous-réseau se compensent, puis l'aimantation résultante s'annule à une température de compensation T_{comp} inférieure à la température critique T_c . L'apparition d'un tel point revêt une grande importance technologique. En général un matériau ferrimagnétique est un oxyde de formule chimique AOB_2O_3 où A et B_2 sont respectivement des cations bivalents et trivalents, par exemple : Fe_3O_4 , $CoFe_2O_4$, $NiFe_2O_4$, et $CuFe_2O_4$.

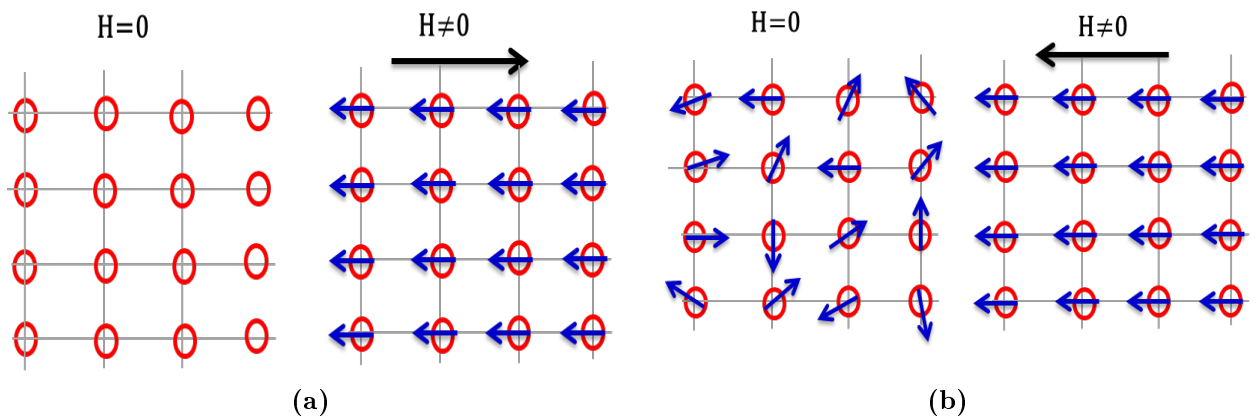


FIGURE 1.2 – Matériau diamagnétique (a) et paramagnétique (b) en absence et en présence d'un champ magnétique extérieur

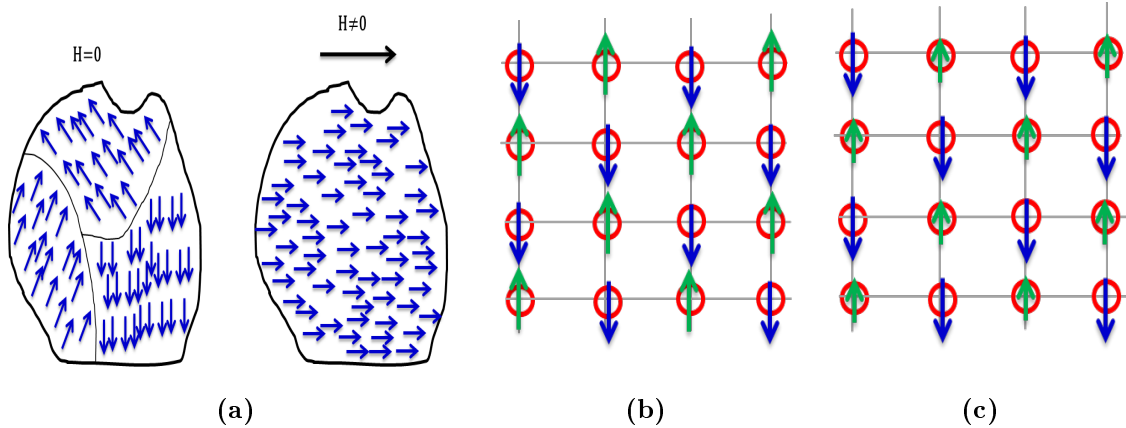


FIGURE 1.3 – (a) Matériau ferromagnétique en absence et en présence d'un champ magnétique extérieur (b) composé antiferromagnétique (c) composé ferrimagnétique

1.1.2 Interactions d'échange

Le matériau ferromagnétique présente une polarisation magnétique spontanée des moments magnétiques, même en absence du champ extérieur. Cette polarisation est due à leurs interactions mutuelles, un ordre magnétique est alors imposé au niveau microscopique qui se manifeste par une aimantation nette non nulle à l'échelle macroscopique. Une augmentation de l'agitation thermique provoque une destruction de l'ordre magnétique et l'aimantation globale devient nulle.

Considérons deux électrons en interaction caractérisés respectivement par les spins $S_1 = 1/2$ et $S_2 = 1/2$. L'interaction est décrite par un hamiltonien H . Le couplage entre les moments magnétiques de spin ne provient pas d'une interaction dipôle-dipôle directe (moments magnétiques portés par les atomes ions) ou les électrons (interaction spin-orbite) qui est trop faible mais résulte d'une interaction d'échange de forte intensité qui est due à l'interaction électrostatique, c'est une conséquence du principe d'exclusion de Pauli qui impose que la fonction d'onde soit complètement antisymétrique en inter changeant deux particules fermioniques. Selon que les spins sont parallèles ou anti-parallèle, les quatre états de spins obtenus déterminent un état, $|\psi^{as}\rangle$, singulet antisymétrique et un état triplet, $|\psi^s\rangle$, symétrique de façon à vérifier les équations

aux valeurs propres :

$$H|\psi^{AS}\rangle = E_{AS}|\psi^{AS}\rangle \quad (1.1)$$

$$H|\psi^S\rangle = E_S|\psi^S\rangle \quad (1.2)$$

les valeurs E_S et E_{AS} sont différentes, et l'état fondamental sera de spin ($S = 0$). L'écart $\Delta E = E_S - E_{AS}$ est le facteur responsable de l'interaction magnétique entre les spins, il détermine l'ordre parallèle ou antiparallèle des spins. ΔE est appelé énergie d'échange qu'on note souvent par J .

L'interaction d'échange est une énergie électrostatique, d'origine quantique, qui dépend de la valeur du spin, par contre le hamiltonien H , qui décrit l'interaction du système, ne dépend pas explicitement des spins. Il est commode de construire un hamiltonien qui fait apparaître le couplage des deux spins :

$$H_s = -J\vec{S}_1\vec{S}_2 \quad (1.3)$$

H est appelé hamiltonien de spin introduit par Heisenberg [39]. Lorsque l'état singulet est le plus stable en énergie $J < 0$, on favorise l'interaction antiferromagnétique et lorsque c'est le cas inverse $J > 0$, l'interaction ferromagnétique sera favorisée. La relation (1.3) peut se généraliser à un système de N spins en écrivant :

$$H_{HZ} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - h \sum_i S_{iz} \quad (1.4)$$

le deuxième terme de l'équation droite exprime l'énergie Zeeman résultant de l'interaction entre un champ magnétique extérieur h et les moments magnétiques des spins du système.

1.1.3 Anisotropie magnéto-cristalline et champ cristallin

L'interaction d'échange qui favorise l'alignement des paires de spins voisins dans un matériau ferromagnétique n'est pas suffisante pour déterminer l'orientation macroscopique de l'aimantation. Cette dernière est altérée par d'autres termes d'énergie qui oriente l'aimantation spontanée le long de certains axes cristallographiques privilégiés. La dite énergie est appelée énergie de l'anisotropie qui provient de deux types d'interactions : Le couplage spin-orbite et le champ cristallin d'une part, qui couple l'aimantation au réseau cristallin, et l'interaction dipolaire entre moments magnétiques d'autre part. Parmi les différentes formes d'anisotropie qui existent, on cite :

- L'anisotropie de forme : Elle est due aux effets magnétostatiques et résulte de la discontinuité de l'aimantation à la surface de la particule qui crée un champ démagnétisant qui se pose à l'aimantation ; c'est une conséquence de l'interaction dipolaire qui tend à orienter l'aimantation selon la plus grande dimension du système, elle dépend de la forme géométrique de l'échantillon[40].
- L'anisotropie magnétocristalline résulte du couplage spin-orbite entre les spins et le réseau cristallin du matériau. Pour minimiser l'énergie libre du système, l'aimantation a tendance à s'orienter suivant certains axes du réseau cristallin dites axes d'aimantation facile. Ceci nous conduit à l'introduction du champ cristallin qui consiste à remplacer l'environnement des ions du réseau cristallin par un potentiel électrostatique. Le champ cristallin est une conséquence de la perturbation des ions par leur environnement cristallin, il a été introduit en 1930 pour expliquer les propriétés magnétiques du groupe de Fer[41]
- L'anisotropie magnéto-élastique : Elle résulte d'une déformation de la structure cristalline d'un matériau. La déformation, provoquée par un opérateur extérieur induit des modifications des propriétés magnétiques du matériau. Dans le cas des couches minces la déformation peut exister même en absence de contraintes extérieures qui sont liées aux refroidissement ou réchauffement de la surface.

1.1.4 Notion de champ cristallin

Le champ cristallin est un champ électrostatique qui provient principalement de la répulsion des électrons chargés négativement dans les orbitales atomiques. l'effet d'un champ cristallin dépend essentiellement de la symétrie de l'environnement.

Dans les terres rares, les couches "f" sont très concentrées autour des noyaux atomiques : L'effet du champ cristallin est négligeable et peut être considéré comme une perturbation faible. Pour les ions de transition dans les isolants, les orbitales "3d" s'étendent plus loin du noyau : L'effet du champ cristallin est important et il faut en tenir compte.

1.2 Modèles de spins

L'étude d'un phénomène de transition de phase, nécessite la donnée d'un modèle qui représente de manière simple la réalité physique et permet de décrire le comportement d'un système complexe en interaction en fonction des variables d'état utiles. La résolution exacte de la fonction de partition devient une tâche difficile et ne peut se faire que dans certains cas par exemple pour les systèmes d'Ising à $d = 2$. Nous introduisons dans cette section les modèles de spin qui décrivent les interactions des spins répartis dans un système régulier, à savoir les modèles d'Ising, Hiesenberg, XY, Potts et Blume-Capel.

1.2.1 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est utilisé pour modéliser le système des spins lors d'une transition de phase magnétique, il a été proposé par W. Lenz [42] et E. Ising [43]. Dans ce modèle l'opérateur spin \vec{S}_i est remplacé par un nombre qui représente la composante de spin suivant l'axe \vec{o}_z notée souvent par ± 1 (up ou down). Le modèle d'Ising est défini sur un réseau à d dimension occupé par N spins. Ce modèle est adéquat pour les systèmes de spins où l'énergie est invariante par le groupe des réflexions \mathbb{Z}_2 .

Le Hamiltonien du modèle d'Ising est donné par :

$$H_{IZ} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.5)$$

Où J_{ij} est le terme d'interaction entre les spins S_i et S_j , h est le champ magnétique extérieur dirigé vers l'axe facile. Si on suppose que l'interaction est limitée aux premiers voisins (NN), on peut écrire $J_{ij} = J$ et l'équation (1.5) devient :

$$H_{IZ} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.6)$$

$\langle ij \rangle$ indique que la somme s'effectue sur tous les premiers paires de spins proches voisins.

Si $J > 0$, l'interaction entre les spins S_i et S_j est ferromagnétique et si $J < 0$ l'interaction est antiferromagnétique.

Il est à noter que le modèle d'Ising [43] ne présente pas de transitions de phase à une seule dimension $d = 1$, ce résultat a été généralisé par conjecture aux dimensions supérieures. Toutefois, R. Peierls a énoncé dans l'introduction de son article [44] l'existence d'une transition de phase à $d \geq 2$, réfutant ainsi la conjecture de E. Ising. Huit ans après, Onsager [45] a donné la solution exacte du modèle d'Ising pour $d = 2$ (les spins s'ordonnent seulement à $T = 0$). Pour $d = 2$, Peierls a montré que le modèle d'Ising présente une brisure spontanée de symétrie et par conséquent une aimantation spontanée apparaît à une température critique $T_C \neq 0$.

1.2.2 Modèle de Heisenberg

Le modèle de Heisenberg a été introduit en 1928 comme modèle de ferromagnétisme [39], il fournit une explication satisfaisante des propriétés des isolants magnétiques et permet de construire le hamiltonien décrivant les interactions d'échange microscopiques, de manière plus générale et en présence d'un champ magnétique extérieur supposé dirigé vers la direction de l'axe $\vec{o}z$ le hamiltonien de Heisenberg est

donné par

$$H_{HZ} = -J_Z \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_{xy} \sum_{\langle ij \rangle} (S_{ix} S_{jx} + S_{iy} S_{jy}) - h \sum_i S_{iz} \quad (1.7)$$

Si $J_{xy} = 0$, on retrouve le hamiltonien d'Ising.

Si $J_{xy} = J_Z = J$ le hamiltonien (1.7) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$H_{HZ} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - h \sum_i S_{iz} \quad (1.8)$$

Le modèle de Heisenberg est plus général que celui d'Ising du fait que dans le cas quantique les opérateurs Spin ne commutent pas et il tient compte des interactions compliquées.

Ce modèle possède une symétrie de rotation $O(n=3)$, il s'agit d'une symétrie interne continue qui agit sur l'espace des vecteurs spins, si $n=1$, le modèle de Heisenberg se réduit au modèle d'Ising qui possède une symétrie discrète \mathbb{Z}_2 . Le modèle de Heisenberg possède une symétrie continue pour $n \geq 2$ mais ne présente de transition de phase qu'à partir de $d \geq 3$, donc apparition d'une brisure spontanée de symétrie et d'un paramètre d'ordre, l'aimantation, dans la phase à basse température.

1.2.3 Modèle XY

Si on prend $J_Z = 0$ dans l'équation (1.7) et si on applique un champ magnétique parallèle à $\vec{o}\hat{x}$, l'hamiltonien prend la forme suivante :

$$H_{XY} = -J_{xy} \sum_{\langle ij \rangle} (S_{ix} S_{jx} + S_{iy} S_{jy}) - h \sum_i S_{ix} \quad (1.9)$$

$$H_{HZ} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - h \sum_i S_{ix} \quad (1.10)$$

Il définit le modèle qui décrit un système de spin à deux composantes supposées normalisées à l'unité, $\vec{S}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$ où θ_i est un paramètre continu qui détermine l'orientation des spins, dans l'espace des spins, ainsi le hamiltonien (1.10) se réécrit

comme suit :

$$H_{HZ} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - h \sum_i \cos \theta_i \quad (1.11)$$

Comme le modèle de Heisenberg, le modèle **XY** présente une transition de phase pour $d > 2$. En outre, à $d = 2$ le modèle présente une transition de phase à grande distance à des températures finies [46; 47]

.

1.2.4 Modèle de Potts

Une large classe de systèmes physiques classiques ne peuvent pas être décrits par le modèle d'Ising, on cite comme exemple le Krypton sur le graphite [48], l'adsorption des gaz rares sur les surfaces [49]. D'où la nécessité d'utiliser un autre modèle plus général appelé modèle de Potts introduit en 1952 [50] (ou modèle de Potts à q -états). Sur chaque site du réseau on place une variable $\sigma_i = 0, 1, \dots, q - 1$. L'interaction entre les spins est décrite par le hamiltonien suivant :

$$H_{\text{potts}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (1.12)$$

où δ est le symbole de Kronecker, l'énergie d'une paire de deux spins proches voisins est égale à $-J$ s'ils ont le même état et zero autrement. A $T = 0$, on peut choisir q états fondamentaux dont les sites du réseau sont occupés par les mêmes valeurs de σ_i .

A $d = 2$, lorsqu'on augmente la température, le système se désordonne et présente une transition de phase de second ordre à $q \leq 4$. Quand q devient supérieure à 4, on obtient une transition de phase de premier ordre.

A $d = 3$, la transition vers la phase paramagnétique est du premier ordre pour $q > 2$.

1.2.5 Modèle de Blume-Capel

Il s'agit d'un modèle introduit en 1966 par Blume [51] pour modéliser la transition de ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$ et indépendamment par Capel [52] pour expliquer la présence des

transitions de phase magnétique du premier ordre dans les systèmes de spin d'Ising.

Le modèle de Blume-Capel est une représentation simple des interactions des spins sur un réseau en présence de désordre, il peut décrire la phénoménologie de plusieurs systèmes physiques[53; 54]

Le hamiltonien du modèle de Blume-Cappel en présence d'un champ magnétique extérieur est donné par :

$$\mathcal{H}^{BC} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2 - h \sum_i S_i \quad (1.13)$$

où S_i est la variable de spin au site i du réseau cristallin dont les valeurs sont données par $S_i = \{-S, -S + 1, \dots, S - 1, S\}$. J est le facteur de couplage supposé positif, Δ est le facteur d'anisotropie, qui peut être exprimé dans certains cas en terme d'un champ cristallin[55] et h est un champ magnétique extérieur supposé uniforme.

En absence du champ magnétique extérieur et quand $\Delta = 0$, le modèle de BC est réduit au modèle d'Ising qui explique bien la transition de la phase désordonnée, à haute température, à la phase ordonnée à basse température.

Quand Δ prend des valeurs positives suffisamment faibles, l'énergie de spin S_i augmente légèrement et devient supérieure à celle du spin S . Le champ cristallin Δ ne brise pas la symétrie de la phase désordonnée et on continue à observer, à basse température, une ligne de transition de second ordre et le facteur d'échange J domine sur Δ . Pour les valeurs assez élevées du champ cristallin, la situation observée change radicalement, une ligne de transition de premier ordre se manifeste à basse température.

Il est à noter qu'il existe plusieurs extensions de ce modèle, par exemple, le modèle de Blume-Emery-Griffiths (BEG) qui a été introduit pour étudier la séparation de phase et la superfluidité dans les mélanges $^3\text{He}-^4\text{He}$ [56].

Le hamiltonien de BEG contient, en plus des termes de l'hamiltonien de BC, un terme quadratique (facteur d'échange bilinéaire K), il est donné par :

$$\mathcal{H}^{BEG} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (1.14)$$

1.3 Eléments sur les transitions de Phase et les phénomènes critiques

1.3.1 Phase et diagramme de phase

Une phase est un état de la matière dont les propriétés physiques macroscopiques de la substance sont uniformes sur une longueur d'échelle macroscopique (1mm par exp.). On cite comme exemple de la vie quotidienne : l'eau et ses diverses phases : solide (glace), liquide, gaz (vapeur). Le rôle de la physique statistique est d'étudier les phénomènes physiques macroscopiques en exploitant les interactions qui existent entre les particules au niveau microscopique.[57]

Une phase se caractérise par une fonction thermodynamique qui est l'énergie libre, elle dépend d'un certain nombre de paramètres thermodynamiques comme la température, la pression, le champ extérieur

$$\mathcal{F} = U - TS \quad (1.15)$$

où U et S sont respectivement l'énergie et l'entropie du système. C'est une fonction thermodynamique continue déterminée à partir de la fonction de partition :

$$Z = \exp\left(\frac{-F}{k_\beta T}\right) = \text{Tr} \left(\exp\left(\frac{-H}{k_\beta T}\right) \right) \quad (1.16)$$

on obtient donc :

$$F = -k_\beta T \ln(Z) \quad (1.17)$$

où k_β est la constante de Boltzmann et $\text{Tr}(\cdot)$, représente la somme sur tous les degrés de liberté du système statistique qui est décrit par le hamiltonien H .

Le premier terme du membre droit de l'équation (1.15) tend à être minimal pour favoriser l'ordre tandis que le deuxième tend à être maximal pour privilégier le désordre.

La dominance de l'un ou de l'autre dépend essentiellement de la température.

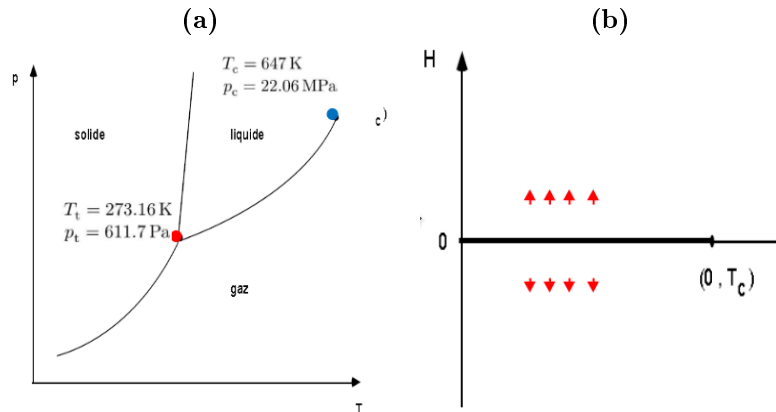


FIGURE 1.4 – (a) Diagramme de phase (T, p) ; montre l'existence de trois phase (solide, liquide, gaz). Il présente deux points particuliers : point critique (cercle plein bleu) qui marque la fin d'une transition de premier ordre entre les phase liquide et gaz; le point triple qui montre l'existence de trois phases. (b) Diagramme de phase du ferromagnétisme (T, h) ; le point (T_C, h_C) est un point critique qui marque la fin d'une transition de la phase ferromagnétique à la phase paramagnétique $T < T_C, h_C = 0$.

La variation d'un paramètre en fonction de l'autre permet d'obtenir un diagramme de phase qui mis en évidence les phases possibles d'un système.

A $T = 0$, le diagramme détermine l'état fondamental du système. Pour illustrer ces notions on peut citer deux types de diagrammes de phases :

- Diagramme liquide gaz (p, v, T)
- Diagramme (H, M, T)

Le diagramme de phase visualise les régions et les domaines qui représentent les phases du système, elles sont séparées par des lignes de transition de premier ordre si le passage d'une phase à une autre s'accompagne d'une discontinuité du paramètre d'ordre et elle est de second ordre dans le cas échéant. le point tricritique est l'intersection d'une ligne de premier ordre et une autre de second ordre. Le point triple est la jonction de trois lignes de transition de premier ordre.

Il est à noter qu'il existe une analogie entre la transition liquide-gaz dans le diagramme (T, p) et la transition ordre-désordre dans le diagramme (T, h) .

La phase est caractérisée par un paramètre d'ordre qui est une grandeur physique extensive qui permet de distinguer l'ordre et le désordre microscopique, il est nul dans

la phase la plus symétrique (phase désordonnée) et non nul dans la phase moins symétrique (ordonnée). Le paramètre d'ordre mesure le degré d'asymétrie, il caractérise la brisure de symétrie. Qualitativement quand on refroidit un matériau ferromagnétique au dessous de sa température critique T_C l'ordre magnétique augmente et se manifeste par l'apparition d'une aimantation macroscopique.

1.3.2 Transition de phases

Une transition de phase est une transformation d'un état de la matière provoquée par la variation d'un paramètre intensif (Température, champ magnétique, ...). Lors de la transition les variables thermodynamiques décrivant l'état du système, telles que la chaleur spécifique C_p et la susceptibilité ξ , subissent un changement abrupt et singulier.

Une transition de phase résulte de la compétition entre l'énergie interne U et l'entropie S du système qui déterminent l'énergie libre. Par convention on peut classer les transitions de phase selon le degré de singularité dans les grandeurs physiques. Il est commode d'appeler le type de la transition selon son degré de discontinuité ou de divergence. Par ex. la transition est de deuxième ordre si la dérivée seconde de l'énergie libre est discontinue ou diverge.

Dans la plus part des transitions du second ordre, la chaleur spécifique diverge au point critique, c'est le cas par exemple de la transition du superfluide de ^4He liquide [56] et la transition ferromagnétique-paramagnétique.

1.3.3 Phénomène critique

Un phénomène critique est une transition de phase continue et plus précisément, une transition du second ordre. C'est un phénomène qui apparait autour du point critique où la distinction entre les phases devient difficile. Pour comprendre ce qui se cache sous le terme de transition critique, des études expérimentales et théoriques ont été entreprises dans différentes directions.

Expérimentalement on a constaté que les variables thermodynamiques au voisinage du point critique possèdent un comportement en loi de puissance de $|T_C - T|$. Le degré de singularité ou de divergence au voisinage de la transition critique est donné par les exposants critiques $\alpha, \alpha', \beta, \gamma, \gamma', \nu, \nu', \delta, \eta, \dots$: si on pose $t = \frac{(T-T_C)}{T_C}$, les exposants critiques pour une transition ferromagnétique sont données par [57] :

— L'aimantation :

$$m \propto \begin{cases} |t|^\beta, & (T < T_C) \\ |h|^\frac{1}{\delta}, & (T = T_C) \end{cases}$$

— La susceptibilité :

$$\chi \propto \begin{cases} |t|^{-\gamma}, & (T > T_C) \\ |h|^{-\gamma'}, & (T < T_C) \end{cases}$$

— La chaleur spécifique :

$$C \propto \begin{cases} |t|^{-\alpha}, & (T > T_C) \\ |t|^{-\alpha'}, & (T < T_C) \end{cases}$$

— La longueur de corrélation :

$$\xi \propto \begin{cases} |t|^{-\nu}, & (T > T_C) \\ |t|^{-\nu'}, & (T < T_C) \end{cases}$$

— La corrélation :

$$G(r) \propto \begin{cases} r^{-\tau} e^{\frac{-r}{\xi}}, & (T \neq T_C) \\ r^{-d+2-\eta}, & (T = T_C) \end{cases}$$

Où $G(r)$ est la fonction corrélation à deux points entre deux spins S_i et S_j séparés par une distance r , $G(r) = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$, d est la dimension du système et h est un champ magnétique extérieur.

Les exposants critiques jouent un rôle crucial dans l'étude des phénomènes critiques, pour estimer ces valeurs on fait appel à des méthodes de calcul numériques. Ces quantités ne sont pas tous indépendantes, elles sont reliées par relations dites lois d'échelle

qui sont données par :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{Rushbrooke}) \quad (1.18)$$

$$\beta + \gamma = \beta\delta \quad (\text{Windom}) \quad (1.19)$$

$$2 - \alpha = d\nu \quad (\text{Josefson}) \quad (1.20)$$

$$(2 - \eta)\nu = \gamma \quad (\text{Fischer}) \quad (1.21)$$

Ainsi, un point critique est donné par six exposants critiques qui sont gouvernés par quatre lois d'échelle. La donnée de deux exposants critiques détermine tous les autres exposants.

1.4 Méthodes approximatives et numérique

1.4.1 Approximation du champ moyen

L'origine de la théorie des champs moyens remonte aux travaux de P.Weiss en 1900 [58], c'est un cas particulier d'approximation basée sur une méthode variationnelle qui permet de simplifier la résolution des problèmes à N corps en réduisant l'étude à un problème d'un seul corps dont l'effet de tous les autres est approché par un seul effet moyen. En particulier, dans le modèle d'Ising, cette méthode consiste à découpler tous les spins et de négliger ainsi toutes les fluctuations, le champ local vu par chaque spin i est la somme des valeurs moyennes des autres spins. Ainsi, 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 $\langle S_j \rangle$ est uniforme. 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. Depuis 1907 l'approximation champ moléculaire de Weiss s'est généralisé au phénomène critique [59]. En revanche, les résultats obtenus par cette méthode ne dépendent pas de la dimension d du système mais dépendent seulement du nombre z de paires les plus proches voisins.

1.4.1.1 Inégalité de Gibbs-Bogoliubov

L'idée principale consiste à remplacer l'Hamiltonien exact H par un autre hamiltonien approché (ou d'essai) H_e appelé aussi hamiltonien de référence.

Si le système est en équilibre thermodynamique avec un thermostat T , la valeur moyenne approchée d'un opérateur A associé à une grandeur physique \mathcal{A} :

$$\langle \mathcal{A} \rangle_e = \text{Tr}(\rho_e A) \quad (1.22)$$

où $\rho_e = Z_e^{-1} e^{-\beta H_e}$ est l'opérateur densité associé à H_e et Z_e est la fonction de partition canonique du système de référence.

En général, il devient difficile de calculer la fonction de partition Z canonique du système d'origine de manière exacte, pour cela on se propose de chercher une expression approchée Z_e telle que :

$$\frac{Z}{Z_e} = \langle e^{-\beta(H-H_e)} \rangle_e \quad (1.23)$$

La fonction exponentielle est convexe :

$$\langle e^X \rangle_e \geq e^{\langle X \rangle_e} \quad (1.24)$$

Où X est un opérateur hermétique. Si on suppose que $[H_e, H] = 0$, l'équation (1.23) s'écrit :

$$\langle e^{-\beta(H-H_e)} \rangle_e \geq e^{\langle -\beta(H-H_e) \rangle_e} \quad (1.25)$$

Ou de façon équivalente :

$$\frac{Z}{Z_e} \geq e^{\langle -\beta(H-H_e) \rangle_e} \quad (1.26)$$

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

$$\mathcal{F} \leq \mathcal{F}_e + \beta \langle H - H_e \rangle_e \quad (1.27)$$

C'est l'inégalité de Gibbs-Bogoliubov[60–63], 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 [64] 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 [65].

1.4.1.2 Estimation variationnelle pour l'énergie libre

Pour approcher les propriétés de l'hamiltonien exacte H on cherche les paramètres variationnels qui minimisent le membre droit de l'inégalité (1.27). La méthode variationnelle consiste à choisir un système de référence régi par un ensemble d'hamiltoniens d'essai $H_e(\epsilon_1, \dots, \epsilon_p)$ dépendant d'un certains nombres de paramètres $\{\epsilon_i, i = 1, \dots, p\}$. Une meilleur approximation qui minimise l'énergie libre est donnée par l'énergie variationnelle suivante :

$$F_v = \min_{\{\epsilon_k, k=1, \dots, p\}} \{F_e + \beta \langle H - H_e(\epsilon_1, \dots, \epsilon_p) \rangle_e\} \quad (1.28)$$

1.4.1.3 Champ moyen : approche de Weiss

Considérons un système de spins en interaction décrit par l'hamiltonien d'Ising et soumis au champ magnétique longitudinal h :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.29)$$

Où les S_i sont des variables de spins prenant les deux valeurs +1 (up) et -1 (down). Les spins sont en interaction dans un réseau de Bravais[66] (c'est un réseau qui est invariant par translation des sites de spin, par exemple : Réseau carré, triangulaire, cubique simple ou à face centré, ...).

Le processus de Weiss suppose que chaque spin est soumis à un champ moyen effectif créée par les autres spins du réseau. Ceci revient à remplacer $m = \langle S_i \rangle$ par son

aimantation locale et sa fluctuation $\delta S_i = S_i - m$:

$$\begin{aligned}
 S_i S_j &= (m + \delta S_i)(m + \delta S_j) \\
 &= m^2 + m(\delta S_i + \delta S_j) + \delta S_i \delta S_j \\
 &= -m^2 + m(S_i + S_j) + \delta S_i \delta S_j
 \end{aligned} \tag{1.30}$$

L'approche de Weiss consiste à ignorer les fluctuations entre les spins (c'est à dire négliger l'écart entre la valeur du spin et sa moyenne), ce qui revient à négliger le dernier terme de l'équation (1.30) . L'approximation est d'autant meilleure si le nombre de proche voisin est grand. L'hamiltonien s'écrit donc :

$$\mathcal{H} = \frac{JNzm^2}{2} - (h + Jzm) \sum_i S_i \tag{1.31}$$

Où N est le nombre de sites du réseau, z est le nombre de spins proches voisins, l'hamiltonien peut se réécrire :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + H_m \sum_i S_i \tag{1.32}$$

avec $H_m = -(h + Jzm)$ est un facteur qui exprime la perturbation du système et décrit les interactions entre spins d'une part et du champ magnétique avec les spins d'autre part. Tout se passe comme si le spin i était soumis à un champ moyen local H_m , appelé champ moyen de Weiss ou champ moléculaire, se rajoutant au champ extérieur h .

\mathcal{H}_0 est un terme constant, qui représente la partie non perturbée du système.

L'aimantation par spin est indépendante de l'indice du réseau $\langle S_i \rangle = m, \forall i = 1, \dots, N$, elle est exprimée par

$$m = \langle S_j \rangle = \frac{\text{Tr} S_j e^{-\beta H_m \sum_i S_i}}{\text{Tr} e^{-\beta H_m \sum_i S_i}} \tag{1.33}$$

$$= \tanh(\beta Jzm + h) \tag{1.34}$$

1.4.1.4 Champ moyen : inégalité de Bogoliubov

Pour déterminer les fonctions thermodynamiques de base, on se propose d'élaborer la théorie du champ moyen en se basant sur l'inégalité de Bogoliubov-Gibbs formulée par l'expression (1.24) .

Nous reprenons l'exemple d'un système d'Ising décrit par le hamiltonien (1.29) . On considère un hamiltonien approché $\mathcal{H}_e = \lambda \sum_i S_i$ avec λ un paramètre qu'on déterminera par la suite. La fonction de partition du système correspondant est donnée par.

$$Z_e = \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}_e}) = (e^{-\beta\lambda} + e^{\beta\lambda})^N = [2 \cosh(\beta\lambda)]^N$$

L'énergie libre d'essai $F_e = -k_\beta T \ln(Z_e) = -Nk_\beta \ln(2 \cosh(\beta\lambda))$

Une meilleure approximation de l'énergie libre exacte F en fonction de l'énergie libre approchée F_e est donnée par l'inégalité de Gibbs-Bogoliubov :

$$F \leq F(\lambda) = F_e + \beta \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_e \rangle_e \quad (1.35)$$

$$F \leq F(\lambda) = F_e - \frac{zJNm^2}{2} + (\lambda - h)Nm \quad (1.36)$$

ce qui revient à minimiser $F(\lambda)$ par rapport au paramètre λ :

$$\frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} = 0 \quad (1.37)$$

puisque $\frac{\partial F_e}{\partial \lambda} = -Nm$, on a $\lambda_{min} = Jzm + h$. Par conséquent l'aimantation par spin est donnée par

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F_e}{\partial \mathcal{H}_e} \quad (1.38)$$

$$= \frac{\lambda_{min} - h}{J} = \tanh(\beta Jzm + h). \quad (1.39)$$

cette relation est identique à celle retrouvée par l'approche de Weiss

1.4.2 Méthode du champ effectif

Nous introduisons cette méthode en traitant un exemple d'un système d'Ising de spin-1/2. Considérons un système de N spins, $S = \pm\frac{1}{2}$, placés sur un réseau cristallin soumis à un champ magnétique extérieur h . Le système est décrit par le hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.40)$$

J_{ij} est facteur d'échange entre les spins proches voisins le hamiltonien peut être scindé en deux parties :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_i + \mathcal{H}' \quad (1.41)$$

où \mathcal{H}_i est un hamiltonien qui décrit toutes les interactions du spin centrale S_i avec ses proches voisins et avec le champ magnétique extérieur, \mathcal{H}' contient toutes les autres interactions possibles.

$$\mathcal{H}_i = -s_i \left(\sum_{j=1}^z J_{ij} S_j + h \right) \quad (1.42)$$

l'aimantation par spin est donnée par l'identité de Callen [67]

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_i(S_i) \exp(-\beta \mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta \mathcal{H}_i)} \right\rangle \quad (1.43)$$

où Tr_i est la trace sur toutes les valeurs de spin du site centrale $S_i = \pm\frac{1}{2}$ et $\langle \rangle$ est la moyenne standard sur l'ensemble canonique. En performant le calcul sur tous les états possibles du spin on trouve :

$$m = \langle S_i \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{\beta}{2} \sum_{j=1}^z (J_{ij} S_j + h) \right) \right\rangle \quad (1.44)$$

Pour mettre en œuvre la méthode du champ effectif on peut utiliser la technique de l'opérateur différentiel proposé par Honmura et Keneyoshi en 1979 [68]. Pour ce faire, considérons un opérateur différentiel linéaire $\mathcal{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$ qui agit sur une fonction $\varphi(x)$ comme suit :

$$e^{a\mathcal{D}_x} \varphi(x) = \varphi(x + a) \quad (1.45)$$

a est un paramètre arbitraire.

En utilisant cette relation (1.45) pour réécrire l'équation (1.44) sous la forme suivante :

$$m = \langle S_i \rangle = \left\langle e^{\frac{\beta}{2} J \sum_{j=1}^z S_j \mathcal{D}_x} \right\rangle \tanh(x + h')|_{x=0} \quad (1.46)$$

avec $h' = \frac{\beta h}{2}$ de manière équivalente on montre qu'on a

$$m = \langle S_i \rangle = \left\langle \prod_{j=1}^z e^{\frac{\beta}{2} J S_j \mathcal{D}_x} \right\rangle \tanh(x + h')|_{x=0} \quad (1.47)$$

Pour achever les calculs, on utilise l'identité exacte de Van Der Waerden(Réf : [69])

$$e^{\alpha S_i} = \cosh a + S_i \sinh b \quad (1.48)$$

pour le spin $S_i = \pm \frac{1}{2}$, $\cosh a = \cosh(\frac{\alpha}{2})$ et $\sinh b = 2 \sinh(\frac{\alpha}{2})$

En insérant ces résultats dans (1.47), on trouve que l'interaction moyenne est donnée par :

$$m = \langle S_i \rangle = \left\langle \prod_{j=1}^z \left(\cosh\left(\frac{\beta J \mathcal{D}_x}{2}\right) + 2S_i \sinh\left(\frac{\beta J \mathcal{D}_x}{2}\right) \right) \right\rangle \tanh(x + h')|_{x=0} \quad (1.49)$$

$$= \left\langle \left[\cosh\left(\frac{\beta J \mathcal{D}_x}{2}\right) + 2S_i \sinh\left(\frac{\beta J \mathcal{D}_x}{2}\right) \right]^z \right\rangle \tanh(x + h')|_{x=0} \quad (1.50)$$

Dans le but de développer cette expression, on utilise l'approximation de Zernike [70] qui permet de découpler la corrélation entre le spin central S_i et ses proches voisins $S_{i_1}, S_{i_2}, \dots, S_{i_k}$ et on écrit :

$$\langle S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_k} \rangle \approx \langle S_{i_1} \rangle \langle S_{i_2} \rangle \dots \langle S_{i_k} \rangle \quad (1.51)$$

d'autre part l'invariance par translation permet de prendre la même aimantation pour tous les spins S_{i_k}

$$m = \langle S_{i_1} \rangle = \langle S_{i_2} \rangle = \dots = \langle S_{i_k} \rangle \quad (1.52)$$

En utilisant l'analyse combinatoire, l'aimantation moyenne peut s'exprimer comme une somme de puissance en m , on obtient donc une équation d'état :

$$m = \sum_{i=1}^z \binom{z}{k} A_k m^k \quad (1.53)$$

les coefficients A_k dépendent de la température et du champ magnétique extérieur et ils sont exprimés par :

$$A_k = A_k(t, \tilde{h}) = 2^{k-z-1} \sum_{i=0}^{z-k} \sum_{j=0}^k \binom{z-k}{i} \binom{k}{j} \tanh \left[\frac{t}{4} (z - 2(i+j) + 2\tilde{h}) \right] \quad (1.54)$$

$t = \beta J$ et $\tilde{h} = h/J$ sont respectivement la température réduite et le champ magnétique réduit.

Il est à noter que Boccara et Benyoussef [71; 72] ont développé une méthode portant le nom de l'amas fini, basée sur l'idée du champ effectif, c'est une technique qui a la simplicité de la méthode du champ moyen mais qui donne de meilleurs résultats qualitatifs et quantitatifs. Elle s'applique aux systèmes dans lesquels le désordre est décrit par des variables aléatoires discrètes [73].

1.4.3 Méthodes numériques : Technique Monte Carlo

La technique de simulation Monte Carlo est l'une des méthodes numériques les plus utilisées pour modéliser les systèmes complexes en vue de comprendre leurs comportements vis à vis des paramètres et des variables aléatoires qui caractérisent ces systèmes. La simulation MC est basée sur la résolution numérique des systèmes en observant leur évolution dans le temps jusqu'à ce que l'équilibre soit atteint. Dans le domaine de la physique statistique, la simulation MC est souvent basée sur un algorithme d'échantillonnage de type Metropolis pour générer une chaîne de Markov. Cette approche consiste à procéder en deux étapes pour passer d'un état de la chaîne au suivant : une première étape de sélection d'un nouvel état, suivie d'une deuxième étape

d'acceptation (ou de refus).

L'algorithme de Metropolis peut être résumé dans le contexte de la simulation d'un système de spins d'Ising comme suit :

1. choisir une configuration initiale $\{S\}_i = (S_1, \dots, S_k, \dots, S_N)$ avec une probabilité $P_{\{S\}_i}$
2. choisir de manière aléatoire un spin S_k selon une distribution uniforme en envisageant un changement d'état de ce spin (par exemple retournement). On se retrouve, donc, avec une nouvelle configuration $\{S\}_f = (S_1, \dots, S_{k'}, \dots, S_N)$ avec une probabilité de transition $\omega(\{S\}_i \rightarrow \{S\}_f)$
3. Calculer la variation d'énergie entre les deux configurations $\Delta E = (E_{\{S\}_f} - E_{\{S\}_i})$
4. Si $\Delta E \leq 0$, on accepte la nouvelle état
5. Si $\Delta E > 0$, on génère un nombre aléatoire η selon une loi de distribution uniforme dans l'intervalle $[0, 1]$:
 - si $\eta < \omega(\{S\}_i \rightarrow \{S\}_f)$ la nouvelle configuration est acceptée
 - si $\eta > \omega(\{S\}_i \rightarrow \{S\}_f)$ la nouvelle configuration est rejeté et on reprend à partir de l'étape (2)
6. déterminer les valeurs numériques des grandeurs physiques, par exemple l'aimantation moyenne M , l'énergie E , la susceptibilité χ, \dots

La chaîne de Markov doit vérifier deux propriétés importantes.

- **l'ergodicité** : afin de s'assurer que la chaîne parcourt l'ensemble de tous les états possibles pour que la valeur moyenne d'une grandeur physique soit calculée sur un très grand nombre de mesures et pendant un temps suffisamment long.
- **le principe de l'équilibre détaillé** [74]

$$P_{\{S\}_i} w_{\{S\}_j} = P_{\{S\}_j} w_{\{S\}_i} \quad (1.55)$$

Ceci signifie que le nombre de transition de l'état i vers l'état j est en moyenne égal aux nombres de transitions de l'état j vers l'état i

Dans le cas de la distribution de Boltzman cette condition s'écrit :

$$\frac{P\{S\}_i}{P\{S\}_j} = e^{-\beta(E\{S\}_j - E\{S\}_i)} \quad (1.56)$$

Dans le cas d'un système de N spins d'Ising, les quantités physiques qu'on propose de calculer généralement sont :

— l'aimantation :

$$M = \frac{\sum_{i=1}^N S_i}{N} \quad (1.57)$$

— la susceptibilité magnétique :

$$\chi = \beta N (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (1.58)$$

la chaleur spécifique :

$$\frac{\beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)}{N} \quad (1.59)$$

Chapitre 2

Etude statique des transitions de phases des systèmes magnétiques mixtes en présence d'un champ cristallin aléatoire

Dans ce chapitre, on se propose d'étudier les comportements thermique et magnétique d'un système d'Ising mixte de spin $(1, 3/2)$ en présence d'un champ cristallin aléatoire en utilisant la méthode de champ moyen basé sur le principe de Gibbs-Bogoliubov pour l'énergie libre [60–63]. Nous allons examiner les diagrammes de phases, les points critiques, les points de compensations et le phénomène de réentrance.

2.1 Introduction

Plusieurs efforts ont été déployés au cours de ces dernières décennies pour étudier les matériaux magnétiques moléculaires [75–77]. Ils sont constitués par plusieurs sous réseaux dont les sites sont occupés par des atomes non identiques. Ces matériaux, sont caractérisés par un ordre magnétique qui joue un rôle fondamental dans la synthèse et l’analyse du comportement thermodynamique et magnétique. En particulier, les moments d’un composé ferrimagnétique, substance qualifiée antiferromagnétique avec les moments magnétiques de spins opposés n’ont pas la même norme, peuvent se compenser pour donner un moment résultant nul à une température inférieure à la température critique. De tel point est appelé point de compensation (ou température de compensation) [7].

Théoriquement, les propriétés physiques des systèmes mixtes ont été étudiées en utilisant plusieurs méthodes et techniques à savoir, méthode du champ effectif [11–16], approximation du champ moyen (MFA) [18; 78], la méthode du variation du cluster [19] et Les simulations Monte-Carlo [20–22]. La formulation exacte des spins mixtes spin-1 et spin-3/2 des systèmes ferrimagnétiques dans le réseau de Bethe utilisant les équations de récursion exacte [23; 24], la méthode de groupe de renormalisation Migdal Kadanoff [25; 26] et la fonction Green [27].

2.2 Modèle et théorie

Le système étudié est constitué par deux sous réseaux interpénétrant L_A et L_B occupés successivement par les spins $S^a = 0, \pm 1$ et $S^b = \pm 1, \pm 3/2$. On suppose que les interactions d’échange se font entre les paires les plus proche voisins.

l’interaction entre les spins est régi par l’Hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a S_j^b + \sum_{i=1}^N \Delta_i ((S_i^a)^2 + (S_i^b)^2) \quad (2.1)$$

$\langle i, j \rangle$ indique que la somme s'effectue sur tous les premiers paires de spins proches voisins. \mathcal{J} est le facteur qui représente l'interaction d'échange entre les spins des sous réseaux L_A et L_B . Pour favoriser l'interaction antiferromagnétique on suppose que $\mathcal{J} > 0$. Δ_i est un champ cristallin aléatoire au site i , distribué selon la loi de probabilité [79–82]

$$\mathcal{P}(\Delta_i) = 1/2 [\delta(\Delta_i - \Delta(1 + \alpha)) + \delta(\Delta_i - \Delta(1 - \alpha))] \quad (2.2)$$

avec Δ est une constante réelle et α est un paramètre positif sans dimension qui mesure l'effet de la fluctuation du champ cristallin.

pour résoudre l'équation (2.1) on utilise le principe variationnel basé sur l'inégalité de Bogoliubov-Gibbs [60–63], l'énergie libre par site est déterminée comme suit :

$$\mathcal{F} \leq \phi = \mathcal{F}_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \quad (2.3)$$

où \mathcal{F} et \mathcal{F}_0 sont respectivement les énergies libres associées aux Hamiltoniens \mathcal{H} et \mathcal{H}_0 , avec \mathcal{H}_0 est l'Hamiltonien du système de référence et $\langle \dots \rangle$ désigne la moyenne thermique calculée sur l'ensemble défini par \mathcal{H}_0

le hamiltonien de référence (ou effectif) est donné par :

$$\mathcal{H}_0 = h_a \sum_1^N S_i^a + h_b \sum_1^N S_i^b + \sum_i \Delta_i [(S_i^a)^2 + (S_i^b)^2] \quad (2.4)$$

avec h_a et h_b sont les champs moléculaires associés aux paramètres d'ordre m_a et m_b , il vient

$$h_a = \mathcal{J} \sum_{j=1}^z \langle S_j^b \rangle = \mathcal{J} z m_b \quad (2.5)$$

$$h_b = \mathcal{J} \sum_{j=1}^z \langle S_j^a \rangle = \mathcal{J} z m_a \quad (2.6)$$

où z est le nombre des paires voisins les plus proches.

La fonction de partition associée à l'hamiltonien \mathcal{H}_0 est donnée comme par :

$$\mathcal{Z}_0 = \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}_0}) \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} &= [1 + 2e^{\beta\Delta_i} \cosh(\beta h_a)]^N \\ &\times \left[2e^{-\frac{9}{4}\beta\Delta_i} \cosh\left(\frac{3}{2}\beta h_b\right) + 2e^{-\frac{1}{4}\beta\Delta_i} \cosh\left(\frac{1}{2}\beta h_b\right) \right]^N \end{aligned} \quad (2.8)$$

En précisant que ; $\beta = \frac{1}{k_\beta T}$ où T est la température absolue et k_β est la constante de Boltzman fixée à l'unité.

L'énergie libre \mathcal{F} du système, moyennée sur le désordre est définie par :

$$\bar{\phi} = \int \phi \mathcal{P}(\Delta_i) d\Delta_i \quad (2.9)$$

Après intégration, l'énergie libre par spin s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\phi}}{N} = & - \frac{1}{\beta} \left[\ln \left(1 + 2e^{-\frac{d(1+\alpha)}{t}} \cosh \frac{zm_b}{t} \right) + \ln \left(1 + 2e^{-\frac{d(1-\alpha)}{t}} \cosh \frac{zm_b}{t} \right) \right. \\ & + \ln \left(2e^{-\frac{9d(1+\alpha)}{4t}} \cosh \frac{3zm_a}{t} + 2e^{-\frac{d}{4t}} \cosh \frac{zm_a}{t} \right) \\ & + \left. \ln \left(2e^{-\frac{9d(1-\alpha)}{4t}} \cosh \frac{3zm_a}{t} + 2e^{-\frac{d}{4t}} \cosh \frac{zm_a}{t} \right) \right] \\ & + z\mathcal{J}m_a m_b \end{aligned} \quad (2.10)$$

où $d = \frac{\Delta}{\mathcal{J}}$ et $t = \frac{T}{\mathcal{J}}$ indiquent respectivement les expressions réduites du champ cristallin et de la température.

Afin d'étudier l'aimantation du système, les paramètres d'ordres m_a et m_b sont définis en minimisant l'énergie libre (2.10) par rapport aux champs moléculaires h_a et h_b il vient :

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial h_a} = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial h_b} = 0 \quad (2.12)$$

$$m_a = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{2 \sinh(\frac{zm_b}{t})}{2 \cosh(\frac{zm_b}{t}) + \exp \frac{d(1+\alpha)}{t}} + \frac{2 \sinh(\frac{zm_b}{t})}{2 \cosh(\frac{zm_b}{t}) + \exp \frac{d(1-\alpha)}{t}} \right\} \quad (2.13)$$

$$m_b = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{\frac{3}{2} \sinh(\frac{3zm_a}{2t}) + \frac{1}{2} \exp \frac{2d(1+\alpha)}{t} \sinh(\frac{zm_a}{2t})}{\cosh(\frac{3zm_a}{2t}) + \exp \frac{2d(1+\alpha)}{t} \cosh(\frac{zm_a}{2t})} \right\} \quad (2.14)$$

$$-\frac{1}{2} \left\{ \frac{\frac{3}{2} \sinh(\frac{3zm_a}{2t}) + \frac{1}{2} \exp \frac{2d(1-\alpha)}{t} \sinh(\frac{zm_a}{2t})}{\cosh(\frac{3zm_a}{2t}) + \exp \frac{2d(1-\alpha)}{t} \cosh(\frac{zm_a}{2t})} \right\}$$

Avant de se lancer dans l'analyse des comportements thermique et magnétique du système on détermine le diagramme de phase de l'état fondamental du système, pour ce faire on cherche les solutions stables à basse température des équations (2.13) et (2.14) en fonctions du paramètre α . On distingue cinq solutions stables : $(m_a, m_b) = \{(0, 0), (\frac{1}{2}, -1), (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), (1, -\frac{3}{2}), (1, -1)\}$.

En comparant les énergies de toutes les configurations, nous avons établi le diagramme de phase à l'état fondamental dans le plan (d, α) comme le montre la Fig. (2.1) :

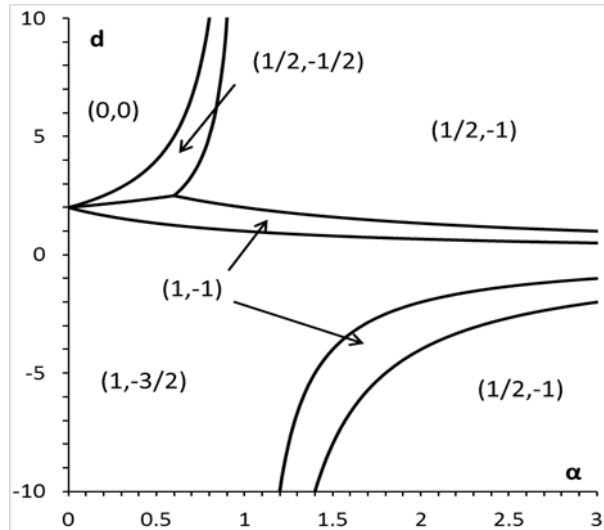


FIGURE 2.1 – Diagramme de phases de l'état fondamental établi à $T = 0$ dans le plan (d, α) .

on distingue cinq cas :

- $\alpha = 0$, une transition de premier ordre apparait entre les phases $(1, -\frac{3}{2})$ et $(0, 0)$ au point $d = +2$,
- $0 < \alpha < 0.6$, trois lignes de transitions de premier ordre d'équations $d = \frac{2}{1 + \alpha}$, $d = \frac{2}{3 - \alpha}$ et $d = \frac{2}{1 - \alpha}$ séparant respectivement les phases $(1, -\frac{3}{2})$ et $(1, -1)$, $(1, -1)$ et $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ et $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ avec la phase paramagnétique $(0, 0)$.
- $0.6 < \alpha < 1$, En plus des phases citée ci-dessus, il y a apparition de la phase $(\frac{1}{2}, -1)$ séparant les phases $(1, -1)$ et $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ respectivement par les lignes de transitions de premier ordre d'équations $d = \frac{4}{1 + \alpha}$, $d = \frac{1}{1 - \alpha}$.
- $\alpha = 1$, les phases paramagnétique et ferrimagnétique $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ disparaissent.
- $\alpha > 1$, les phases $(1, -\frac{3}{2})$, $(1, -1)$ et $(\frac{1}{2}, -1)$, qui existent déjà pour les valeurs positives du champ cristallin, apparaissent aussi pour les valeurs négatives. Elles sont séparées respectivement par les lignes de transitions de premier ordre d'équations $d = \frac{2}{1 - \alpha}$ et $d = \frac{4}{1 - \alpha}$.

2.3 Diagrammes de Phases et discussions

Dans ce paragraphe, on se propose d'étudier les diagrammes de phase dans le plan (t_c, d) à température finie en utilisant la méthode du champs moyen. Pour ce faire, on résout numériquement les équations (2.13) et (2.14) tout en considérant les solutions qui minimisent l'énergie libre (2.10). Les diagrammes de phase trouvés sont classés selon la présence ou l'absence de la phase paramagnétique à très basse température et aussi par l'existence ou non des points tricritiques. Ainsi, on distingue deux familles (ou topologies) de diagrammes de phases à savoir $\alpha < 1$ ou $\alpha \geq 1$.

1. pour $\alpha < 1$, la phase paramagnétique apparait à basse température. Les diagrammes de phases sont présentés dans la (Fig.2.2) pour différentes valeurs du paramètre α , les lignes continues séparent deux phases différentes où le paramètre d'ordre varie de façon continue, alors que les lignes discontinues représentent

les transitions du premiers ordre qui s'accompagnent d'une discontinuité du paramètre d'ordre. La **Fig. (2.2-a)** donne le modèle de Blume-Capel dans lequel les lignes de transitions de premier et second ordres sont reliées par un point tricritique de coordonnées $(t = 1.20, d = 1.97)$. Un zoom sur ce point Fig. (2.2-d) montre qu'une ligne de transition de premier ordre survient pour séparer deux phases antiferromagnétiques $(1, -1)$ et $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$. Cette transitions apparait entre $d = 1.974$ et $d = 1.995$ et donne lieu à un point triple et un point isolé de coordonnées respectives $(t = 0.43, d = 1.995)$ et $(t = 0.78, d = 1.974)$. Ceci est due à l'excitation thermique.

En augmentant la valeur du paramètre α . Les **Figs. (2.2b-e)** montrent que le point triple disparaît alors qu'il y a apparition de deux lignes de transitions de premier ordre qui se terminent respectivement par deux points isolés $(t = 0.02, d = 1.428)$ et $(t = 0.55, d = 2.29)$. Elles séparent la phase $(1, -1)$ et les deux autres $(1, -\frac{3}{2})$ et $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$. Cette topologie est observée dans l'intervalle $0 < \alpha < 0.6$.

Pour $0.6 < \alpha < 1$, on constate à très basse température, l'apparition d'une phase ferrimagnétique $(\frac{1}{2}, -1)$ et des lignes de transitions de premier ordre. Dans la (**Fig. 2.2(c,f)**), on observe l'existence de trois lignes de transitions du premier ordre qui se terminent par des points critiques isolés de coordonnées $(t = 0.06, d = 1.2)$ $(t = 0.027, d = 2.45)$ et $(t = 0.027, d = 2.8)$.

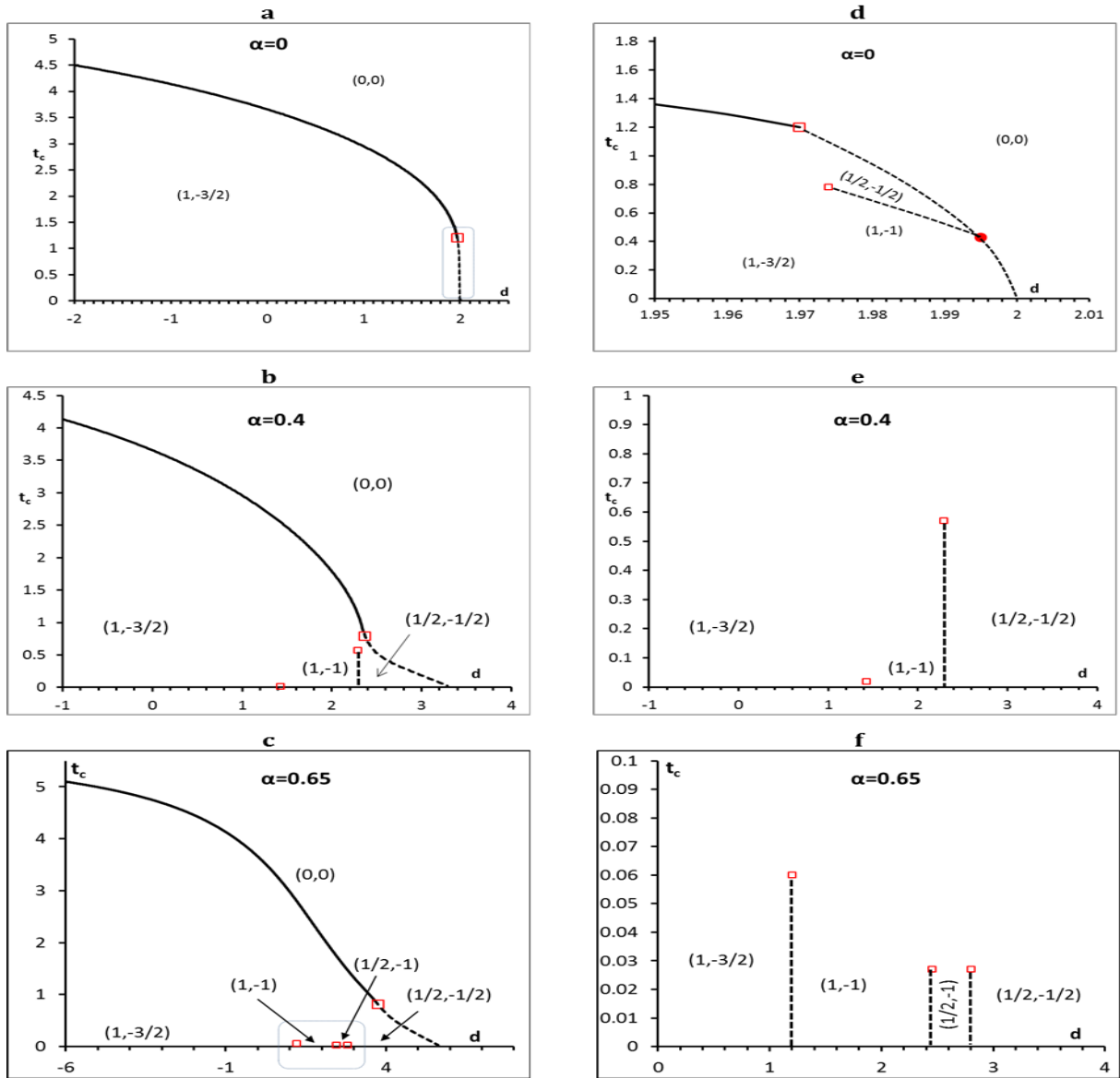


FIGURE 2.2 – la première topologie des diagrammes de phases, tracés dans le plan $(d = \Delta/J, t = T/J)$, pour $\alpha = 0, 0.4$ et $\alpha = 0,65$ La température critique réduite tracée en fonction du champ cristallin réduit d pour les valeurs de $\alpha = 0(a), 0.4(b), 0.65(c)$. Les points tricritiques et isolés sont représentés successivement par des grands et petits carrés. Les points triples sont indiqués par des cercles pleins.

2. $\alpha \geq 1$, les diagrammes de phases sont obtenus dans la Fig. 2.3. Pour $\alpha = 1$ et à basse température la phase paramagnétique disparaît et deux lignes de transitions du premier ordre apparaissent. Ces lignes sont terminées par des points critiques isolés de coordonnées $(t = 0.021, d = 1)$ $(t = 0.014, d = 2)$ séparant respective-

ment les phases $(1, -\frac{3}{2})$, $(1, -1)$ et $(\frac{1}{2}, -1)$, Fig. 2.3(a,d) concernant le cas $\alpha > 1$, les phases $(1, -1)$ et $(\frac{1}{2}, -1)$ apparaissent à basse température aussi bien pour les valeurs négatives que positives du champs cristallin comme le montre les figures Fig. 2.3(b,e) pour $\alpha = 1.5$. Par ailleurs, le système présente, à très basse température, quatre lignes de transitions de premier ordre terminées par quatre points isolés. Les phases $(1, -\frac{3}{2})$ et $(\frac{1}{2}, -1)$ sont séparées à gauche et à droite de la phase $(1, -1)$, respectivement, par des lignes de transitions de premier ordre terminées en $(t = 0.021, d = -4)$ et $(t = 0.014, d = 1.6)$. En augmentant la température, le passage devient continu. Il est important de noter que le phénomène de réentrance se manifeste, à haute température, pour les valeurs positives et négatives du champ cristallin (**Fig.2.3**)**b**.

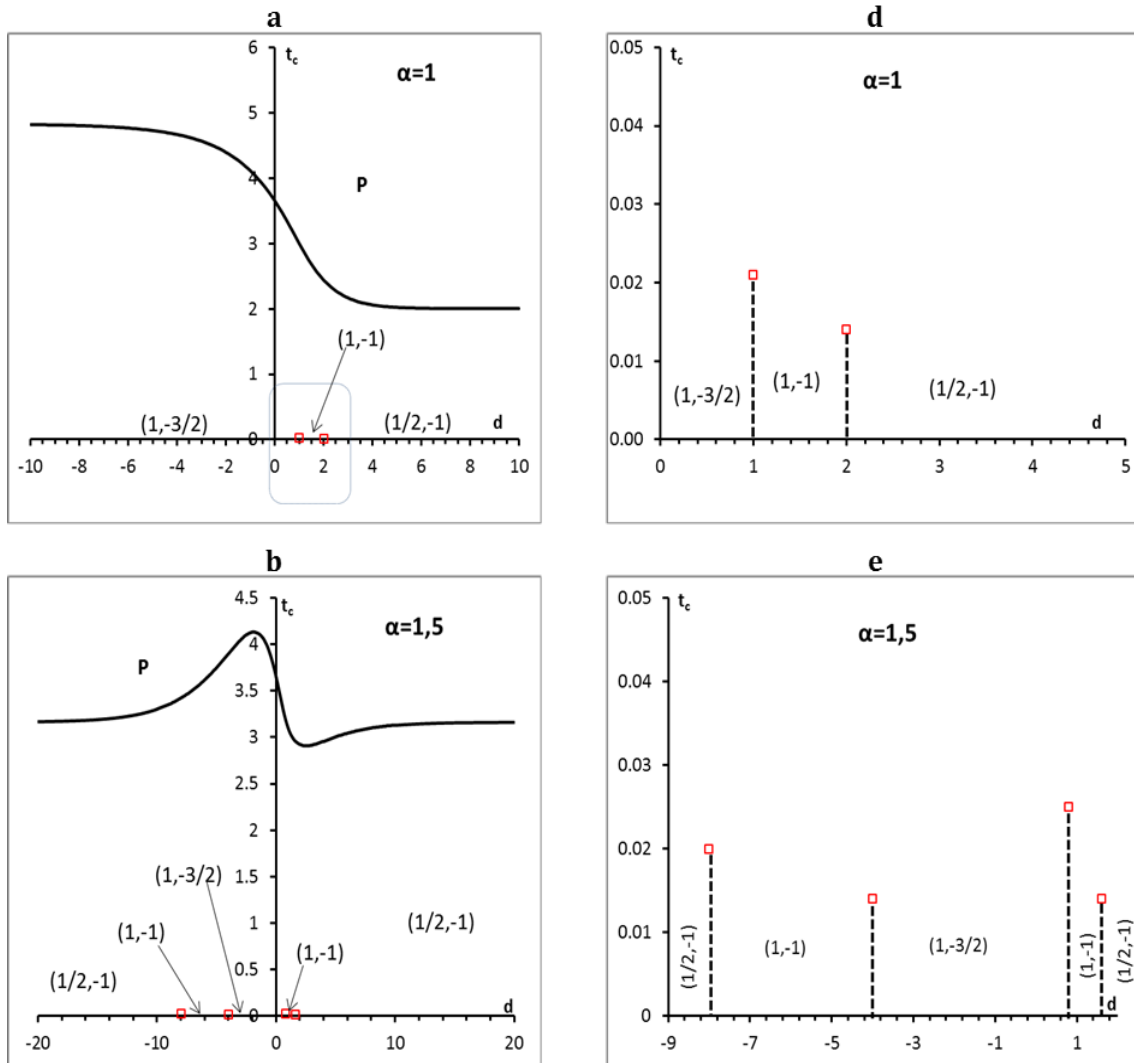


FIGURE 2.3 – la deuxième topologie des diagrammes de phases, tracés dans le plan $(d = \Delta/J, t = T/J)$, pour $\alpha = 1$ et $\alpha = 1, 5$

2.4 Les propriétés magnétiques

Dans cette section on s'intéresse à l'étude de l'influence de la température et du champ cristallin sur le comportement magnétique du système, pour cela on visualise les aimantations partielles m_a , m_b et totale M pour deux valeurs $\alpha = 0.65$ $\alpha = 1.5$. Les courbes de la **Fig.(2.4)a** montrent qu'à très basse température, le système est en parfaite harmonie avec l'état fondamental (**Fig.2.1**) et les diagrammes de phase

(**Fig.2.2**)c-f. En augmentant la température, les aimantations partielles m_a , m_b diminuent et s'annulent à des températures critiques. Les valeurs de ces températures diminuent quand la valeur du champ cristallin réduit d augmente. D'autre part, pour vérifier les diagrammes de phases (**Fig.2.2**)f au voisinage des points critiques isolés, on examine la variation des aimantations m_a et m_b en fonction du champ cristallin réduit à deux températures $t = 0,017$ et $t = 0.063$ pour $\alpha = 0.65$,**Fig.(2.4(b,c))**. On remarque ainsi que le passage d'une phase à une autre, à très basse température ($t = 0,017$), est discontinu, au fur et à mesure quand on augmente la température ($t > 0.063$) le passage entre les phases devient continu(**Fig.2.4c**).

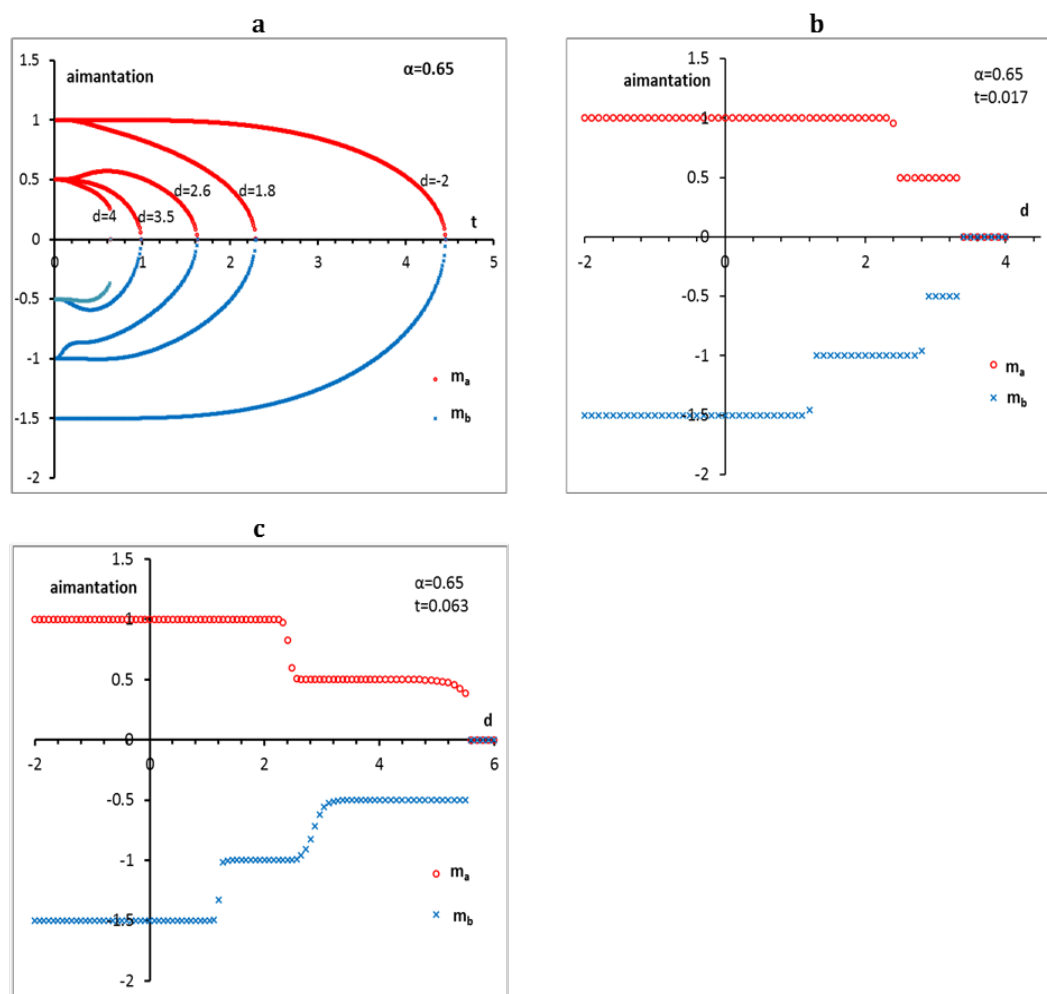


FIGURE 2.4 – (a) Les aimantations partielles m_a et m_b en fonction de la température pour $\alpha = 0.65$ et pour une série de valeurs du champ cristallin. (b),(c) Les aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin tracées pour $\alpha = 0.65$ et pour deux valeurs de températures $t = 0,017$ et $t = 0.063$

D'autre part, les **Fig. (2.5b)** et **Fig. (2.5c)**, tracées pour $\alpha = 1.5$, montrent que les aimantations m_a et m_b varient respectivement de manière discontinue si on se place au dessous de la température du point critique isolé ($t = 0.017$) ou continue, si on se place au dessus de la température du point critique isolé ($t = 0.1$).

Afin d'apporter plus de clarté à propos du phénomène de réentrance observé dans la **Fig. (2.3b)**, on propose de faire une exploration des aimantations partielles et totale en fonction du champ cristallin à des températures élevées $t = 3$ **Fig. (2.6b)**, cette

figure montre qu'il ya deux phases ordonnées séparées par une phase désordonnée (paramagnétique). Si on augmente d'avantage la température, $t = 4$, on obtient un comportement de réentrance opposé, c'est à dire, deux phases paramagnétiques séparées par une phase ordonnée **Fig. (2.6a)**. Il est important d'ajouter que le phénomène de réentrance dépend fortement du paramètre α et apparait seulement dans l'intervalle $1 < \alpha \leq 2.35$.

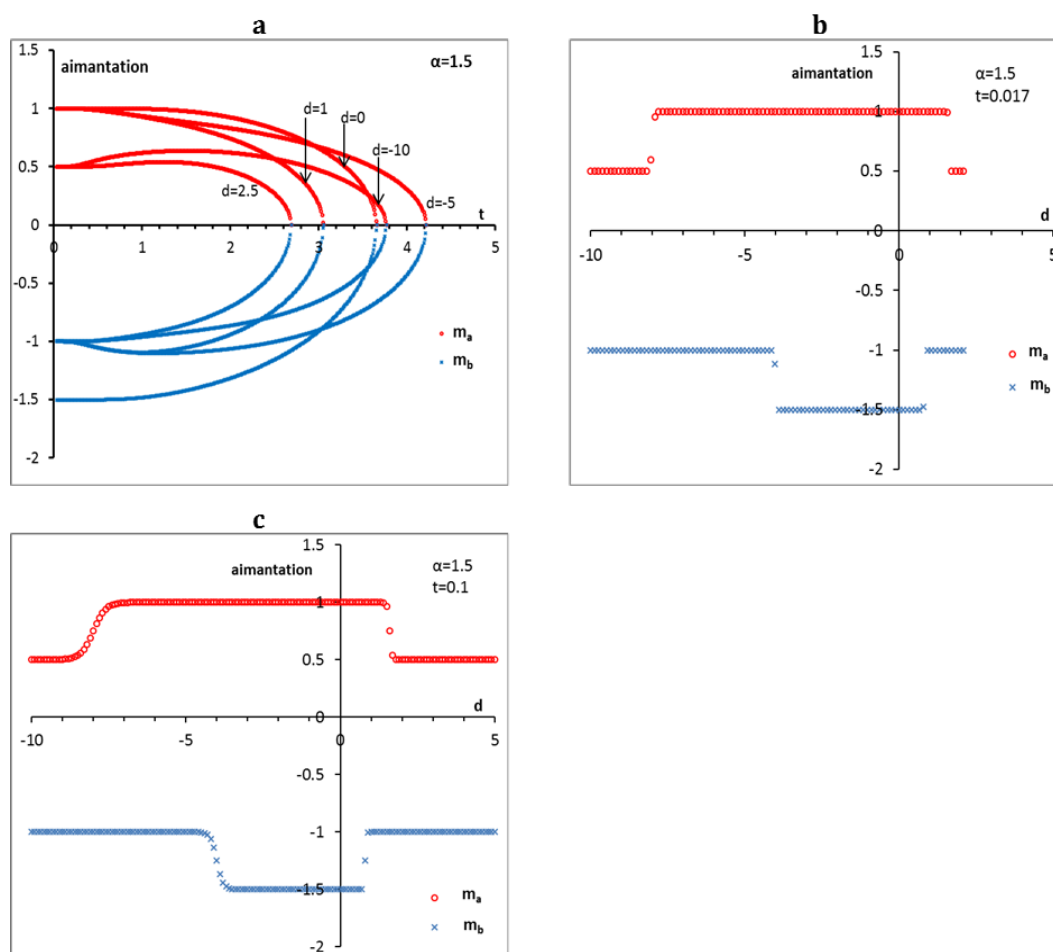


FIGURE 2.5 – (a) Variation des aimantations partielles m_a et m_b en fonction de la température pour des valeurs de champ cristallin $d = 2.5, 1, 0, -10, -5$, (b) (c) Les aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin tracées pour $\alpha = 1.5$ et pour deux valeurs de températures $t = 0, 017$ et $t = 0.1$

Dans le but de compléter notre étude, nous avons également mis en évidence

l'existence des températures de compensation, au dessous de la température critique T_c , pour lesquelles l'aimantation totale $M = (m_a + m_b)/2$ est égale à zéro. A cette température, les moments magnétiques des sous réseaux se compensent complètement. Dans notre cas, le phénomène de compensation apparait dans l'intervalle $0 \leq \alpha \leq 0.3$.

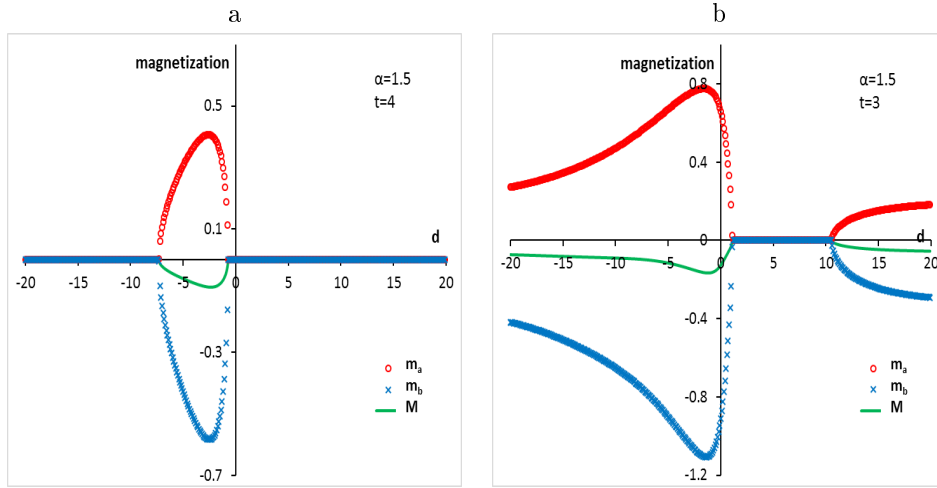


FIGURE 2.6 – Les aimantations m_a , m_b en fonction du champ cristallin réduit pour $\alpha = 1.5$ et $t = 3$. (a) comportement opposé de réentrance, (b) comportement normale de réentrance

Dans la **Fig. (2.7)**, on trace la température de compensation réduite $t_{comp} = T_{com}/J$ en fonction du champ cristallin réduit d pour une série de valeurs du paramètre $\alpha = 0, 0.1, 0.2$ et 0.3 . On remarque que chaque courbe a un maximum qui augmente avec les faibles valeurs de α . Ces points sont donnés par les couples $(t_{comp} = 1.017, d = 1.95), (t_{comp} = 0.984, d = 1.962), (t_{comp} = 0.878, d = 2.011)$ et $(t_{comp} = 0.637, d = 2.13)$, pour $\alpha = 0, 0.1, 0.2, 0.3$, respectivement.

Par ailleurs, le nombre de points de compensation présenté par le modèle dépend essentiellement des valeurs du paramètre α et du champ cristallin d , en effet pour $\alpha = 0.1$ et $d = 1.965$, le système possède deux points de compensations données respectivement par leurs température $t_{comp1} = 0.62$ et $t_{comp2} = 0.86$ **Fig. (2.8b)**. On peut obtenir un seul point de compensation $\alpha = 0.3$ et $d = 2.1$ **Fig.(2.8a)**. Il est important de noter que le système peut présenter trois points de compensations mais on a omis ce résultat car les amplitudes des aimantations partielles en ce point sont

très faibles.

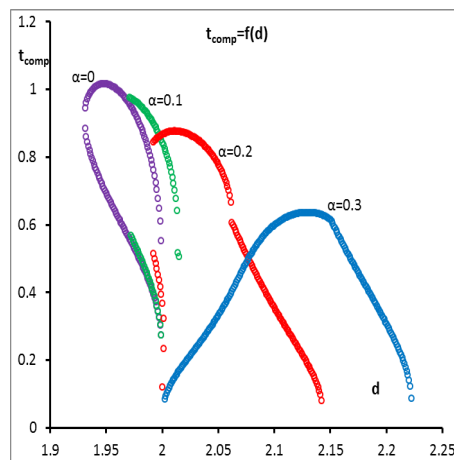


FIGURE 2.7 – Température de compensation réduite en fonction du champ cristallin réduit selon une série de valeurs de paramètre $\alpha = 0, 0.1, 0.2, 0.3$,

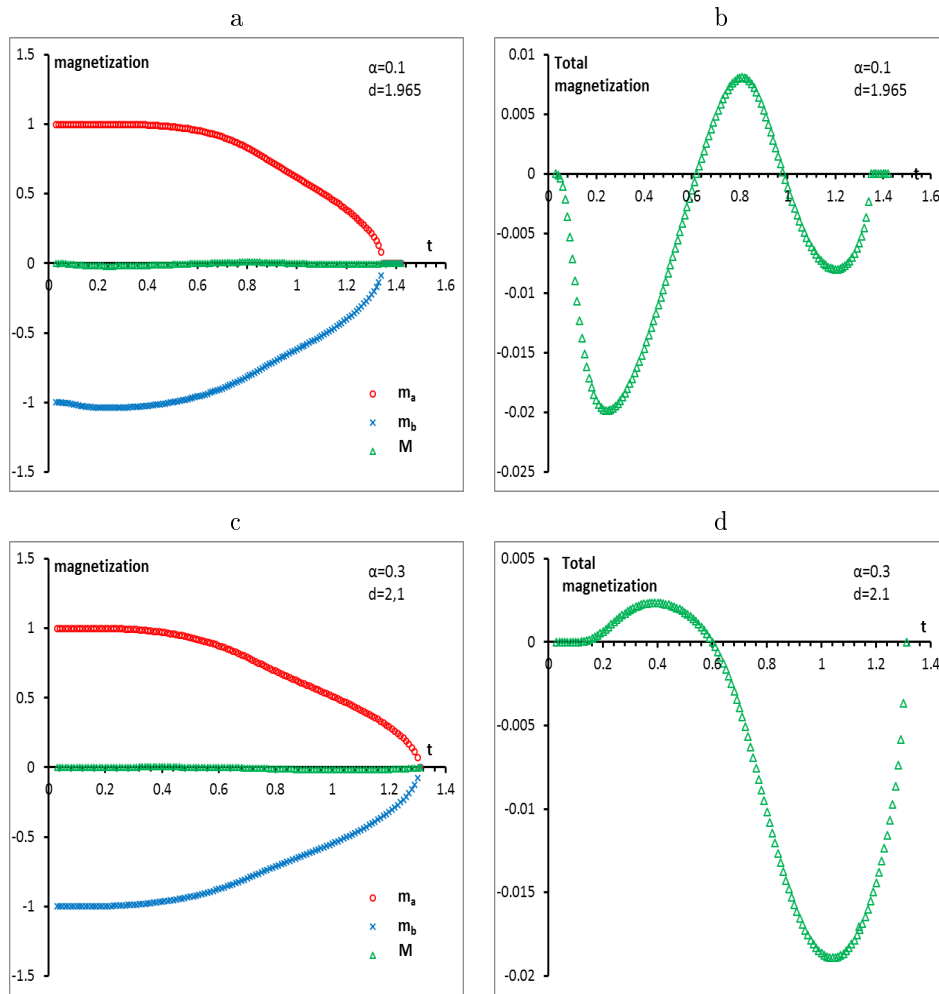


FIGURE 2.8 – (a),(c) Variation des aimantations partielles m_a , m_b et $(m_a + m_b)/2$ et totale en fonction de la température (b) $M = 0$ deux points de compensation, (d) $M = 0$, un seul point de compensation

Par ailleurs, puisque l'interaction d'échange \mathcal{J} entre les deux sous réseaux est positive et ce, pour favoriser l'interaction antiferromagnétique, il est intéressant de donner une classification de Néel [7; 83–85] qui consiste à visualiser le comportement de l'aimantation totale en fonction de la température pour des valeurs fixes du paramètre α et une série de valeurs du champ cristallin réduit Fig. 2.10. Cette représentation permet de prédire l'existence des points de compensation.

Les courbes de Néel de type Q et R sont observées pour $\alpha \geq 0$ Fig. (2.9a,e). les courbes de type L se manifestent pour $\alpha > 0$, Fig. (2.9b). Le type S apparait pour des valeurs

négative du champ cristallin comme il est représenté par la Fig. **(2.9e)** pour $\alpha = 1.5$ et $d = -3.5$. Les courbes de type W **Fig. (2.9a)** permettent de prédire l'existence de deux points de compensation, ils apparaissent dans l'intervalle $0 \leq al \leq 0.2$ pour des valeurs précises du champ cristallin.

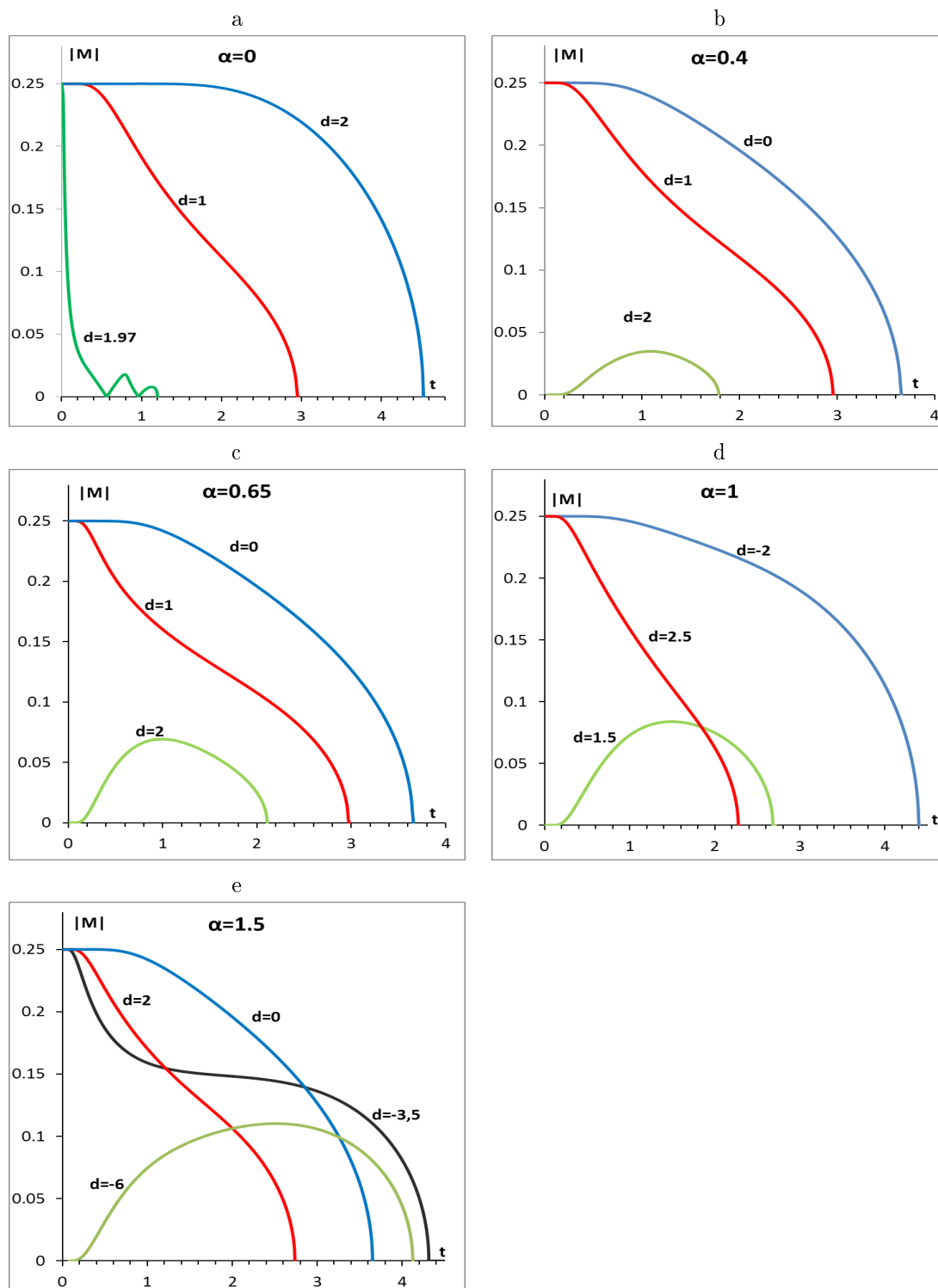


FIGURE 2.9 – Classification de Néel du système d’Ising de spins mixtes spin-1 et spin-3 / 2.

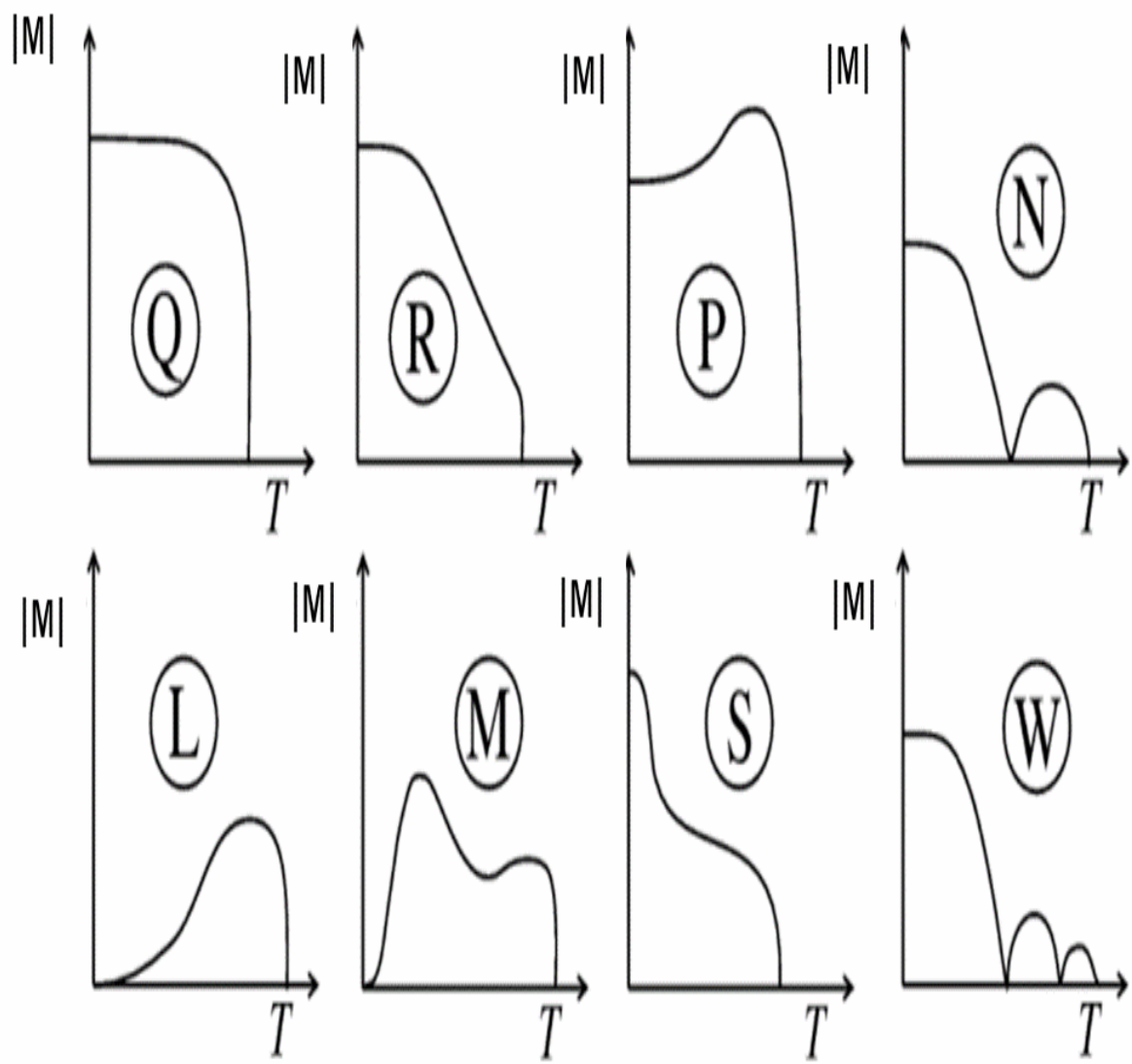


FIGURE 2.10 – Classification de Néel, représentation générale

2.5 Conclusion

En résumé nous avons étudié les comportements magnétique et thermique du système d'Ising de spins mixtes en présence d'un champ cristallin aléatoire spin-1 et spin-3/2. Les résultats obtenus montrent que le système présente une variété des lignes de transition de premier et de second ordre avec l'apparition des point triples, tri-

critiques. A très basse température, le système exhibe des lignes de transitions de premier ordre qui se terminent par des point critiques isolés, mais elles disparaissent avec l'augmentation de la température. Nous avons trouvé une nouvelle phase ferrimagnétique $(1/2, -1/2)$ qui résulte de l'agitation thermique du système. Aussi, nous avons observé que le phénomène de compensation existe seulement dans l'intervalle valeurs $0 \leq \alpha \leq 0.31$ et pour une série choisie du champ cristallin réduit $1.931 \leq d \leq 2.222$. Notre modèle montre que le système peut avoir un ou deux points de compensations. D'autre part nous avons constaté que le phénomène de réentrance ne ne peut avoir lieu qu'à haute température et pour $\alpha > 1$. Nous avons également donner une classification de Néel de l'aimantation totale.

Chapitre 3

Effet du champ cristallin aléatoire sur la dynamique du système d'Ising de spins mixtes Spin-1 et Spin-3/2 soumis à un champ magnétique oscillant

Dans ce chapitre on introduit dans un premier lieu le formalisme nécessaire pour étudier les transitions de phases dynamique, ensuite on propose d'examiner l'effet d'un champ cristallin aléatoire sur les systèmes d'Ising de spins mixtes, spin-1 et spin-3/2, soumis à un champ magnétique extérieur oscillant. L'évolution temporelle du système est décrite par la dynamique stochastique de Glauber [86]. Les équations du mouvement sont obtenues en utilisant la méthode du champ moyen.

3.1 Introduction

L'étude du comportement des systèmes ferromagnétiques en équilibre permet de bien comprendre les transitions de phases ferro-antiferro et le passage de l'ordre au désordre. Cependant, le comportement de tels systèmes en présence d'un champ magnétique extérieur oscillant est loin d'être expliqué dans le cadre de la physique sta-

tistique en équilibre. En particulier, l'application d'un champ magnétique extérieur, qui dépend du temps et uniforme dans l'espace, peut faire apparaître des transitions dynamiques qui sont considérées comme un exemple de transitions de phases hors équilibre. Malgré les progrès accomplis, au cours de ces vingt dernières années, pour développer le formalisme décrivant ces phénomènes dynamiques, des efforts doivent être déployés davantage pour bien explorer ce type de transitions dynamiques et déterminer les diagrammes de phases associés.

3.2 Dynamique du modèle d'Ising

Le modèle d'Ising en équilibre a fait l'objet d'une multitude d'études théoriques, numériques et expérimentales. La dynamique du spin joue un rôle crucial dans la compréhension de la physique statistique hors équilibre, elle a fait l'objet d'une multitude de recherches intenses depuis de nombreuses années. La dynamique du modèle d'Ising consiste à étudier le comportement thermodynamique d'un système de N spins selon un processus de chaînes stochastiques. Les variables de spin ne possèdent pas une dynamique intrinsèque, par contre si le système est en contact avec un réservoir thermique de température T , on peut générer un processus stochastique de type Markovien en basculant ou en permutant le spin S_i vers S_j . Si on passe d'une configuration $\{S_i\}$ vers une autre $\{S'_i\}$ en faisant basculer le spin S_i vers $-S_i$, on parle de la dynamique de renversement ou de Glauber [86]. Si le passage de S_i vers S_j se fait par permutation, il s'agit d'une dynamique d'échange ou de Kawasaki [87].

3.2.1 Le modèle de Glauber

Considérons un système d'Ising de N spin-1 avec $\{S_i\} = (S_1, \dots, S_i, \dots, S_N)$ une configuration donnée et régi par le hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (3.1)$$

le passage d'une configuration à une autre se fait en basculant le spin d'un seul site en passant de S_i vers S'_i avec une probabilité de transition $\omega(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\})$. Si on note par $p(\{S_i\}, t)$ la probabilité de trouver le système dans la configuration $\{S_i\}$ à l'instant t , l'évolution de $p(\{S_i\}, t)$ au cours du temps est régie par l'équation maitresse suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\{S_i\}, t)}{\partial t} = & - \sum_j \sum_{S'_i \neq S_i} (\omega(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\})) P(\{S_i\}, t) \\ & + \sum_i \sum_{S'_i \neq S_i} \omega(\{S'_i\} \rightarrow \{S_i\}) P(\{S'_i\}, t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

le premier terme du membre droit de l'équation (3.2) exprime une perte de probabilité pour la configuration $\{S_i\}$ lorsque le spin S_i est basculé vers S'_i , tandis que le second terme représente un gain de probabilité pour la configuration $\{S'_i\}$ lorsque le spin S'_i passe à S_i .

La probabilité de transition $\omega(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\})$ dépend du modèle microscopique considéré, elle doit être choisie de telle façon que l'ensemble s'approche de la distribution à l'équilibre $P_{eq}(S_i)$ quand $t \rightarrow \infty$. De plus, Elle doit satisfaire la condition du bilan détaillé microscopique :

$$\frac{\omega(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\})}{\omega(\{S'_i\} \rightarrow \{S_i\})} = \frac{P_{eq}(S'_i)}{P_{eq}(S_i)} \quad (3.3)$$

En général il existe plusieurs façons de choisir la probabilité de transition qui doit satisfaire l'équation (3.3), mais puisque le système d'Ising considéré est en contact avec un réservoir thermique de température T , on peut montrer :

$$\omega(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\}) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta \Delta E(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\})}}{\sum_{S'_i} e^{-\beta \Delta E(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\})}} \quad (3.4)$$

la sommation $\sum_{S'_i}$ est calculée sur toutes les valeurs possibles de spin $-S_i = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$

$\beta = \frac{1}{k_\beta T}$ et τ est le temps de relaxation du spin vers l'état d'équilibre avec $\frac{1}{\tau}$ est le nombre de changement du spin par unité du temps. $\Delta E(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\})$ est la variation

de l'énergie lors du basculement du spin S_i , elle est donnée par :

$$\Delta E(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\}) = (S'_i - S_i) \left(\frac{J}{S^2} \sum_{\delta=1}^z S_{\delta+i} + \frac{h}{S} \right) \quad (3.5)$$

On remarque que la probabilité de transition dépend seulement de S'_i et on notera $\omega(\{S_i\} \rightarrow \{S'_i\}) = \omega(\{S'_i\})$

Par exemple, dans le cas du spin $S = 1$, $S_i = -1, 0, 1$, les probabilités de transitions possibles sont exprimées comme suit :

$$\begin{aligned} \omega(\{S_1\} \rightarrow \{S'_0\}) &= \omega(\{S_{-1}\} \rightarrow \{S'_0\}) = \frac{1}{2\tau} \frac{1}{\cosh \beta x} \\ \omega(\{S_1\} \rightarrow \{S'_{-1}\}) &= \omega(\{S_0\} \rightarrow \{S'_{-1}\}) = \frac{1}{2\tau} \frac{e^{-\beta x}}{\cosh \beta x} \\ \omega(\{S_0\} \rightarrow \{S'_1\}) &= \omega(\{S_{-1}\} \rightarrow \{S'_1\}) = \frac{1}{2\tau} \frac{e^{\beta x}}{\cosh \beta x} \end{aligned}$$

avec $x = J \sum_{\delta=1}^z S_{i+\delta} + h$, la valeur moyenne de l'aimantation, il est donnée par :

$$m(t) = \langle S_k \rangle = \sum_{S_i} S_k P(S_i, t) \quad (3.6)$$

En utilisant la relation (3.2), on peut déterminer l'évolution $\langle S_k \rangle$ au cours du temps et on a :

$$\frac{dm(t)}{dt} = \tau^{-1} (-m(t) + \langle \tanh(\beta x) \rangle) \quad (3.7)$$

En utilisant l'approximation du champ moyen pour écrire :

$$\left\langle \tanh(\beta J \sum_{\delta=1}^z S_{i+\delta}) \right\rangle = \tanh(\beta z J m(t) + h) \quad (3.8)$$

donc on se retrouve avec une équation différentielle qui décrit la dynamique du système d'Ising du spin $S = 1$:

$$\tau \frac{dm(t)}{dt} = F(m, t) = -m(t) + \tanh(\beta z J m(t) + h) \quad (3.9)$$

si $\frac{d}{dt} \rightarrow 0$ on retrouve l'expression de l'aimantation dans le cas statique en présence d'un champ magnétique extérieur.

On peut définir le paramètre d'ordre dynamique comme étant une moyenne temporelle sur un intervalle Δt , suffisamment long, par :

$$M(T, h) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} m(t) dt \quad (3.10)$$

L'équation du mouvement (3.9) est résolue numériquement en utilisant la méthode d'Adams Moulton predictor corrector [88], ceci permet d'analyser l'évolution de m en fonction de t . Pour étudier le comportement du paramètre d'ordre $M(T, h)$ en fonction des paramètres de contrôles T et h , on fait appel à la méthode d'intégration de Simpson [89].

En général les systèmes dynamiques sont sensibles aux conditions initiales, ainsi les états stables sont influencés par des petites variations de l'aimantation $m(0)$. le degré de sensibilité est mesuré par l'exposant de Lyapunov [90] :

$$\lambda = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \frac{\partial F(m, t)}{\partial m} dt \quad (3.11)$$

si $\lambda < 0$ la solution est stable.

3.3 Dynamique du système d'Ising : Spins mixtes (1, 3/2)

3.3.1 Modèle du système et méthode DMFA

Le modèle en question est composé de deux sous réseaux **A** et **B** dont les sites sont occupés respectivement par les spins $S^A = 0, \pm 1$ et $S^B = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$

Le système est soumis à un champ magnétique externe dépendant du temps dont le hamiltonien s'écrit sous la forme suivante :

$$H = \mathcal{J} \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^A S_j^B + \sum_{i=1}^N D_i \left[(S_i^A)^2 + (S_i^B)^2 \right] - H(t) \sum_{i=1}^N (S_i^A + S_i^B) \quad (3.12)$$

où :

- Le paramètre de couplage \mathcal{J} est supposé positif pour favoriser l'interaction d'échange antiferromagnétique entre les paires de spins plus proches voisins des deux sous réseaux.
- D_i est un champ cristallin aléatoire au site i , distribué selon la loi de probabilité [79–82] :

$$P(D_i) = 1/2 [\delta(D_i - D(1 + \alpha)) + \delta(D_i - D(1 - \alpha))] \quad (3.13)$$

D est une constante réelle et α est un paramètre positif sans dimension qui mesure l'effet de la fluctuation du champ cristallin.

- La première sommation dans (3.12) porte seulement sur les pairs de spin les plus proches voisins, le second terme décrit l'effet du champ cristallin D , alors que le dernier terme représente l'interaction des spins avec le champ magnétique oscillant $H(t) = h_0 \cos(\omega t)$, h_0 et $\omega = 2\pi\nu$ sont respectivement l'amplitude et la fréquence angulaire du champ oscillant.

on note par Par $\{S_k^X\} = (S_1^X, \dots, S_k^X, \dots, S_N^X)$ la configuration des spins du sous réseau X , ($X = A$ ou B). Soit $\mathcal{P}(\{S_k^X\}, t)$ la probabilité pour que le système soit dans une configuration $\{S_k^X\}$, à l'instant t , en fixant tous les spins de l'autre sous réseau. Selon le formalisme de la référence (Réf.[29]), la dynamique du système est régie par l'équation maitresse suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{P}(\{S_j^X\}; t) &= - \sum_j \sum_{S_j^X \neq S_j^X} w_j^X(S_j^X \rightarrow S_j^X) \mathcal{P}(S_j^X; t) \\ &+ \sum_j \sum_{S_j^X \neq S_j^X} w_j^X(S_j^X \rightarrow S_j^X) \mathcal{P}(S_j^X; t) \end{aligned} \quad (3.14)$$

où la configuration S_j^X diffère de S_j^X par le basculement de $j^{\text{ème}}$ spin S_j^X du sous réseau X , et $w_j^X(S_j^X \rightarrow S_j^X)$ est la probabilité de transition du $j^{\text{ème}}$ spin de la valeur S_j^X à S_j^X , il doit être déterminé de telle façon que l'ensemble s'approche de la distribution à l'équilibre $\mathcal{P}_e(S_j^X)$ quand t tend vers l'infini.

Les taux de transitions doivent satisfaire la condition de la balance détaillée

$$w_j^X(S_j^X \rightarrow S_{j'}^X) \mathcal{P}_e(S_j^X) = w_j^X(S_{j'}^X \rightarrow S_j^X) \mathcal{P}_e(S_{j'}^X) \quad (3.15)$$

Puisque le système est en contact avec le réservoir thermique de température T , la probabilité de transition peut être choisie selon la distribution de Boltzman : [91–93]

$$w_j^X(S_j^X \rightarrow S_{j'}^X) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta E(S_j^X \rightarrow S_{j'}^X))}{\sum_{S_{j'}^X} \exp(-\beta \Delta E(S_j^X \rightarrow S_{j'}^X))} \quad (3.16)$$

où $\beta = \frac{1}{k_\beta T}$ la constante de Boltzman, k_β , est fixée à l'unité, T est la température absolue, $\frac{1}{\tau}$ est le nombre de changement de spins par unité de temps et $\Delta E(S_j^X \rightarrow S_{j'}^X)$ représente la variation de l'énergie lors du basculement du spin $S_j^X \rightarrow S_{j'}^X$.

En multipliant les deux membres de l'Eq. (3.16) par $S_{j'}^X$ puis on calcul la moyenne sur toutes les configurations possibles en tenant compte du désordre, exprimé par l'eq. (3.13), on obtient les équations suivantes :

$$\Omega \frac{d}{d\xi} M^A = -M^A - 1/2 \left\{ \frac{2A}{2B + e^q} + \frac{2A}{2B + e^{\tilde{q}}} \right\} \quad (3.17)$$

$$\Omega \frac{d}{d\xi} M^B = -M^B - 1/4 \left\{ \frac{3C + Ee^{2q}}{F + Ge^{2q}} + \frac{3C + Ee^{2\tilde{q}}}{F + Ge^{2\tilde{q}}} \right\} \quad (3.18)$$

où nous avons utilisé les notations suivantes :

- $A = \sinh(x)$, $B = \cosh(x)$,
- $C = \sinh(\frac{3y}{2})$, $E = \sinh(\frac{y}{2})$
- $F = \cosh(\frac{3y}{2})$, $G = \cosh(\frac{y}{2})$
- $q = \frac{d(1+\alpha)}{T}$, $\tilde{q} = \frac{d(1-\alpha)}{T}$
- $x = zT^{-1}(M^B + h \cos(\xi))$, $y = zT^{-1}(M^A + h \cos(\xi))$
- $M^X = \langle S^X \rangle$ est l'aimantation moyenne

$\xi = \omega t$, $T = 1/\beta J$, $d = D/J$, $h = h_0/zJ$ et $\Omega = \tau\omega = 2\pi$. Le nombre de paires proches voisins z est fixé à 4.

En absence du champ magnétique extérieur et quand on fait tendre ($\xi \rightarrow \infty$) dans les

équations (3.17) et (3.18), on retrouve les expressions des aimantations déjà établies dans le cas d'étude du système en équilibre [18].

Le point de départ de notre étude consiste à déterminer l'état fondamental du système. Le résultat a été établi dans le **chapitre(2)** qu'on récapitule dans le tableau suivant :

Paramètre α	Phases	Ligne de séparation
0	$(1, -\frac{3}{2}), (0, 0)$	$d = 2$
$0 < \alpha < 0.6$	$(1, -\frac{3}{2}), (1, -1)$	$d = \frac{2}{1+\alpha}$
	$(1, -1), (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$	$d = \frac{6}{3-\alpha}$
	$(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), (0, 0)$	$d = \frac{2}{1-\alpha}$
$0.6 < \alpha < 1$	$(1, -\frac{3}{2}), (1, -1)$	$d = \frac{2}{1+\alpha}$
	$(1, -1), (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$	$d = \frac{6}{3-\alpha}$
	$(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}), (0, 0)$	$d = \frac{2}{1-\alpha}$
	$(1, -1), (\frac{1}{2}, -1)$	$d = \frac{4}{1+\alpha}$
$\alpha = 1$	$(1, -1), (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$	$d = \frac{1}{1-\alpha}$
	$(1, -\frac{3}{2}), (1, -1)$	$d = \frac{2}{1+\alpha}$
	$(1, -1), (\frac{1}{2}, -1)$	$d = \frac{4}{1+\alpha}$
$\alpha > 1$	$(1, -1), (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$	$d = \frac{1}{1-\alpha}$
	$(1, -\frac{3}{2}), (1, -1)$	$d = \frac{2}{1-\alpha}$
	$(1, -1), (\frac{1}{2}, -1)$	$d = \frac{4}{1-\alpha}$

TABLE 3.1 – les phases statiques de l'état fondamentale $T = 0$ du système d'Ising de spins mixtes $(1, 3/2)$ [18]

3.3.2 Diagrammes de phases dynamiques

Les équations de mouvement (3.17) et (3.18) obtenues à partir de l'équation maîtresse ont été résolues en utilisant l'approximation du champ moyen. De ce fait, les états d'équilibre du système peuvent être examinés en fonction de la température réduite $T = 1/\beta J$ et des champs réduits $d = D/J$ et $h = h_0/zJ$. Les équations sont résolues numériquement par la méthode predictor-corrector de Adams Moulton [88] avec l'intégration de Simpson [89]. En général, les solutions des systèmes dépendent des conditions initiales des aimantations $M^A(\xi)$ et $M^B(\xi)$. Le choix pertinent de certains paramètres permet au système de passer d'un régime transitoire à un régime permanent où les solutions des eqs. (3.17) et (3.18) deviennent stationnaires. Le paramètre d'ordre

dynamique opté est l'aimantation moyenne pour les deux sous réseaux :

$$m_a = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} M^A(\xi) d\xi, \quad m_b = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} M^B(\xi) d\xi \quad (3.19)$$

Un balayage de toutes les solutions possibles montre que le système présente toutes les phases mixtes observées dans le cas statique [18] à savoir : $P = (0, 0)$, $F_1 = (1, -3/2)$, $F_2 = (1, -1)$, $F_3 = (1/2, -1/2)$ et $F_4 = (1/2, -1)$. Les autres solutions sont à l'origine dynamique, on en trouve sept qui sont données par les phases de coexistence (ou phases dynamiques) : $F_1 + P$, $F_2 + P$, $F_3 + P$, $F_4 + P$, $F_1 + F_2$, $F_1 + F_3$ et $F_2 + F_3$.

Dans le but d'analyser le comportement des transitions de phases dynamiques du système, on examine l'impact du champ cristallin sur la température critique réduite en prenant une variété de valeurs du paramètre α . On distingue les cas de champs magnétiques faibles et forts.

D'après la figure (**Fig. 3.1**), on constate que les phases de coexistence apparaissent pour les valeurs faibles et fortes du champ magnétique extérieure h . L'aire des régions de coexistence augmente avec l'intensité de h . En effet, pour $\alpha = 0$, et $h = 0,02$ (**Fig.3.1a**), le système exhibe une phase paramagnétique P , une phase mixte F_1 et quatre régions de coexistences $(F_1 + F_3)$, $(F_2 + F_3)$, $(F_2 + P)$ et $(F_3 + P)$. Le passage entre ces phases est discontinu jusqu'à une température réduite $T = 0.76$. Au de là de cette température, une seule transition de second ordre apparait et sépare les phases P et F_1 . Cette situation est marquée par l'existence d'un point tricritique et deux points triples. En augmentant l'intensité du champ magnétique, $h = 1$, (**Fig.3.1b**), les diagrammes de phases subissent une modification considérable, on distingue ainsi cinq phases : F_3 , $(F_1 + P)$, $(F_2 + P)$, $(F_3 + P)$ et une phase paramagnétique P . La phase mixte F_3 est séparée de la phase paramagnétique P par une ligne de transition de second ordre et la phase de coexistence $(F_3 + P)$ est séparée de la phase paramagnétique par des lignes de transitions de premier et second ordre. Dans les autres cas, les transitions sont du premier ordre. Le système présente également un point tricritique et deux points critiques isolés. Lorsqu' on se place à des températures élevées, le modèle manifeste un

comportement de réentrance qui fait passer le système de la phase $(F_1 + P)$ à l'état désordonnée P puis à la phase $(F_3 + P)$ et de la phase $(F_3 + P)$ à la phase F_3 puis à la phase P .

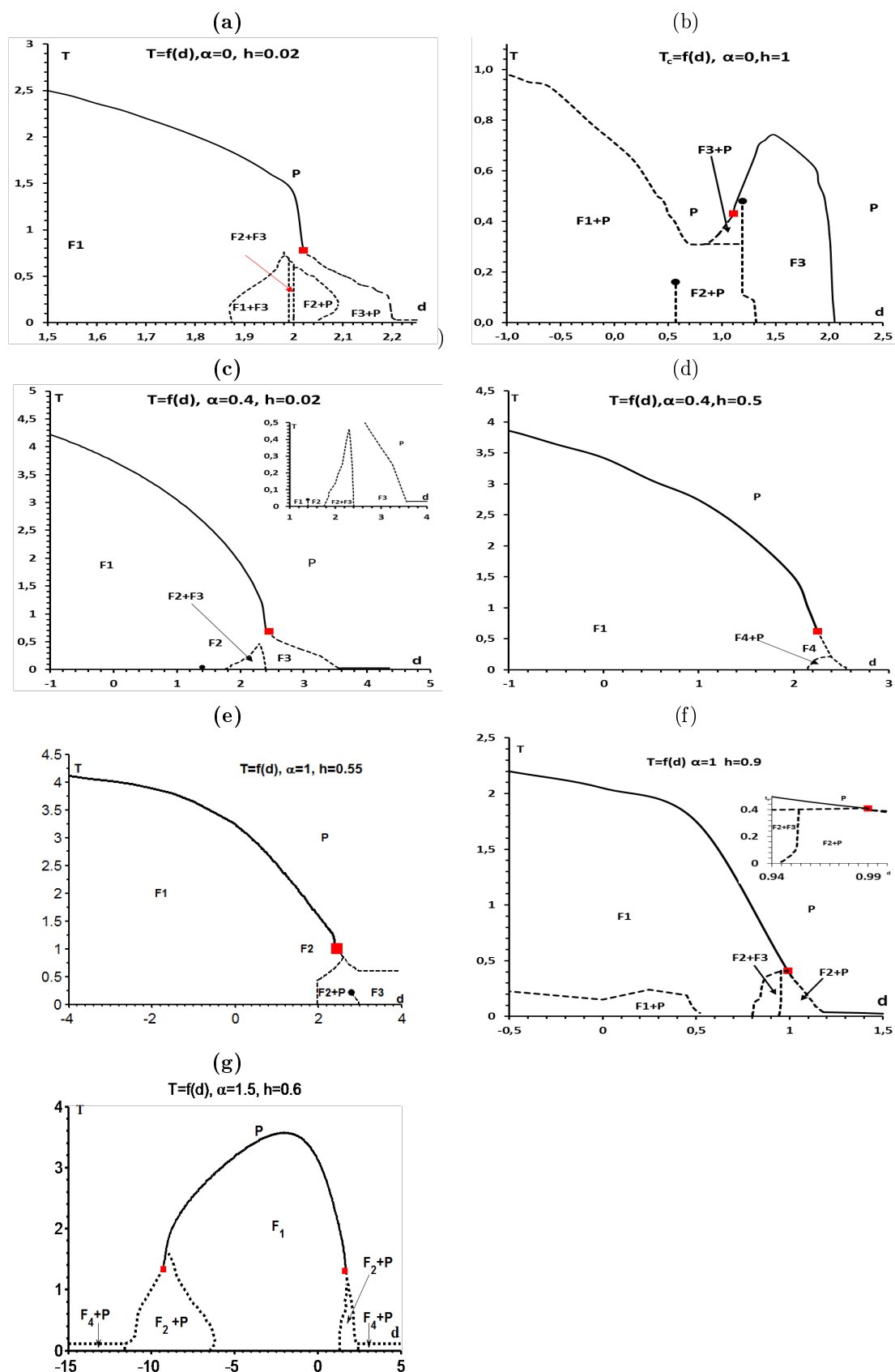


FIGURE 3.1 – diagramme de phases dynamiques du système d’Ising de spins mixtes spin-1 spin-3/2 dans le plan (d, T) pour différentes valeurs du paramètre α . on distingue le cas d’application d’un champ oscillant faible et fort. Les points tricritiques et isolés sont représentés successivement par des grands et petits carrés. Les points triples sont indiqués par des cercles pleins.

Pour $0 < \alpha \leq 1$, les transitions entre la phase ferrimagnétique F_1 et la phase paramagnétique P sont continues (**Fig. (3.1)-c-d-e-f**). Toutefois, à basse température et pour des valeurs faibles du champ magnétique, le système exhibe dans (**Fig. (3.1)c**) cinq phases : $F_1, F_2, (F_2 + F_3), F_3$, et P , dans ce cas les phases F_1 et F_2 sont séparées par une ligne de transition du premier ordre qui se termine par un point critique isolé ($d = 1.4, T = 0.04$). Si on augmente l'intensité du champ magnétique, on remarque que la phase paramagnétique apparaît à basse température et coexiste avec une phase mixte comme illustré dans les figures (**Fig. (3.1)-d-e-f**).

Pour les grandes valeurs du paramètre $\alpha > 1$, on se retrouve avec une autre topologie de diagrammes de phases.

Les régions de coexistence surgissent seulement pour des champs magnétiques $h \geq 0.51$, les phases de coexistence, $(F_2 + P), (F_4 + P)$ apparaissent à la fois dans les deux régions de valeurs positives et négatives du champ cristallin d , comme montré dans (Fig. 3.1g) pour $\alpha = 1.5$ et $h = 0.6$. Une fois la température augmente, les phases de coexistence disparaissent et donnent lieu à une phase mixte dominante F_1 . Elle sépare deux phases désordonnées par une ligne de transition de second ordre se terminant par deux points tricritiques de coordonnées $(d = -9.3, T = 1.34)$ et $(d = 1.62, T = 1.31)$. On note que toutes les phases de coexistence sont séparées par des lignes de transition du premier ordre avec l'apparition de deux points triples et un point critique isolé. Il est important d'ajouter dans le cas où $\alpha > 1$, le système devient très sensible aux modifications de l'intensité du champ magnétique réduit et il devient très perturbé pour $h > 0.9$.

3.3.3 Comportement thermique de l'aimantation

Dans cette section on se propose d'étudier l'influence de la température et du champ cristallin sur le comportement des aimantations partielles en présence d'un champ magnétique extérieur oscillant. Pour ce faire, on représente sur la (**Fig. 3.2**) , les aimantations partielles m_a et m_b en fonction de la température pour une valeur fixe

du paramètre $\alpha = 0$ et pour une série de valeurs du champ cristallin. Dans le cas où le système est exposé à un champ magnétique d'intensité faible $h = 0.02$, on observe des transitions de second ordre avec l'existence d'une seule phase ordonnée pour $d < 1.87$, comme il est montré dans (Fig. 3.2a) pour $\alpha = 0$ et $d = 1.8$. Au dessus de cette valeur, les transitions du premier ordre commencent à apparaître et le système démarre avec des phases de coexistence ($F_1 + F_3$) (**Fig. 3.2b**) et ($F_2 + F_3$) (**Fig. 3.2c**). La phase paramagnétique se manifeste pour la première fois à partir de $d = 2$ et coexiste avec la phase F_3 , au delà de cette valeur, la phase paramagnétique coexiste avec d'autres phases à partir de $T = 0$. Par exemple, comme l'on remarque sur la figure (**Fig. 3.2d**), la phase P coexiste avec la phase F_2 et la phase F_3 respectivement dans les intervalles $T \leq 0.59$ et $T > 0.59$.

Si on augmente l'intensité du champ magnétique h (**Fig.3.2**), la phase paramagnétique coexiste avec d'autres phases et disparaît à partir de $d = 1.19$. Comme on l'observe sur les (**Figs. 3.3.c-d**), le système exhibe pour $T > 0.31$ une phase paramagnétique séparant les phases de coexistence. En outre, le passage de la phase paramagnétique à la phase de coexistence ($F_3 + P$) peut être continu (**Fig. 3.3c**) ou discontinu (**Fig.3.d**) et le système se désordonne complètement à partir d'une valeur critique du champ cristallin $d = 2.03$.

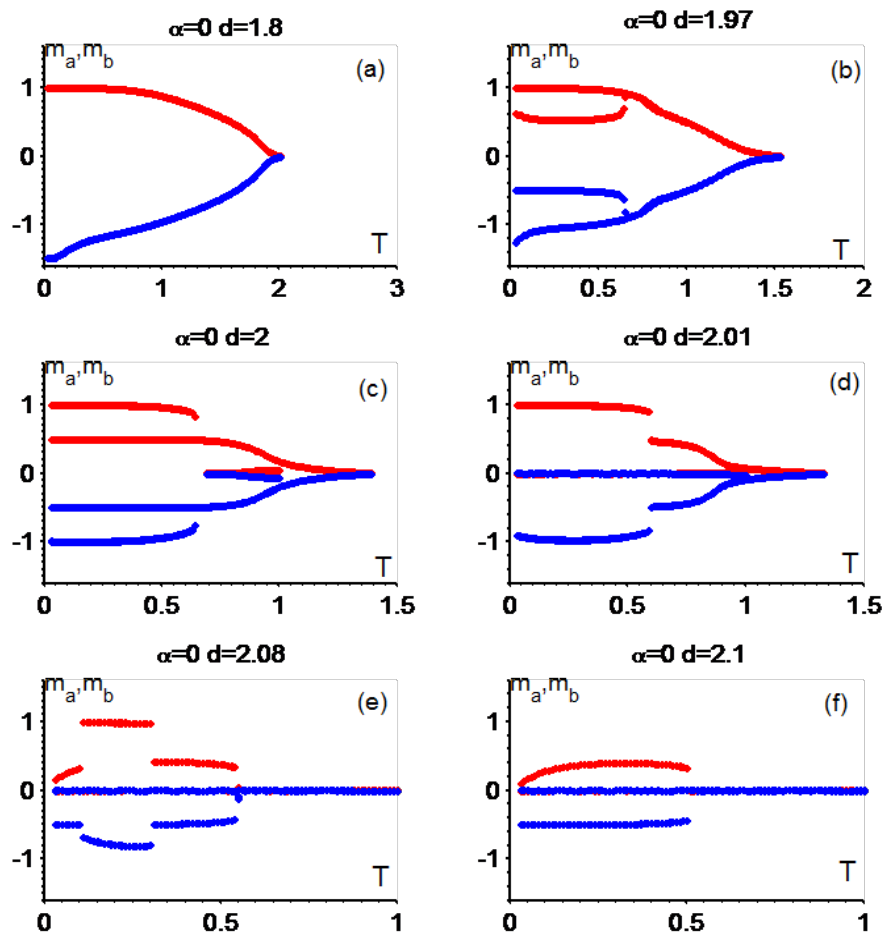


FIGURE 3.2 – Comportement des aimantations partielles m_a et m_b en fonction de la température réduite T pour $\alpha = 0$ et $h = 0.02$.

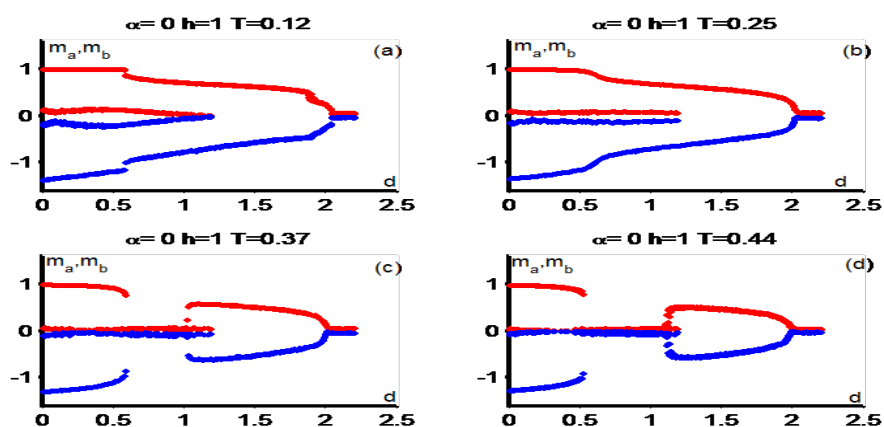


FIGURE 3.3 – Comportement des aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin réduit d pour $\alpha = 0$ et $h = 1$.

Par ailleurs, pour la valeur, $\alpha > 1$, le système exhibe respectivement un comportement réentrant opposé pour le premier et second ordre, en effet, la (**Fig. 3.4a**), tracée pour $\alpha = 1.5$ et $h = 0.6$, affiche deux points critiques consécutifs du premier ordre donnés par les coordonnées $(d_1 = -11, T_1 = 0.5)$, et $(d_1 = 2.1, T_1 = 0.5)$. Alors que (**Fig. 3.4.b**), montre deux points critiques consécutifs du second ordre donnés par les coordonnées $(d_1 = -8.8, T_1 = 2)$, et $(d_2 = 2.4, T_2 = 2)$.

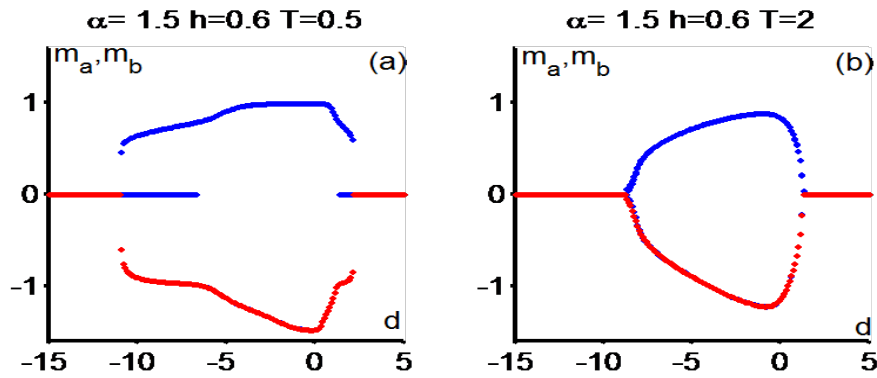


FIGURE 3.4 – Variation des aimantations partielles m_a et m_b en fonction du champ cristallin réduit d pour $\alpha = 1.5$ et $h = 0.6$ pour des valeurs choisies de la température réduite $T = 0.5$ et 2 , les figures (a) et (b) exhibent le phénomène réentrant opposé.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié, en utilisant MFA, l'effet du champ cristallin aléatoire sur les états stationnaires du système mixte ferrimagnétique spin-1 et spin-3/2, sous l'influence d'un champ magnétique externe oscillant et dépendant du temps par la dynamique stochastique de Glauber. Pour résoudre les équations du champ moyen dynamiques obtenues à partir de l'équation maîtresse, nous avons utilisé la méthode d'Adams Moulton predictor-corrector. En outre, l'aimantation moyenne, qui est le paramètre dynamique, est calculée par l'intégrale de Simpson. L'effet du champ cristallin aléatoire sur l'aimantation et les diagrammes de phase sont explorés en détail. Suivant les valeurs du champ magnétique h et les paramètres α , T et d , le système présente des transitions de phases dynamiques du premier et deuxième ordre et une

panoplie de phases de coexistence apparaissent avec l'existence des points tricritiques dynamiques, points critiques isolés, les points triples dynamiques. Le système exhibe aussi le phénomène de réentrances pour $\alpha = 0$ et $\alpha > 1$. Nous avons constaté aussi, que le système est très sensible aux modifications de l'intensité du champ magnétique réduit, il devient très perturbé si $h > 0.6$.

Chapitre 4

Transition de phase dynamique pour le modèle d'Ising semi-infini avec un volume $S = 1$ et une surface libre $\sigma = \frac{1}{2}$ sous un champ magnétique oscillant

Dans ce chapitre on propose d'étudier la dynamique du modèle d'Ising semi-infini en présence d'un champ magnétique oscillant en se basant sur l'approximation du champ moyen et en utilisant la méthode de Glauber de type stochastique. La surface et le volume du système seront occupés respectivement par les spins $\sigma = 1/2$ et $S = 1$.

Introduction

Expérimentalement un système physique réel est limité dans l'espace par des surfaces libres dont les propriétés physiques sont différentes de celles du volume. De point de vue transition de phase, le volume peut induire des transitions de phases sur la surface mais le contraire ne peut se produire car le nombre d'atomes du volume est plus important que celui de la surface. De tels systèmes sont appelés : systèmes semi infini. D'autre part, plusieurs matériaux présentent des transitions de phase du premier ordre dans le volume, ce comportement physique n'a pas suscité l'intérêt des théoriciens ou des expérimentateurs du fait de l'absence des exposants critiques. Toutefois cette situation peut être inversée dans le cas de la surface, où les transitions de phase deviennent continues et les exposants critiques divergent, dans certains cas la surface transite avant le volume du fait de renforcement des interactions entre les atomes de la surface. Par exemple, on a observé expérimentalement que la surface des éléments Cr, Co, Ni, Tb et Gd est ordonnée à une température critique supérieure à celle du volume [94–96]. En effet, dans ces systèmes on trouve deux interactions d'échange, à savoir les paramètres de couplage de surface J_s et de volume J_b . A l'équilibre et lorsque $\frac{J_s}{J_b}$ est inférieur à une valeur critique, la surface et le volume s'ordonnent à la même température, il s'agit d'une transition ordinaire. Si $\frac{J_s}{J_b}$ est supérieur à cette valeur critique, deux types de transitions de phase apparaissent, la surface s'ordonne à une température plus élevée que le volume appelée transition de surface suivie d'une transition de volume qu'on appelle transition extraordinaire [94; 97; 98]. Depuis, plusieurs auteurs se sont intéressés à l'exploration des systèmes en utilisant plusieurs approches telles que l'approximation du champs moyen [99–101] la théorie du champs effectif [102] la méthode du groupe de renormalisation [103; 104] et la simulation de Monte Carlo [105–107].

Dans le cas des systèmes hors équilibre la surface peut être ordonnée même si le volume se trouve dans une phase désordonnée, en plus, la perturbation du système par un champ magnétique oscillant extérieur permet d'obtenir de nouvelles phases dyna-

miques avec la manifestation des points multicritiques. Ces résultats ont été explorés en détail dans le cas des systèmes semi-infinis constitués de spin $S = 1/2$ en présence d'un champs magnétique oscillant [108].

Dans le même contexte, P.Riego [109] a montré que les caractéristiques des transitions de phase dynamiques sont qualitativement différentes de celles des transitions de phases thermodynamiques. En effet les fluctuations metamagnétiques et la taille des exposants critiques dépendent fortement de l'amplitude du champs magnétique oscillant

4.1 Formulation du modèle

Le modèle d'Ising semi-infini considéré et défini sur un réseau cubique dont la surface est occupée par le spin $\sigma = 1/2$ et le volume par $S = 1$. le hamiltonien s'écrit :

$$H = -j_s \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - j_b \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_i S_k - j_b \sum_{\langle kl \rangle} S_k S_l - \Delta_b \sum_i S_i^2 + H(t) \left(\sum_i \sigma_i + \sum_k S_k \right) \quad (4.1)$$

Les trois premières sommations portent sur toutes les paires de spins les plus proches voisins. j_s et j_b sont respectivement les constantes de couplage entre les spins de la surface et ceux du volume supposées positives, on posera par la suite $r = \frac{j_s}{j_b}$, $h = \frac{H_0}{j_b}$ et $d = \frac{\Delta_b}{j_b}$. Les spins du volume sont en interaction avec leurs environnement cristallin, cette interaction est exprimée par le champ cristallin Δ_b . $H(t)$ représente le champ magnétique oscillant donné par :

$$H(t) = H_0 \cos(\omega t) \quad (4.2)$$

H_0 et $\omega = 2\pi r$ sont respectivement l'amplitude et la fréquence angulaire du champ oscillant. Le système est toujours maintenu en contact avec un réservoir thermique de température T_A et évolue selon la dynamique de Glauber de type stochastique. Soient $P_S(\sigma_1, \sigma_2, \dots; t)$ et $P_B(S_1, S_2, \dots; t)$ les probabilités que la surface S et le volume B soient respectivement dans les configurations $(\sigma_1, \sigma_2, \dots)$ et (S_1, S_2, \dots) à l'instant t .

La dynamique du système est régie selon l'équation maîtresse suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_\alpha(q_1, q_2, \dots; t) = & - \sum_j W_\alpha(q_j \rightarrow q'_j) P_\alpha(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots; t) \\ & + \sum_j W_\alpha(q'_j \rightarrow q_j) P_\alpha(q_1, q_2, \dots, q'_j, \dots; t), \end{aligned} \quad (4.3)$$

où $\alpha = S, B$ et $q_j = \sigma_j, S_j$ et $W_\alpha(q'_j \rightarrow q_j)$ est la probabilité de transition par unité du temps entre deux configurations lors du retournement du spin $q_j \rightarrow -q_j$ [91; 92].

Le premier terme du membre droit de l'équation (4.3) exprime une perte de probabilité lorsque le spin q_j est basculé vers q'_j , tandis que le second terme représente un gain de probabilité pour la configuration lorsque le spin q'_j passe à q_j .

Étant donnée que le système est en contact avec un réservoir thermique, la probabilité de transition doit être exprimée en fonction du poids de Boltzman de telle façon que l'ensemble s'approche de la distribution à l'équilibre $P_\alpha^e(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots)$. Elle doit satisfaire la condition du bilan détaillé microscopique :

$$\frac{W_\alpha(q'_j \rightarrow q_j)}{W_\alpha(q_j \rightarrow q'_j)} = \frac{P_\alpha^e(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots)}{P_\alpha^e(q_1, q_2, \dots, q'_j, \dots)} \quad (4.4)$$

En utilisant les équations (4.3) et (4.4), on peut montrer que les aimantations moyennes vérifient les équations suivantes [110].

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_i(t) \rangle = - \langle \sigma_i \rangle + \left\langle \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta}{2} \left[j_s \sum_{j=1}^4 \sigma_j + j_b S + H_0 \cos(\omega t) \right] t \right\rangle \quad (4.5)$$

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S_i(t) \rangle = - \langle S_i \rangle + \left\langle \frac{2 \sinh \beta \left[j_b \sum_{j=1}^6 S_j + H_0 \cos(\omega t) \right]}{2 \cosh \beta \left[j_b \sum_{j=1}^6 S_j + H_0 \cos(\omega t) \right] + e^{\frac{-\beta \Delta_b}{T}}} \right\rangle \quad (4.6)$$

où $\beta = \frac{1}{k_\beta T_A}$ et k_β est la constante de Boltzmann. τ est le temps de relaxation du spin vers son état d'équilibre.

L'approximation du champ moyen permet de développer les expressions 4.5 et 4.6 pour obtenir :

$$\Omega \frac{dm_s}{d\xi} = -m_s + \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{1}{2T} (4rm_s + m_b + h \cos \xi) \right]. \quad (4.7)$$

$$\Omega \frac{dm_b}{d\xi} = -m_b + \frac{2 \sinh \left[\frac{1}{T} (6m_b + h \cos \xi) \right]}{2 \cosh \left[\frac{1}{T} (6m_b + h \cos \xi) \right] + e^{\frac{-d}{T}}} \quad (4.8)$$

où $m_s = \langle \sigma_s \rangle$, $m_b = \langle \sigma_b \rangle$, $\Omega = \tau\omega = 2\pi$, $\xi = \omega t$, $T = \frac{1}{\beta}$, $h = \frac{H_0}{J_b}$, $d = \frac{\Delta_b}{J_b}$ et $r = \frac{J_S}{J_b}$. Les équations (4.7) et (4.8) ne sont pas linéaires et ne sont résolubles qu'avec des méthodes numériques. Souvent, ces équations font références dans la littérature [111–115] aux systèmes dynamiques, selon l'approche du champ moyen, on les appelle équation du mouvement dynamiques.

De ce fait, les états d'équilibre du système peuvent être trouvés en fonction de T , r et h . La résolution numérique des équations du mouvement fait appel à la méthode d'Adams Moulton predictor corrector [88] avec l'intégrale de Simpson [89]. En général, les solutions dynamiques sont sensibles aux conditions initiales des aimantations. Ainsi, le système passe par un régime transitoire avant d'atteindre un état stationnaire. Le paramètre dynamique opté dans notre cas est l'aimantation moyenne sur une période, il est donné par :

$$M = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m(\xi) d\xi \quad (4.9)$$

4.2 Diagrammes de phases dynamiques

Dans un premier temps on présente les diagrammes de phases dans le plan (T, h) pour des valeurs choisies de d et r . Dans les **Figs. 4.1** et **4.2**, les lignes continues et discontinues représentent respectivement les transitions de second et premier ordre. Les points tricritiques dynamiques sont dénotés par des cercles ouverts.

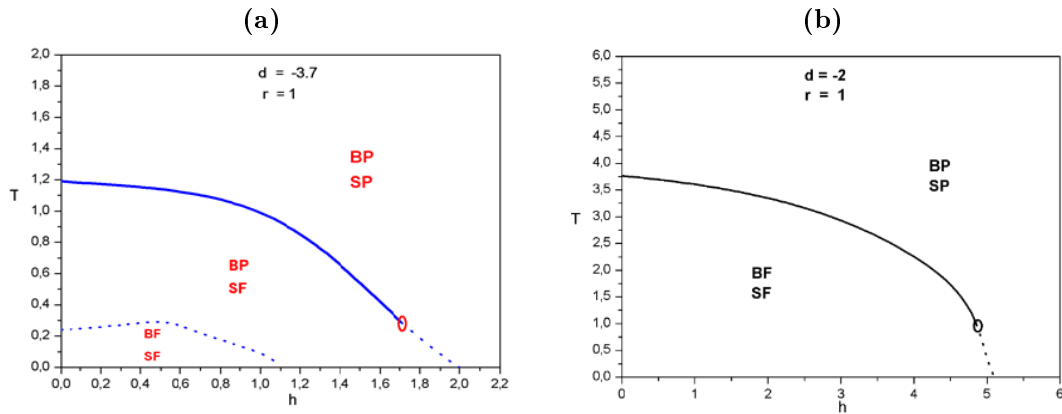


FIGURE 4.1 – Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h) . (a) $d = -3.7, r = 1$, et (b) $d = -2, r = 1$ Les lignes solides et pointillées sont respectivement les lignes de transitions du second et du premier ordre. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts. Les symboles SP, BP, SF et BF désignent respectivement, la surface paramagnétique, le volume paramagnétique, la surface ferromagnétique et le volume ferromagnétique.

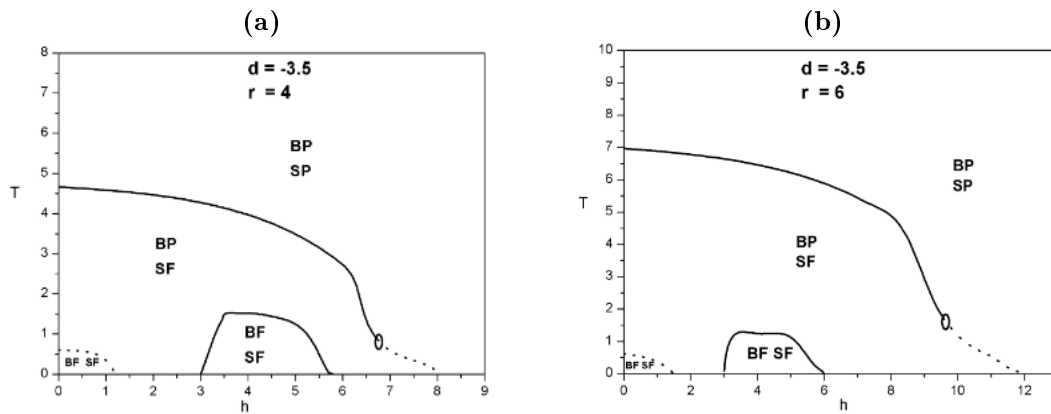


FIGURE 4.2 – Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h) . (a) $d = -3.5, r = 4$, et (b) $d = -3.5, r = 6$. Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions du second et du premier ordre. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts. Les symboles SP, BP, SF et BF désignent respectivement, la surface paramagnétique, le volume paramagnétique, la surface ferromagnétique et le volume ferromagnétique.

Dans le cas où les constantes de couplage de volume et de surface $r = 1$, on constate que pour des valeurs négatives du champ cristallin et à basse température le système est complètement ordonné. La (Fig. 4.1-a) tracée pour $d = -3.7$ et $r = 1$ montre que la phase (BP, SF) sépare les phases (BF, SF) et (BP, SP) respectivement par

des lignes de transition du premier et de second ordre. Cette situation est marquée par l'existence d'un point tricritique dynamique qui apparaît à $h = 1.72$. Par ailleurs, l'augmentation du champ cristallin d (Fig. 4.1.b) fait disparaître la transition dynamique extraordinaire et la phase (BF, SF) devient dominante et sépare la phase (BP, SP) par une ligne de transition de second ordre qui se termine par un point tricritique.

D'autre part, si les interactions de la surface sont plus grandes que celles du volume $r > 1$ (**Fig. 4.2-a**), on observe que la phase complètement ordonnée (BF, SF) apparaît, pour des valeurs négatives du champ cristallin, dans deux régions séparées et transitent vers la phase (BP, SF) de manière discontinue d'une part et continue d'autre part (**Fig. 4.2-a**). Ces transitions sont qualifiées extraordinaires. En augmentant ces interactions (**Fig. 4.2-b**), on observe la même topologie avec un rétrécissement de la phase (BF, SF) .

Lorsque le champ cristallin devient important (**Fig. 4.3**), on remarque que la phase complètement ordonnée gagne de l'espace au détriment de la phase (BP, SF) . Les transitions extraordinaires peuvent être du premier ou de second ordre avec ou sans apparition d'un point tricritique, comme montré respectivement dans les (**Figs. 4.3-a-b**). Finalement, d'après la (**Fig. 4.4**) le système présente une transition de phase dynamique ordinaire pour $h < 4.51$, alors que, lorsque $h > 4.51$, le système présente successivement une transition dynamique extraordinaire de second ordre terminée par un point tricritique ($t_{tc} = 2,79, h_{tc} = 4,62$) et une transition de surface qui se termine par un point tricritique ($t_{tc} = 1,78, h_{tc} = 6,35$).

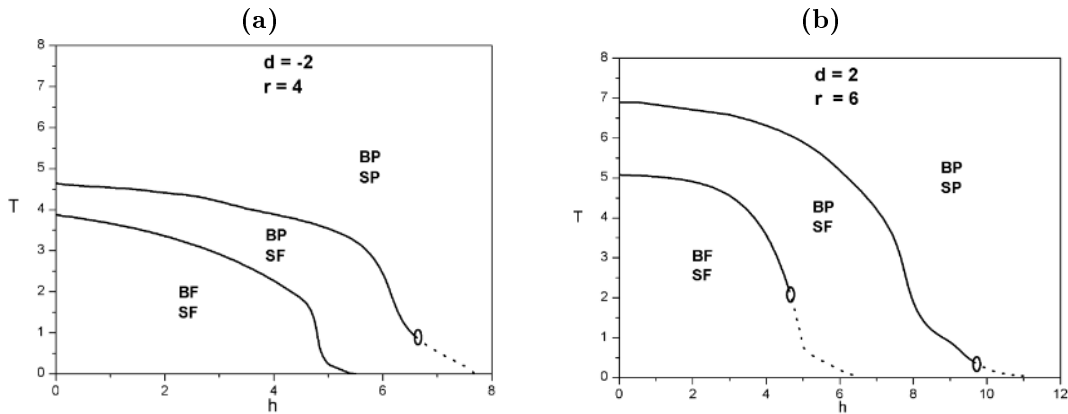


FIGURE 4.3 – Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h) . Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions de phases de premier et second-ordres. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts, (a) $d = -2, r = 4$, et (b) $d = 2, r = 6$.

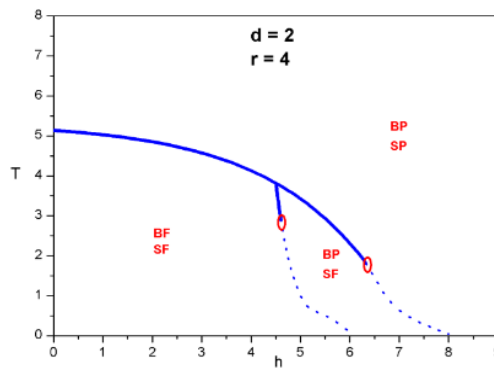


FIGURE 4.4 – Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T, h) . Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions de phases de premier et second-ordres. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts, pour $d = 2, r = 4$.

Pour bien comprendre l'effet des interactions du volume et de la surface sur le comportement dynamique du système, on propose de visualiser sur la (Fig. 4.5) la température critique réduite en fonction du champ cristallin réduit en présence d'un champ magnétique faible $h = 0.05$ et pour une série de valeurs de $r = 0.3, 1, 3$ et 6 . on peut distinguer trois types de diagrammes de phases. Dans le premier type (Fig. 4.5a,b), le système présente des transitions de phases ordinaires où le volume et la surface s'ordonnent à la même température. Les transitions sont données par une ligne de transition de

second ordre et une ligne de transition du premier ordre qui sont reliées par un point tricritique. En baissant la température, le volume est désordonné mais la surface reste ordonnée, la ligne de transition extraordinaire correspondante est du premier ordre, Cette situation est observé pour $r \leq 1$ avec l'apparition de deux points tricritiques. Dans le cas où les interactions de la surface deviennent importantes par rapport à celles du volume $r > 1$, on constate que la phase (BP, SF) devient large et la transition extraordinaire est marquée par une ligne de transitions de second ordre se terminant avec un point tricritique dynamique. Dans tous les cas, on remarque que le système subit une transition de surface de second ordre en passant de la phase (BP, SF) à la phase (BP, SP) .

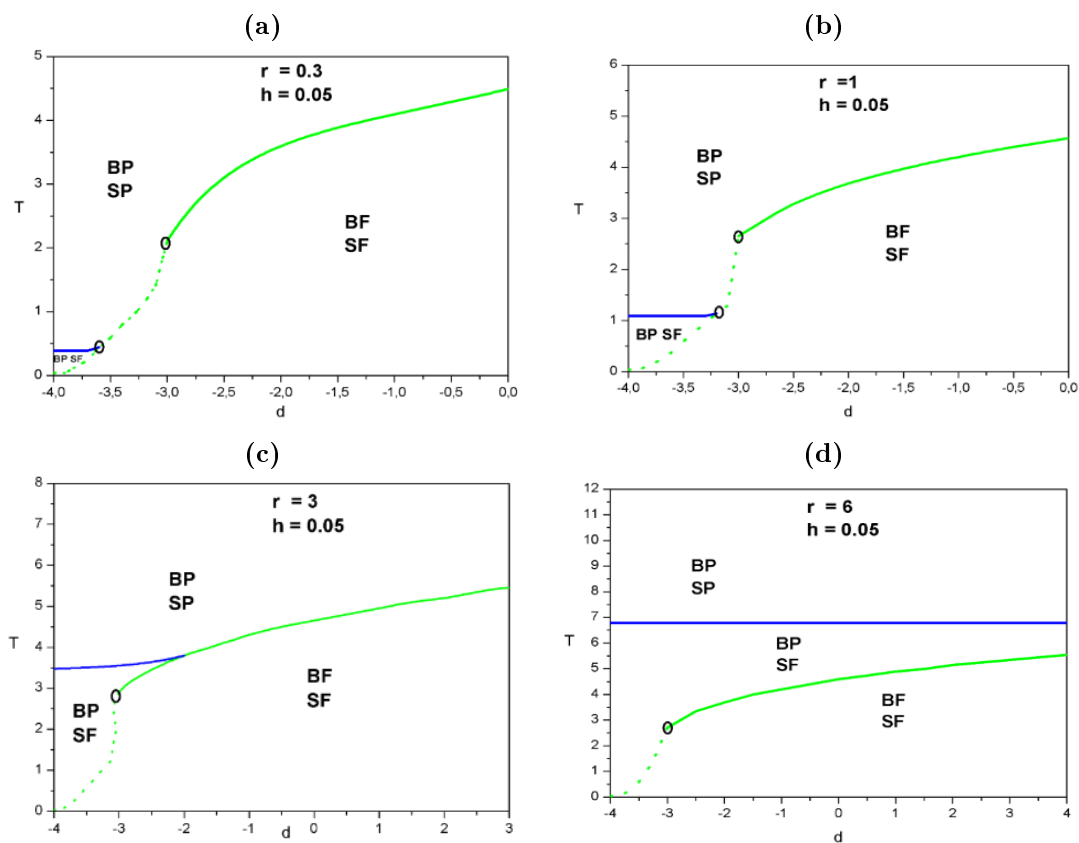


FIGURE 4.5 – Diagrammes de phases dynamiques du système semi-infini dans le plan (T_c, d) pour $h = 0.05$, (a) $r = 0.3$, (b) $r = 1$, (c) $r = 3$, et (d) $r = 6$. Les lignes pointillées et solides sont respectivement les lignes de transitions de phases de premier et second-ordres. Les points tricritiques dynamiques sont indiqués par des cercles ouverts.

4.3 Paramètre d'ordre dynamique et trajectoires dans l'espace des phases

On soumet le système à un champ magnétique faible et on visualise sur la (**Fig. 4.6**) les aimantations partielles M_S et M_B en fonction de la température pour un couplage $r = 1$. On constate que M_S présente une transition de phase de premier ordre dans l'intervalle $-3.3 \leq d \leq -3$ et de second ordre ailleurs (**Fig.4.6a**). Dans le cas du volume, les transitions de phase sont de premier ordre pour $d \leq -3$ (**Fig.4.6b**). Ceci est en conforme avec les résultats de la figure (**Fig.4.5-b**).

En augmentant l'intensité du champ magnétique, le volume passe à une phase désordonnée $M_b = 0$, alors que la surface est maintenue dans un état ferromagnétique avant qu'elle passe dans un état désordonnée à haute température (**Fig. 4.6c**).

Dans le cas où le couplage de la surface est supérieur à celui du volume (**Fig. 4.6d**) et en présence d'un champ magnétique moyen $h = 0.5$, le volume passe à la phase paramagnétique avant la surface, la transition du premier est marquée par un point tricritique, tandis que la transition de la surface se fait de manière continue. Lorsque le système est exposé à un champ fort, $h = 7$, comme montré dans la figure (**Fig. 4.6e**), la surface se désordonne de façon discontinue alors que le volume est complètement désordonné.

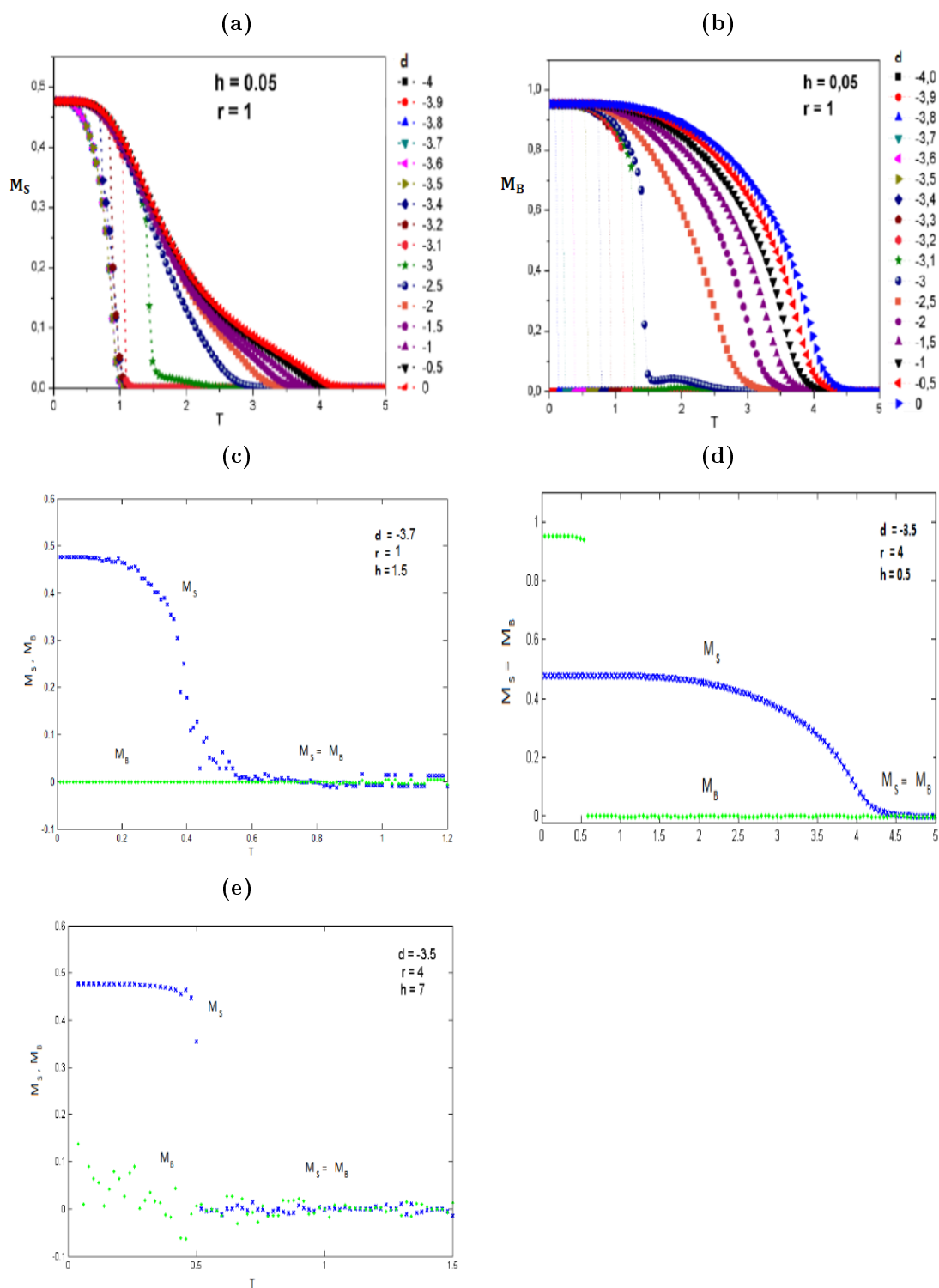


FIGURE 4.6 – Les aimantations de la surface (a) et du volume (b) en fonction de la température pour $r = 1$ et $h = 0.05$ et pour une série de valeurs du champ cristallin. Une transition discontinue de la surface est observée en (c) pour $d = -3.7$, $r = 1$ et $h = 1.5$ et devient continue pour des valeurs élevées de h et r (e). Une transition extraordinaire est représentée sur (d) pour $d = -3.5$, $r = 4$ et $h = 0.5$.

d'autre part et dans le but de distinguer les phases dynamiques de celles statiques on se propose d'exploiter les solutions du système dans l'espace des phases ($\dot{m} = \frac{dm}{dt}, m$). On peut identifier deux types de solutions : le premier type est représenté dans le diagramme de phase par des points fixes obtenus à basse température et pour des valeurs faibles du champ magnétique. Les solutions du second type sont représentées par des cycles limites dont la largeur augmente avec la température et les valeurs du champ magnétique et cristallin. Sur la (**Fig. 4.7**) on visualise le comportement de $\dot{m}(t)$ en fonction de $m(t)$ lorsque le système est soumis à un champ magnétique faible $h = 0.05$ et élevé $h = 3$.

Les (**Figs. 4.7a-b**) tracées pour $h = 0.05$, $r = 1$ et $d = 2$ à basse et haute températures ($T = 0.02$ et $T = 2.5$) montre que les phases ferromagnétiques $M_S = 1$, $M_B = 1/2$ sont représentées par des points fixes, l'augmentation du champ $h = 3$ (**Fig. 4.7c**), montre que les phases ordonnées de la surface et du volume sont représentées respectivement par un cycle limite et un point fixe, ce résultat est en accord avec la (**Fig. 4.1b**). Si on augmente d'avantage l'intensité du champ magnétique, comme indiqué par la (**Fig. 4.8**) pour $h = 11$, $r = 6$ et $T = 6$, on obtient un cycle limite large centré autour du point zéro, il représente la phase paramagnétique du volume.

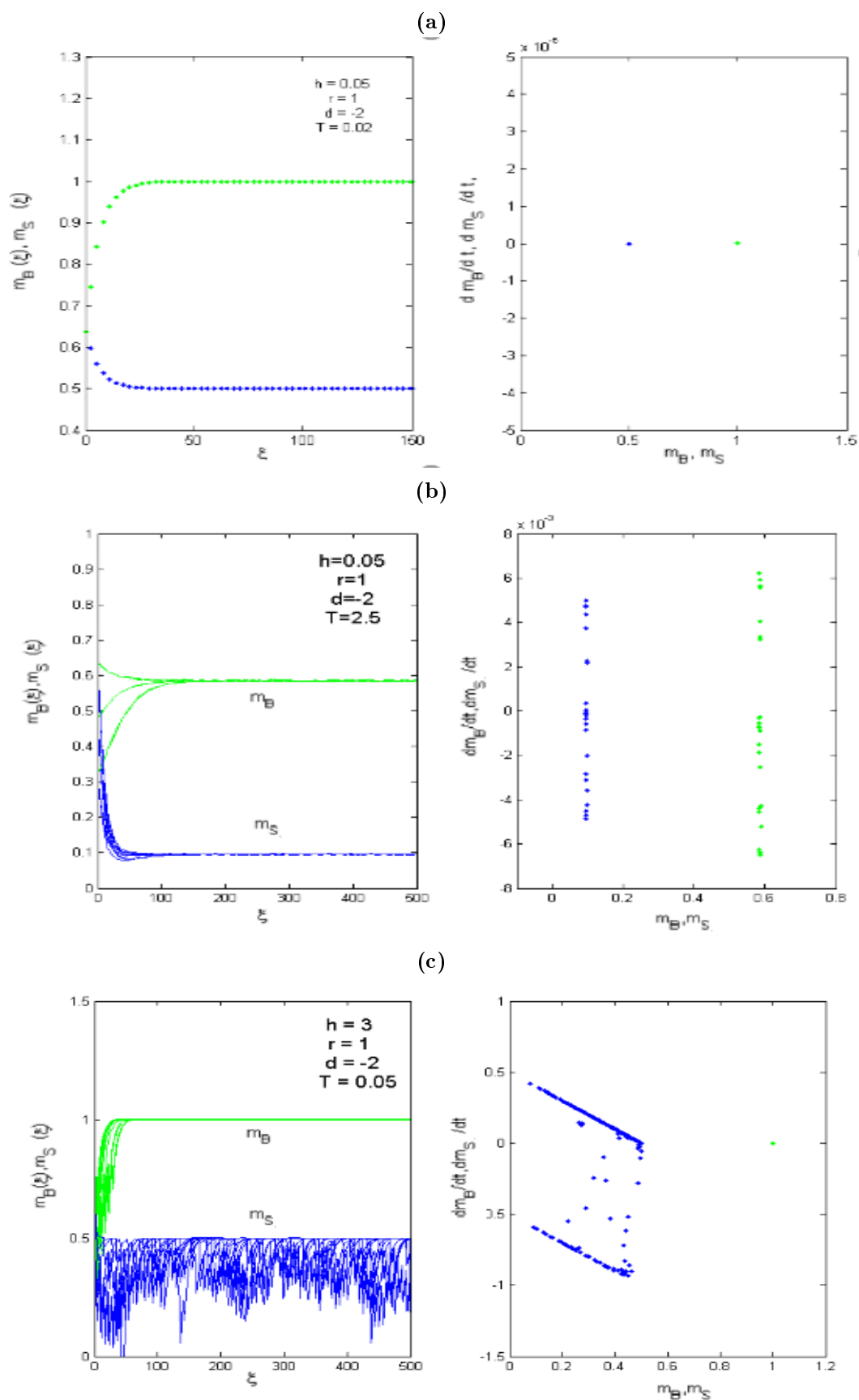


FIGURE 4.7 – Solutions pour différentes conditions initiales avec $r = 1$ et $d = -2$ Figures (a) et (b) sont respectivement tracées pour $h = 0.05$ et les valeurs choisies de $T = 0.02$ et $T = 2.5$. Figure (c) est tracée pour $h = 3$ et $T = 0.05$. Les points fixes correspondants et les cycles limites sont représentés sur l'espace des phases.

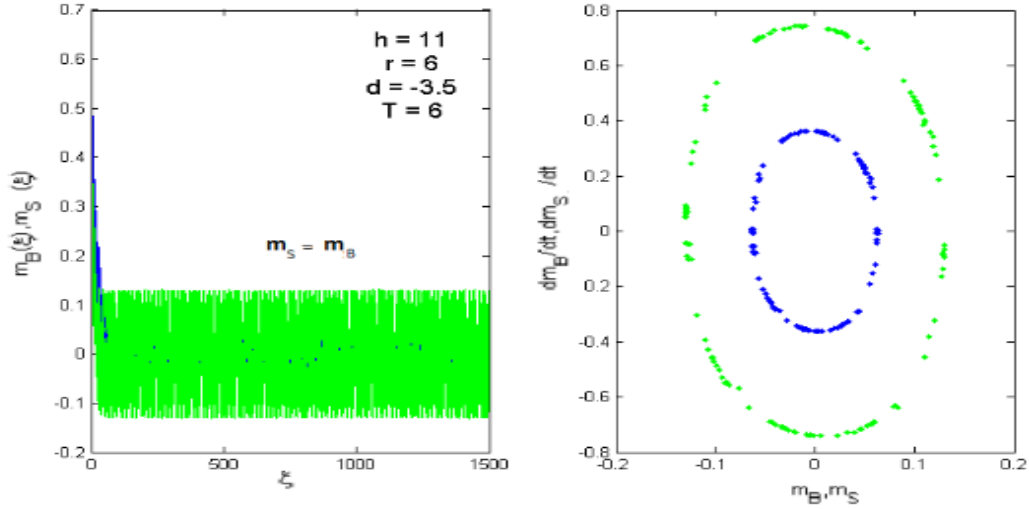


FIGURE 4.8 – Solutions du système dans l'espace des phases en présence d'un champ magnétique fort pour $r = 6$, $d = -3.5$ et $T = 6$. le système est très perturbé une phase paramagnétique représentée par une ellipse centrée autour du point zéro.

4.4 Conclusion

En utilisant la méthode MFA, nous avons étudié les propriétés magnétiques du modèle d'Ising semi-infini dont la surface et le volume sont occupés respectivement par les spins $\sigma = 1/2$ et $S = 1$. Plus précisément nous nous sommes intéressés à examiner l'effet du champ cristallin sur les états stationnaires du système en présence d'un champ externe oscillant par la dynamique de Glauber-type stochastique. Nous avons montré que le système exhibe une variété riche de topologie des diagrammes de phase incluant des phases (BP, SF) , (BF, SF) et (BP, SP) et des transitions de phases dynamiques ordinaires et extraordinaires. Par ailleurs, les diagrammes de phases dépendent essentiellement de la compétition entre des paramètres de contrôle du système à savoir le champ cristallin, le champ magnétique et les constantes de couplage, en effet nous avons constaté que le système peut exhiber une transition extraordinaire pour des valeurs bien choisies de paramètres ci-dessus. Par exemple dans le cas où l'intensité du

champ magnétique réduit est faible et si les constantes du couplage de la surface sont inférieures à celles du volume $r \leq 1$, le système présente une transition extraordinaire du premier ordre. Si les interactions de la surface deviennent importantes $r > 1$, la transition extraordinaire est de second ordre et se termine avec un point tricritique dynamique. Dans le cas où le système est soumis à un champ magnétique fort, la présence de la phase extraordinaire dépend de la compétition entre le champ cristallin réduit et le facteur $r = \frac{J_s}{J_b}$. La phase extraordinaire disparaît complètement si le système est soumis à un champ magnétique très fort.

D'autre part, l'investigation des trajectoires dans le diagramme des phases a révélé l'existence des phases statiques et dynamiques qui sont représentées successivement par des points fixes et des cycles limites. Ces trajectoires dépendent de la valeurs des champs magnétique et cristallin et de la température.

Conclusion générale

Dans cette thèse nous avons mené une étude théorique sur le comportement magnétique et thermique des systèmes d'Ising de spins mixtes. Dans un premier temps, nous avons introduit des généralités sur les transitions de phase des systèmes magnétiques, les modèles de spin et les méthodes utilisées. Ensuite, nous avons déterminé l'influence du champ cristallin aléatoire sur les propriétés thermique et magnétique et sur les transitions de phases d'un système d'Ising de spins mixtes $(1, 3/2)$. En troisième lieu nous avons étudié l'impact d'un champ cristallin aléatoire sur le système d'Ising de spins mixtes (spin-1 et spin-3/2) en présence d'un champ magnétique extérieur dépendant du temps, dans ce cas nous avons utilisé la dynamique stochastique de Glauber et l'approximation du champ moyen. Après, nous avons utilisé la même dynamique et la même méthode pour traiter l'effet du champ cristallin, l'effet du champ oscillant et l'impact des constantes de couplage sur un système semi infini dont la surface et le volume sont occupés respectivement par les spins $\sigma = 1/2$ et $S = 1$.

Ce travail de thèse a fait objet de trois contributions scientifiques :

Dans la première contribution, nous avons déterminé les diagrammes de phase dans le plan (t_c, d) pour observer l'influence du champ cristallin sur les transitions pour des valeurs précises du paramètre α . Les résultats obtenus montrent que le système présente une variété des lignes de transition de premier et de second ordre avec l'apparition des points triples, tricritiques. A très basse température, le système exhibe des lignes de transition de premier ordre qui se terminent par des points critiques isolés, mais

elles disparaissent avec l'augmentation de la température. Nous avons observé aussi, que le phénomène important de compensation dépend fortement du champ cristallin d et de son caractère aléatoire exprimé par le paramètre α . Les points de compensation apparaissent seulement dans les intervalles $0 \leq \alpha \leq 0.31$ et $1.931 \leq d \leq 2.222$, le système peut faire apparaître un, deux ou trois points de compensation, mais nous avons omis le dernier résultat en raison de la très faible valeur des aimantations partielles. Nous avons donné également la classification de Néel pour vérifier l'existence ou non du phénomène de compensation.

Dans la deuxième contribution, nous avons examiné, en utilisant l'approximation du champ moyen, l'effet du champ cristallin aléatoire sur les états stationnaires du système mixte ferrimagnétique spin-1 et spin-3/2, sous l'influence d'un champ magnétique externe oscillant en faisant appel à la dynamique stochastique de Glauber. Pour résoudre les équations du champ moyen dynamiques obtenues à partir de l'équation maîtresse, nous nous sommes servis de la méthode d'Adams Moulton predictor-corrector. L'aimantation moyenne, qui est le paramètre dynamique, est calculée par l'intégrale de Simpson. L'effet du champ cristallin aléatoire sur l'aimantation et les diagrammes de phases a été exploré en détail, suivant les valeurs du champ magnétique h et les paramètres α , T et d , le système présente des transitions de phases dynamiques du premier et deuxième ordre et une panoplie de phases de coexistence apparaissent avec l'existence des points tricritiques dynamiques, points critiques isolés les points triples dynamiques. Le système exhibe aussi le phénomène de réentrance normale et opposé en absence et en présence du caractère aléatoire du champ cristallin. Nous avons constaté que le système est très sensible aux modifications de l'intensité du champ magnétique réduit, il devient très perturbé pour des champ oscillant forts.

Le dernier travail a été dédié à l'étude des transitions de phase dynamique du modèle d'Ising semi-infini avec un volume de spin $S = 1$ et une surface de spin $\sigma = 1/2$. Le système exhibe une variété de topologies de diagrammes de phase

(BP, SF) , (BF, SF) et (BP, SP) . De plus, Nous avons montré que le système manifeste une transition extraordinaire de second ordre, qui se termine par un point tricritique, pour $r = \frac{J_S}{J_B} \geq 1$ et de premier ordre pour $r < 1$. D'autre part, la représentation des trajectoires dans l'espace des phases a permis de distinguer entre les phases dynamiques et statiques représentées respectivement par des cycles limites et des points fixes.

Toutefois, le travail réalisé n'est qu'un début d'autres avenues de recherche, il serait intéressant d'entreprendre ces études en utilisant d'autres techniques et d'autres méthodes (champ effectif, simulation Monte-Carlo...). Nous projetons aussi d'utiliser ces modèles théoriques pour comprendre le comportement magnétique et thermique des nano-particules et des composés magnétiques.

Contributions

1. **Kinetic phase transitions for the semi-infinite Ising model with bulk $S = 1$ and a free surface $\sigma = 1/2$ under an oscillating magnetic field**

Physica A : Statistical Mechanics and its Applications (2018)

2. **Random Crystal Field Effect on the Kinetic Spin-1 and Spin-3/2 Under a Time-Dependent Oscillating Field Phase Transitions**

Journal of Superconductivity and Novel Magnetism (2016).

3. **Phase transitions of Ising mixed spin 1 and 3/2 with random crystal field distribution**

Physica A : Statistical Mechanics and its Applications (2016)

4. **Random crystal field effect on the mixed spin $(1, 3/2)$ phase transition**

Journées Nationales des Doctorants et des Jeunes Chercheurs 18-20 Juillet 2017,
Rabat



Phase transitions of Ising mixed spin 1 and 3/2 with random crystal field distribution

S. Sabri ^a, M. EL Falaki ^b, M. EL Yadari ^a, A. Benyoussef ^a, A. EL Kenz ^a  

 Show more

<https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.04.012>

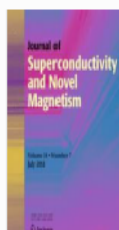
[Get rights and conten](#)

Highlights

- The Ising mixed spin-1 and spin-3/2, in the presence of the random crystal field, is studied.
- The mean field approach based on the Bogoliubov inequality for the Gibbs free energy is used.
- Five topologies of the phase diagrams have been presented and discussed.

Abstract

The thermal and magnetic properties of the mixed spin-1 and spin-3/2 in the presence of the random crystal field are studied within the mean field approach based on the Bogoliubov inequality for the Gibbs free energy. The model exhibits first, second order transitions, a tricritical point, triple point and an isolated critical end point. It is found that the system displays simple and double compensation temperatures, five topologies of the phase diagrams. A re-entrant phenomenon is also discussed and the thermal dependences of total magnetization according to extended Neel classification have been also given.



[Journal of Superconductivity and Novel Magnetism](#)

July 2018, Volume 31, Issue 7, pp 2111-2120 | [Cite as](#)

Random Crystal Field Effect on the Kinetic Spin-1 and Spin-3/2 Under a Time-Dependent Oscillating Field Phase Transitions

Authors

[Authors and affiliations](#)

S. Sabri , M. EL Falaki, M. EL Yadari, A. Benyoussef, A. EL Kenz

Original Paper

First Online: 27 November 2017

67

Downloads

1

Citations

Abstract

The effect of random crystal field on the stationary states of the kinetic spin-1 and spin-3/2 Blume-Capel model is investigated within the framework of the mean field approach. The Glauber-type stochastic dynamics is used to describe the time evolution of the system which is subjected to a time-dependent oscillating external magnetic field. The model exhibits first- and second-order transitions as well as dynamical tricritical, triple and an isolated critical end points. We found that the system displays reentrant phenomenon for both $\alpha = 0$ and $\alpha > 0$. Moreover, the system exhibits in the phase space a fixed points and limit cycles with circle, elliptic and parallelogram shapes.

Keywords

Kinetic mixed spin system Mean field approach Random crystal field



Kinetic phase transitions for the semi-infinite Ising model with bulk $S = 1$ and a free surface $\sigma = \frac{1}{2}$ under an oscillating magnetic field

S. Sabri ^a, A.G. El Hachimi ^a ✉, M. El Yadari ^b, A. Benyoussef ^c, A. El Kenz ^a

✉ [Show more](#)

<https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.05.130>

[Get rights and content](#)

Highlights

- Kinetic phase transitions for the semi-infinite Ising model with bulk $S = 1$ and free surface $\sigma = \frac{1}{2}$ under an oscillating magnetic field is studied.
- Dynamical phases appears (BP, SF), completely ordered (BF, SF) dynamical phase, and disordered phase (BP, SP) that strongly depend on interaction parameters.
- The system exhibits dynamical tricritical phenomenon, dynamical first and second order phase transitions.
- The system exhibits fixed points and limit cycles in the phase space trajectories.

Abstract

The kinetics of the semi-infinite **Ising model** in the presence of a time dependent oscillating **external field** is studied within the framework of the mean-field approach. We use the Glauber-type stochastic dynamics to describe the **time evolution** of this system. We present a variety of phases in semi infinite cubic **ferromagnet** with spin 1 at the bulk and spin $\frac{1}{2}$ at the surface. The obtained **Phase diagrams** contains surface ordered phase (BP, SF), completely ordered phase (BF, SF) and completely disordered phase (BP, SP) that strongly depend on interaction parameters. The first or second order nature of the transitions is characterized by studying the thermal behaviors of the dynamic **magnetizations**. Furthermore, the system exhibits dynamical tricritical phenomenon. The magnetizations and **phase space** trajectories are given and discussed.

Bibliographie

- [1] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. V. Dau, Nguyen, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, "Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, pp. 2472–2475, 1988.
- [2] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, and H. Sowers, "Layered magnetic structures : Evidence for antiferromagnetic coupling of fe layers across cr interlayers," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 57, pp. 2442–2445, 1986.
- [3] J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, and R. Meservey, "Large magnetoresistance at room temperature in ferromagnetic thin film tunnel junctions," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, p. 3273, 1995.
- [4] S. Maekawau, "Spin-dependent transport in magnetic nanostructures," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 272-276, pp. E1459 – E1463, 2004. Proceedings of the International Conference on Magnetism (ICM 2003).
- [5] V. der Zee J, "Heating the patient : a promising approach?," *Ann Oncol.*, vol. 13, no. 8, pp. 1173–84, 2002.
- [6] B. Thiesen and A. Jordan, "Clinical application of magnetic nanoparticles for hyperthermia," *Int. J. Hyperthermia*, vol. 24.
- [7] M. L. Néel, "Propriétés magnétiques des ferrites ; ferrimagnétisme et antiferromagnétisme," *Ann. Phys. Paris*, vol. 12, no. 3, p. 137, 1948.

- [8] A. Herpin, *Théorie du magnétisme*.
Presses Universitaire de France : Saclay, 1968.
- [9] M. M. MANSURIPUR, *The physical principles of magneto-optical recording*.
Cambridge University Press., 1995.
- [10] M. Mansuripur, *The Physical Principles of Magneto-optical Recording*.
Cam-bridge University Press, 1998.
- [11] A. Bobak and M. Jureisin, “A theoretical study of the diluted mixed spin-1 and spin- 3/2 ising ferrimagnet,” *Physi. B*, vol. 233, p. 187, 1997.
- [12] T. S. Liu, G. Z. Wei, and Z. H. Xin, “Magnetic properties of transverse ferrima-
gnetic ising model,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 173, no. 1-2, p. 179, 1997.
- [13] Z. H. Xin, G. Z. Wei, and T. S. Liu, “Properties of the mixed spin-1 and spin-32
ising system on a square lattice,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 188, no. 1-2,
p. 65, 1998.
- [14] G. Z. Wei, Z. H. Xin, and J. Wei, “Phase diagrams and tricritical behavior in
mixed spin-1 and spin-32 ising model on honeycomb lattice,” *J. Magn. Magn.
Mater.*, vol. 204, no. 1-2, p. 144, 1999.
- [15] A. Bobàk, “Multicritical points in the mixed spin-1 and spin- 3/2 ising system
on a square lattice with different single-ion anisotropies,” *Phys. A, Statistical
Mechanics and its Applications*, vol. 286, no. 3, p. 531, 2000.
- [16] J. Wei, W. Guo-zhu, and Z. Zhi-dong, “transverse ising model with a crystal
field,” *Phys. Rev. B* 68, vol. 68, p. 134432, 2003.
- [17] O. F. Abubrig, D. Horvath, A. Bobak, and M. Jascur, “Mean-field solution of the
mixed spin-1 and spin-3/2 ising system with different single-ion anisotropies,”
Phys. A, vol. 11, p. 296, 2001.

- [18] S. Sabri, M. E. Falaki, M. E. Yadari, A. Benyoussef, and A. E. Kenz, "Phase transitions of ising mixed spin-1 and spin-3/2 with random crystal field distribution," *Phys. A : Stat. Mech. Appl.*, vol. 460, p. 210, 2016.
- [19] J. W. Tucker, "Mixed spin 1-spin 3/2 blume-capel ising ferromagnet," *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 237, p. 215, 2001.
- [20] J. Liu, Q. Zhang, H. Yu, and F. Sun, "Magnetic properties of the ising ferromagnetic iron nitride system," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.*, vol. 288, no. 0304-8853, pp. 48–53, 2005.
- [21] Y. Nakamura and J. W. Tucker, "Monte carlo study of a mixed spin-1 and spin-3/2 ising ferromagnet," *IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS.*, vol. 38, no. 5, pp. 2406–2408, 2002.
- [22] G. Z. Wei, Q. Zhang, and Y. Gu, "Monte carlo studies of critical phenomena in mixed spin-1 and spin-3/2 blume-capel ising model on simple cubic lattice," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 301, no. 1, pp. 245–250, 2006.
- [23] E. Albayrak, "Mixed spin-1 and spin- blume-capel ising ferrimagnetic system on the bethe lattice," *International Journal of Modern Physics B*, vol. 17, no. 07, pp. 1087–1100, 2003.
- [24] E. Albayrak and A. Alçi, "Mixed spin-12 and spin-32 blume-capel ising ferrimagnetic system on the bethe lattice," *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 345, no. 1, pp. 48 – 60, 2005.
- [25] M. Madani, A. Gayea, and M. E. Bouziani, "Migdal-kadanoff solution of the mixed spin-1 and spin-3/2 blume-capel model with different single-ion anisotropies," *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 437, no. C, pp. 396–404, 2015.

- [26] M. E. Bouziani and A. Gaye, “The two- and three-dimensional spin-3/2 random blume–capel model by the position space renormalization group,” *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 392, p. 2643–2651, 2013.
- [27] G. Mert, “Green’s function study of a mixed spin-1 and spin-3/2 heisenberg ferrimagnetic system,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.*, vol. 324, no. 18, pp. 2706 – 2710, 2012.
- [28] M. Keskin, E. Kantar, and O. Canko, “Kinetics of a mixed spin-1 and spin-3/2 ising system under a time-dependent oscillating magnetic field,” *Physical Review E*, vol. 77, no. 9, p. 051130, 2008.
- [29] M. Keskin and E. Kantar, “Dynamic compensation temperatures in a mixed spin-1 and spin-3/2 ising system under a time-dependent oscillating magnetic field,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.*, vol. 322, no. 18, pp. 2789 – 2796, 2010.
- [30] E. Vatansever and H. Polat, “Monte carlo investigation of a spherical ferrimagnetic core–shell nanoparticle under a time dependent magnetic field,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.*, vol. 343, p. 221–227, 2013.
- [31] X. Shi, J. Zhao, and X. Xu, “Phase diagram of the mixed ising model with fe₄n structure under a time-dependent oscillating magnetic field,” *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications.*, vol. 419, pp. 234–240, 2015.
- [32] B. Deviren and Y. Sener, “Magnetic properties of mixed spin (1,3/2) ising nanoparticles with core–shell structure,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.*, vol. 386, pp. 12–19, 2015.
- [33] M. Erta and M. Keskin, “Dynamic hysteresis features in a two-dimensional mixed ising system,” *Physics Letters A*, vol. 379, no. 26, p. 1576–1583, 2015.
- [34] O. Kahn, “Magnetism of the heteropolymetallic systems,” *Struct Bonding*, vol. 68, 1987.

- [35] M. L. Kahn and al., "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.*, vol. 122, p. 3413, 2000.
- [36] V. Pecharsky and K. G. Jr, "Giant magnetocaloric effect in $gd_5(si_2ge_2)$," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, no. 23, p. 4494, 1997.
- [37] A. Aharoni, *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*, vol. 109. Clarendon Press, 2000.
- [38] D. Dunlop and O. Ozdemir, *Rock magnetism : fundamentals and frontiers*, vol. 3. New York : Cambridge University Press, 2001.
- [39] W. Heisenberg, "Zur theorie der ferromagnetismus.," *Zeitschrift für Physik.*, vol. 49, pp. 619–636, 1928.
- [40] J. M. D. COEY, *Magnetism and Magnetic Materials*. New York : Cambridge University Press, 2010.
- [41] J. H. V. Vleck, "Theory of the variations in paramagnetic anisotropy among different salts of the iron group," *Physical Review*, vol. 41, Issue 2, pp. 208-215.
- [42] W. Lenz, "Beiträge zum verständnis der magnetischen eigenschaften in festen körpern :contributions to understanding the magnetic properties in solid bodies .," *Zeitschrift für Physik.*, vol. 21, pp. 613–615, 1920.
- [43] E. Ising, "Beitrag zur theorie des ferromagnetismus/contribution to the theory of ferromagnetism," *Zeitschrift für Physik.*, vol. 31, pp. 253–258, 1925.
- [44] R. Peierls, "On ising's model of ferromagnetism," *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Societe*, vol. 32, pp. 477–481, 1936.
- [45] Onsager and Lars, "Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition," *Phys. Rev.*, vol. 65, pp. 117–149, 1944.

- [46] V. E. Berezinskii, "Zur theorie der ferromagnetismus.," *Sov. Phys. JETP*, vol. 32, p. 493, 1971.
- [47] J. Fernandez, M. Ferreira, and J. Stankiewicz, "Critical behavior of the two-dimensional xy model : A monte carlo simulation," *Phys. Rev.*, vol. B34, p. 292, 1986.
- [48] M. J. Tejwani, O. Ferreira, and O. E. Vilches, "Possible ising transition in a ^4He monolayer adsorbed on kr-plated graphite," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 44, pp. 152–155, 1980.
- [49] R. L. Park, T. L. Einstein, A. R. Kortan, and L. D. Roelofs, *in Ordering in Two Dimensions*.
S.K.Sinha and North-Holland, New York, 1980.
- [50] R. B. Potts and C. Domb, "Some generalized order-disorder transformations," *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 48, p. 106, 1952.
- [51] M. Blume, "Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 ," *Phys. Rev.*, vol. 141, pp. 517–524, 1966.
- [52] 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.
- [53] F. Harbus and H. E. Stanley, "Ising-model "metamagnet" and tricritical susceptibility exponent," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 29, pp. 58–62, 1972.
- [54] A. Aharony, "in critical phenomena," *Lecture Notes in Physics*, vol. 186, p. 210, 1983.
- [55] D. P. na Lara, G. A. P. Alcázar, Zamora, E. Ligia, and J. A. Plascak, "Blume-capel model for $(\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35})_{1-x}\text{Mn}_x$ and $\text{Fe}_p\text{Al}_q\text{Mn}_x$ alloys," *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 014427, 2009.

- [56] M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths, “Ising model for the λ transition and phase separation in he-he mixtures,” *Phys.Rev.*, vol. A4, pp. 1071–1077, 1971.
- [57] H. Nishimori and G. Ortiz, *Elements of phase transitions and critical phenomena*, p. 1.
Oxford : Oxford University Press, 2015.
- [58] P. Weiss, “L’hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique,” *J. Phys. Theor. Appl.*, vol. 6, no. 1, pp. 661–690, 1907.
- [59] C. Domb and J. L. Lebowitz, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 18.
Elsevier, 2001.
- [60] N. N. Bogoliubov, “On the theory of superfluidity,” *J. Phys(USSR)*, vol. 11, pp. 23–32, 1947.
- [61] R. P. Feynman, “Slow electrons in a polar crystal,” *Phys. Rev.*, vol. 97, no. 3, pp. 660–665, 1955.
- [62] F. Abubrig, M. Delfag, and S. M. Abuzariba, “The effect of the crystal field interaction on the critical temperatures and the sublattice magnetizations of a mixed spin-3/2 and spin-5/2 ferrimagnetic system,” *Tech. Int. J. of Math. and Comp.*, vol. 8, no. 3, pp. 543 – 549, 2014.
- [63] J. S. da Cruz Filho, M. Godoy, and A. S. de Arruda, “Phase diagram of the mixed spin-2 and spin-5/2 ising system with two different single-ion anisotropies,” *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 24, pp. 6247–6254, 2011.
- [64] R. Peierls, “On a minimum property of the free energy,” *Phys. Rev.*, vol. 54, pp. 918–919, Dec 1938.
- [65] R. P. Feynman, *Statistical mechanics : a set of lectures*.
Reading Mass W. A. Benjamin., 1972.

- [66] A. Bravais, "Mémoire sur les systèmes formés par des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace," *Journal de l'École Polytechnique. Paris.*, vol. 19, pp. 1–128, 1850.
- [67] H. B. Callen, "A note on green functions and the ising model," *Phys. Lett.*, vol. 4, p. 161, 1963.
- [68] R. Honmura and T. Kaneyoshi, "Contribution to the new type of effective-field theory of the ising model," *Journal of Physics C Solid State Physics*, vol. 12, p. 3979, 3992 1979.
- [69] C. N. Yang, *Selected Papers (1945-1980) with Commentary*.
World Scientific, 2005.
- [70] F. Zernike, "The propagation of order in cooperative phenomena- part i. the ab case.," *Physica*, vol. 7, pp. 565–585, 1940.
- [71] N. Boccara *Phys. Lett. A*, vol. 94, p. 185, 1983.
- [72] A. Benyoussef and N. Boccara *J. App. Phys.*, vol. 55, p. 6, 1985.
- [73] A. E. Kenz, "Etude des transitions de phases : propriétés magnétiques et transitions de mouillage," *Thèse d'Etat*, p. 170, 1993.
- [74] M. Newman and G. Barkema, *Monte Carlo methods in statistical physics*.
Oxford University Press.
- [75] O. Khan, *Molecular Magnetism*.
Wiley-VCH publishers and New York, 1993.
- [76] D. Gatteschi, O. Khan, J. S. Miller, and F. Palacio, *Magnetic Molecular Materials*.
Springer Netherlands, 1991.
- [77] T. Kaneyoshi and Y. Nakamura, "A theoretical investigation for low-dimensional molecular-based magnetic materials," *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 10, no. 13, p. 3003, 1998.

- [78] J. Kaneyoshi and C. Chen, "Mean-field analysis of a ferrimagnetic mixed spin system," *J.Magn. Magn. Mater.*, vol. 98, p. 201, 1991.
- [79] A. Benyoussef, T. Biaz, M. Saber, and M. Touzani, "The spin-1 ising model with a random crystal field : the mean-field solution," *Journal of Physics C : Solid State Physics*, vol. 20, p. 5349, ** 1987.
- [80] L. Bahmad, A. Benyoussef, and A. E. Kenz, "Effects of a random crystal field on the spin-2 blume-capel model," *Phys.Rev.B*, vol. 76, no. 9, p. 094412, 2007.
- [81] A. Benyoussef, A. E. Kenz, and M. E. Yadari, "Decorated ferrimagnetic ising model with a random crystal field," *Physica B-condensed Matter - PHYSICA B*, vol. 393, pp. 204–212, 2007.
- [82] T. Kaneyoshi, "Contribution to the theory of mixed ising spin systems," *Phys. B Condensed Matter*, vol. 71, no. 1, pp. 109–1016, 1988.
- [83] J. Strecka, "Exact results of a mixed spin-1/2 and spin-s ising model on a bathroom tile (4–8) lattice : Effect of uniaxial single-ion anisotropy," *Physica A*, vol. 360, no. 2, p. 379, 2006.
- [84] C. Ekiz, J. Strecka, and M. JaScur, "Mixed spin-1/2 and spin-1 ising model with uniaxial and biaxial single-ion anisotropy on the bethe lattice," *Cent. Eur. J. Phys.*, vol. 7, no. 3, pp. 509–520, 2009.
- [85] S. Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*.
Oxford University Press and Oxford, 1997.
- [86] R. J. Glauber, "Time-dependent statistics of the ising model," *Journal of Mathematical Physics.*, vol. 4, no. 2, pp. 294–307, 1963.
- [87] K. Kawasaki, "Diffusion constants near the critical point for time-dependent ising models. i," *Physical Review*, vol. 145, no. 1, pp. 1224–230, 1966.

- [88] W. Y. Yang, W. Cao, T. S. Chung, and J. Morris, *Applied Numerical Methods Using MatLab and Wiley Interscience*, pp. 269–273.
Oxford : Oxford University Press, 2005.
- [89] W. Y. Yang, W. Cao, T. S. Chung, and J. Morris, *Applied Numerical Methods Using MatLab, Wiley Interscience*, pp. 226–227.
Oxford : Oxford University Press, 2005.
- [90] T. Tânia and de Oliveira Mário J., “Dynamic phase transition in the kinetic ising model under a time-dependent oscillating field,” *Phys. Rev. A*, vol. 41, pp. 4251–4254, 1990.
- [91] G. M. Buendía and e. Machado, “Kinetics of a mixed ising ferrimagnetic system,” *Phys. Rev. E*, vol. 58, p. 1260, 1998.
- [92] K. Binder, *In Monte Carlo Methods in Statistical Physic*, vol. 7.
Springer-Verlag Berlin : Heidelberg, 1986.
- [93] H. Fehske, R. Schneider, and A. Weiße, *Computational Many-Particle Physics*, vol. 739 of *Lecture Notes in Physics*, Berlin Springer Verlag.
Springer, Berlin Heidelberg, 2008.
- [94] K. Binder, “in phase transitions and critical phenomena,” *Academic, New York*, vol. 3, p. 325, 1983.
- [95] M. P. Kaganov and A. V. Chubukov, “in magnetic properties of crystalline and amorphous media,” *Nauka, Novosibirsk*, p. 148, 1989.
- [96] . H. W. Diehl *J. Mod. Phys*, vol. B11, p. 3503, 1997.
- [97] K. Binder and D. P. Landau, “in phase transitions and critical phenomena,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, p. 318, 1984.
- [98] J. M. Sanchez and J. L. Morian-Lopez, “Surface first-order phase transitions in fcc ising ferromagnets,” *Phys. Rev. Lett. 58,1120 (1987).*, vol. 58, p. 1120, 1987.

- [99] T. C. Lubensky and M. H. Rubin, "Critical phenomena in semi-infinite systems. ii. mean-field theory," *Phys. Rev. B*, vol. 12, no. 9, pp. 3885–3901, 1975.
- [100] D. L. Mills, "Surface effects in magnetic crystals near the ordering temperature," *Phys. Rev. B*, vol. 3, no. 11, pp. 3887–3895, 1971.
- [101] K. Binder and P. C. Hohenberg, "Phase transitions and static spin correlations in ising models with free surfaces," *Phys. Rev. B*, vol. 6, no. 9, pp. 3461–3487, 1972.
- [102] T. Kaneyoshi, "Surface magnetic properties of a semi-infinite ising model with a spin-1 free surface," *Physical Review B*, vol. 43, no. 7, pp. 6109–6117, 1991.
- [103] W. Burkhardt, , and E. Eùisenriegler, "Renormalization-group approach to the ising model with a free surface," *Phys. Rev. B*, vol. 16, no. 7, pp. 3213–3222, 1977.
- [104] R. Lipowsky and H. Wagner, "The migdal-kadanoff renormalization group scheme for the ising model with a free surface," *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 42, no. 4, p. 355, 1981.
- [105] K. Binder and P. C. Hohenberg, "Surface effects on magnetic phase transitions," *Phys. Rev. B*, vol. 9, no. 5, pp. 2194–2214, 1974.
- [106] M. Hasenbusch, "Thermodynamic casimir force : A monte carlo study of the crossover between the ordinary and the normal surface universality class," *Phys. Rev. B*, vol. 83, no. 13, p. 134425, 2011.
- [107] K. Binder and D. P. Landau, "Crossover scaling and critical behavior at the "surface-bulk" multicritical point," *hys. Rev. Lett.*, vol. 52, no. 5, pp. 318–321, 1984.
- [108] A. G. E. Hachimi, M. E. Yadari, A. Benyoussef, A. E. Kenz, and L. Bahmad, "Kinetic phase transition in the semi-infinite ising model under an oscillating field," *Physica A*, vol. 410, pp. 370–379, 2014.

-
- [109] P. Riego, P. Vavassori, and A. Berger *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 117202, 2017.
- [110] M. Suzuki and R. Kubo, “Dynamics of the ising model near the critical point. i,” *Journal of the Physical Society of Japan.*, vol. 24, no. 1, pp. 51–60, 1968.
- [111] J.F.Gouyet, “Atomic mobility and spinodal-decomposition dynamics in lattice gases. simple discrete models,” *Europhys. Lett.*, vol. 21, p. 335, 1993.
- [112] J.F.Gouyet, “Generalized allen–cahn equations to describe far-from-equilibrium order–disorder dynamics,” *Phys. Rev. E*, vol. 51, p. 1695, 1995.
- [113] M. Plapp and J.-F. Gouyet, “Dendritic growth in a mean-field lattice gas model,” *Phys. Rev. E*, vol. 55, p. 45, 1997.
- [114] “Dynamics of vacancy-mediated phase separation,” *Phys. Rev. E*, vol. 55, p. 1752, 1997.
- [115] S.Puri and R. Sharma, “Phase ordering dynamics in binary mixtures with annealed vacancies,” *Phys. Rev. E*, vol. 57, p. 1998, 1998.

Résumé

Cette thèse porte sur l'étude théorique de l'effet du champ cristallin aléatoire sur les transitions de phase des systèmes d'Ising de spin mixte. Nous envisageons les cas statique et dynamique en présence d'un champ magnétique extérieur oscillant.

En utilisant l'approximation du champ moyen basée sur l'inégalité de Bogoliubov nous avons montré que le système d'Ising de spins mixtes étudié présente une variété des lignes de transition de premier et de second ordre avec l'apparition des points multicritiques. A très basse température, le système exhibe des lignes de transitions de premier ordre qui se terminent par des points critiques isolés, mais elles disparaissent avec l'augmentation de la température. L'exploration du système a révélé l'existence des phénomènes de réentrance et de compensation.

En combinant la théorie du champ moyen et la dynamique stochastique de Glauber en présence d'un champ magnétique externe dépendant du temps, nous avons investigué l'effet du champ cristallin sur le système ferrimagnétique sur un réseau 2d et sur les systèmes semi-infinis. Nous avons obtenu une variété des diagrammes de phase statiques et dynamiques représentés dans l'espace des phases respectivement par des points fixes et des cycles limites.

Mots-clefs: *Transition de Phases; Systèmes Mixtes; Système Semi-infini; Réentrance; Température de Compensation; Champ Cristallin Aléatoire; Dynamique de Spin.*

Abstract

The aim of this dissertation is to pinpoint the effect of the random crystal field on the phase transitions of the mixed spin Ising systems with considering a static and a dynamic cases.

Dealing with the mean field approximation based on Bogoliubov inequality we have shown that the mixed spin Ising system ($S^a = 1, S^b = 3/2$) presents a variety of phase transition lines with first and second order phase lines transitions. The system presents tricritical and triple points. It is also has been found the emphasis of the one and double compensation points for selected values of crystal field. We also observed that the system exhibits reentrant phenomenon.

Secondly, we addressed the effect of random crystal field on the stationary states of the mixed spin-1 and spin-3/2 Blume-Capel model within the framework of the mean field approach. The Glauber-type stochastic dynamics is used to describe the time evolution of the system which is subjected to a time-dependent oscillating external magnetic field. The model exhibits first and second order transitions as well as dynamical tricritical, triple and an isolated critical end points. We found that the system displays reentrant phenomenon for both $\alpha = 0$ and $\alpha > 0$. Moreover, the system exhibits in the phase space a fixed points and limit cycles with circle, elliptic and parallelogram shapes.

Using the same frame work, we investigated the kinetics of the semi-infinite cubic ferromagnet with spin 1 at the bulk and spin 1/2 at the surface. We have found that the system reveals a riche variety of topology of phase diagrams including ordinary and extraordinary phase dynamical transitions. Furthermore, the model exhibits dynamical tricritical phenomenon dynamical first and second order phase transition.

Key Words : *Phases Transitions; Critical Behavior; Mean Field Theory; Random Crystal Field; Compensation Temperature; Reentrance; Kinetic Mixed Spin System; semi-infinite system*