

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ ABDERAHMANE MIRA DE BEJAIA

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Mémoire de Fin d'Études

Présenté par AIT MEZIANE Mohand Ouali

Domaine : Science de la matière

Spécialité : Physique des matériaux et nano-composites

Intitulé du projet :

Simulations Monte Carlo du Modèle de Heisenberg

Membres du jury :

Kasri Yazid	Maître de Conférences A	Université de Bejaia	Président
Houari Abdeslam	Maître de Conférences A	Université de Bejaia	Examineur
Boufala Khaled	Maître de Conférences B	Université de Bejaia	Examineur
Zenia Hand	Maître de Conférences B	Université de Bejaia	Encadreur

Dedicaces

Je dédie ce mémoire à :

Mes parents :

Ma mère, qui a oeuvré pour ma réussite, de par son amour, son soutien, tous les sacrifices consentis et ses précieux conseils, pour toute son assistance et sa présence dans ma vie, reçois à travers ce travail , l'expression de mes sentiments et de mon éternelle gratitude.

Mon père, qui peut être fier et trouver ici le résultat de longues années de sacrifices et de privations pour m'aider à avancer dans la vie. Puisse Dieu faire en sorte que ce travail porte son fruit ; Merci pour les valeurs nobles, l'éducation et le soutien permanent venu de toi.

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

Mes professeurs à l'université qui doivent voir dans ce travail la fierté d'un savoir bien acquis.

Remerciements

La réalisation de ce mémoire a été possible grâce au concours de plusieurs personnes à qui je voudrais témoigner toute ma reconnaissance. Je voudrais tout d'abord adresser toute ma gratitude à mon promoteur Mr H. Zenia, pour sa patience, sa disponibilité et surtout sur ses judicieux conseils, qui ont contribué à alimenter ma réflexion. Je tiens à remercier le président du jury Mr Y. Kasri et les membres du jury Mr A. Houari, Mr K. Boufala d'avoir accepté de juger ce travail. Je désire aussi remercier les professeurs qui m'ont fourni les outils nécessaires à la réussite de mes études universitaires ; spécialement Mr K. Louzazna, Mr H. Zenia, et Mr M. Belkhir. Je voudrais exprimer ma reconnaissance envers mes amis collègues : Réda, Djoudi, et Massinissa , qui m'ont apporté leur support moral et intellectuel tout au long de ma démarche.

Résumé

Notre mémoire se compose de six chapitres ; les trois premiers chapitres représentent la partie théorique, et les trois derniers chapitres représentent les résultats de la simulation Monte Carlo. Notre étude a été réalisée dans l'objectif d'étudier la transition ferromagnétique paramagnétique. Pour ce faire nous avons simulé des réseaux de différentes tailles de systèmes d'Ising bidimensionnel et tridimensionnel, et le modèle de Heisenberg tridimensionnel.

Table des matières

Table des matières	8
1 Introduction	10
1.1 Historique et Applications	10
1.2 Définitions	12
1.3 Magnétisme en Physique Classique	12
1.4 Magnétisme en Mécanique Quantique	13
1.5 Type de Magnétisme	15
1.6 Phases et Ordres Magnétiques	16
1.6.1 Phase Paramagnétique	16
1.6.2 Ordre Ferromagnétique et Antiferromagnétique	17
1.6.3 Ordre Ferrimagnétique	17
1.7 Etudes Théoriques	18
2 Modèles Magnétiques et Leurs Propriétés	19
2.1 Les Modèles Magnétiques	19
2.1.1 Le Modèle de Heisenberg	19
2.1.2 Le Modèle d'Ising	20
2.1.3 Le Modèle XY	20
2.2 Approximation du Champ Moléculaire de Weiss ou Champ Moyen	21
2.3 Transitions de Phases	21
2.3.1 Définition de la Phase	22
2.3.2 Paramètre d'Ordre	23
2.3.3 Classifications des Transitions de Phases	23
2.3.4 Fonction de corrélation	27
2.3.5 Exposants Critiques	28
2.3.6 Classe d'Universalité	28
3 Simulation Monte Carlo	30
3.1 Echantillonnage Simple	30
3.2 Echantillonnage par Importance	31

3.3	Algorithme Metropolis	31
3.4	Algorithme de Heat Bath	32
3.5	Algorithme de Wolff	33
3.6	Mesure des exposants critiques	33
4	Simulation du Modèle d'Ising	35
4.1	Résultats et Discussions du Modèle d'Ising Bidimensionnel	36
4.1.1	Courbe de l'Energie Moyenne par Spin	36
4.1.2	Courbe de la Chaleur Spécifique	37
4.1.3	Courbe de l'Aimantation Moyenne par Spins	39
4.1.4	Courbe de la Susceptibilité Magnétique	41
4.1.5	Mesure des Exposants Critiques	42
5	Modèle Ising Tridimensionnel	45
5.1	Courbe de l'Aimantation Moyenne	45
5.2	Courbe de l'Energie Moyenne par Spin	46
5.3	Courbe de la Chaleur Spécifique	47
5.4	Courbe de la Susceptibilité Magnétique	48
5.4.1	Exposants Critiques	50
6	Simulation du Modèle de Heisenberg	52
6.1	Ondes de Spins ou Modes de Goldstone dans le Modèle de Heisenberg	52
6.2	Théorème de Mermin-Wagner	53
6.3	Echantillonnage dans le Modèle de Heisenberg	54
6.4	Résultats et Discussions	55
6.4.1	Courbe de l'Aimantation Moyenne par Spin	55
6.4.2	Courbe de l'Energie Moyenne	56
6.4.3	Courbe de la Chaleur Spécifique	57
6.4.4	Courbe de la Susceptibilité Magnétique	58
6.4.5	Exposants Critiques	59
	Bibliographie	63

1.1 Historique et Applications

Les phénomènes magnétiques sont connus depuis des millénaires. On attribue la première description de la magnétite (l'oxyde de fer : Fe_3O_4) au grand savant grec Thalès de Millet. La première mention d'un compas magnétique utilisé pour la navigation apparaît dans un texte chinois qui date des environs de 1040 de notre ère [1], mais il peut avoir été inventé beaucoup plus tôt. D'abord il a été utilisé pour l'orientation sur la terre, puis à la mer. Ainsi la fascination que suscite le magnétisme par rapport aux applications qui en découlent, a une vie très longue. Pour l'anecdote A. Einstein évoque dans ses souvenirs d'enfance la vue d'une boussole qui s'oriente toujours vers le nord, une chose qui fut un événement déclencheur de sa curiosité, et plus tard de son amour pour les sciences physiques. Nous parlerons plus bas des applications modernes du magnétisme. Mais avant cela nous revenons à notre récit de l'histoire du magnétisme. L'étude du magnétisme de manière scientifique et rationnelle a connu un véritable essor dans l'époque de la renaissance. Le physicien anglais William Gilbert (1544 – 1603) [2] est considéré comme le premier à avoir publié un traité cohérent sur le magnétisme. Dans son livre "*Du magnétisme et des corps magnétiques, et du Grand Aimant Terre*", publié en 1600, il a développé une théorie sur le magnétisme terrestre, qui consiste à assimiler la terre à un aimant, et conclut que cela est la raison pour laquelle la boussole indique le nord (jusqu'à alors, on pensait que c'était l'étoile polaire ou une grande île située au pôle nord qui attirait l'aiguille de la boussole). Le physicien français Charles de Coulomb établit que l'attraction entre les aimants diminuait proportionnellement avec le carré de la distance qui séparait les aimants. Plus tard une découverte très importante fut faite par le physicien danois Hans Christian Oersted (1777 – 1851) qui affirma que l'électricité et le magnétisme sont intimement liés ; il a observé la déviation de

l'aiguille d'une boussole près d'un fil conducteur de courant. Cette découverte était le début de la naissance de l'électromagnétisme. Vers les années 1820 le physicien français François Avago (1783 – 1853) découvrit qu'une boucle de courant dans un conducteur peut induire des comportements magnétiques sur un morceau de fer. André Marie Ampère suggéra que plusieurs boucles de courants augmentent l'efficacité magnétique (de la boussole de François Avago); il constate aussi que si on change la direction du courant le morceau de fer (ou l'aiguille) change de direction. L'électroaimant venait de naître. Michael Faraday (1791 – 1867) est le premier inventeur d'un système qui permet de créer un mouvement circulaire continu; cette découverte a permis la naissance du moteur électrique. En 1873, le physicien écossais J. C. Maxwell publia une série d'équations par lesquelles il unifia l'électricité et le magnétisme. Vers la fin du dix-neuvième siècle de nombreux travaux sur le magnétisme ont été réalisés : en 1880 Emil Warburg découvre le phénomène d'hystérésis. Pierre Curie montre en 1895 que les propriétés magnétiques dépendent de la températures. Au début du vingtième siècle les progrès de l'étude de la matière ont été réalisés à l'échelle atomique; ce qui a permis alors d'explorer plus en détail le phénomène du magnétisme et d'en donner une interprétation quantique. Niels Bohr explique ainsi le magnétisme des éléments de transition tel que le fer à l'aide de la classification périodique des éléments chimiques. Goudsmit, George, Eguene, ont montré que l'électron se comporte comme un petit aimant. Le physicien Allemand Ernst Ising (1900 – 1998) a étudié le cas particulier d'une chaîne linéaire de moments magnétiques, ayant chacun deux valeurs possibles "1" et "-1", et reliés par des interactions entre plus proches voisins. W. Heisenberg (en 1928) est connu pour sa contribution à l'étude du ferromagnétisme; son modèle magnétique décrit une collection de moments magnétique (de nature vectorielle) en interaction. Plus en rapport avec le présent travail nous citerons l'introduction de la théorie du champ moléculaire par Weiss (vers 1907) pour expliquer l'ordre magnétique. Cette théorie est connue sous le nom de la théorie du champ moyen, a été adoptée pour étudier des systèmes non magnétique (approximation de Hartree-Fock dans les structures électroniques). Onsager (en 1944) a pu calculer de manière exacte quelque propriétés thermodynamiques du modèle d'Ising et a ainsi montré pour la première fois qu'un modèle en apparence très simple peut bien rendre compte du phénomène de transition de phase. Nous allons à présent citer quelque applications liées au magnétisme et aux matériaux magnétiques.

- La première application du magnétisme est la boussole. Elle est utilisée comme un moyen de navigation.
- L'application du magnétisme la plus réponde est dans les moteurs électriques et les transformateurs. Le principe de base de fonctionnement des moteurs électriques consiste à placer à l'intérieur d'un aimant U une bobine. Le passage d'un courant à l'intérieur de la bobine déclenche un mouvement de rotation.
- L'enregistrement magnétique représente une application importante des matériaux magnétiques. Les disques durs, les DVD, et les CD sont des exemples d'applications des matériaux magnétiques. D'autres applications, liées à l'enregistrement du son, sont le micro-

phones et les hauts parleurs.

En fait, la croissance et la performance de ces applications sont conditionnées par le développement de la théorie du magnétisme, et par l'évolution des techniques de fabrications.

1.2 Définitions

Le moment d'un dipôle magnétique est un objet fondamental en magnétisme. Dans la théorie classique de l'électromagnétisme, il résulte de la circulation d'un courant d'intensité I autour d'une surface infinitésimale orientée ds . Il est donné par :

$$d\boldsymbol{\mu} = \frac{I \cdot ds}{c} \quad (1.1)$$

; où c est la vitesse de la lumière dans le vide. L'aimantation d'un système solide est définie comme le moment magnétique total par unité de volume, où le moment magnétique total est la somme vectorielle de tous les moments magnétiques individuels des particules constituant le solide.

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{m}_i, \quad (1.2)$$

La susceptibilité magnétique χ est une grandeur qui décrit la réponse d'un matériau à l'application d'un champ magnétique extérieur. Et comme son nom l'indique elle décrit la susceptibilité du système à développer une aimantation ou à la modifier en présence d'un champ extérieur. Pour un système linéaire, homogène et isotrope, la susceptibilité est définie par la relation :

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \quad (1.3)$$

; mais en général, la susceptibilité est un tenseur d'ordre deux; ses composantes sont données par :

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{\partial M_\alpha}{\partial H_\beta}, \quad (1.4)$$

où $\alpha, \beta = x, y, z$ sont les directions spatiales.

1.3 Magnétisme en Physique Classique

La théorie classique de l'électromagnétisme a permis d'introduire la notion de champ magnétique, et d'expliquer un certain nombre de phénomènes magnétiques, mais cette théorie s'avère incapable d'expliquer l'aimantation spontanée des matériaux ferromagnétiques tels que le fer et le cobalt. Expérimentalement tous les matériaux en présence d'un champ magnétique s'aimantent dans la direction du champ magnétique appliqué pour un grand nombre de matériaux; ce qui correspond à des valeurs positives de la susceptibilité magnétique. Pour d'autres matériaux dits diamagnétiques l'aimantation est dans la direction opposée au champ magnétique appliqué, ce qui correspond à une valeur négative de la susceptibilité magnétique. Un théorème

établi indépendamment par le physicien danois N. Bohr (dans sa thèse de doctorat en 1911) et la physicienne néerlandaise H. J. van Luuewen (en 1919), montre que par l'application des lois de la physique classique pour un système de particules chargées dans une boîte, en présence d'un champ magnétique externe, on retrouve toujours une valeur de l'aimantation du système qui est nulle. Ceci est en contradiction avec l'expérience ; et a conduit à la conclusion que la physique classique est incapable de décrire le magnétisme. Afin de rendre compte de ces faits expérimentaux, d'expliquer l'aimantation spontanée des matériaux ferromagnétiques, et la réponse des matériaux en présence d'un champ magnétique ; la mécanique quantique s'est imposée comme une alternative incontournable.

1.4 Magnétisme en Mécanique Quantique

En mécanique quantique, le magnétisme résulte des propriétés naturelles des particules de la matière et de leurs interactions [3].

Le moment magnétique atomique résulte de la somme de trois contributions :

1. Le moment magnétique orbital qui résulte du mouvement des électrons autour du noyau.
2. Le moment magnétique de spin : chaque particule élémentaire possède un moment magnétique associé à son moment angulaire intrinsèque de spin.
3. Le moments magnétique nucléaire : Il se trouve aussi que les nucléons ont un moment magnétique qui résulte de leurs spins, mais ce dernier est très faible en comparaison avec celui des électrons. Il est de l'ordre de 1000 fois plus faible, et par conséquent, les propriétés magnétiques sont essentiellement portées par les électrons.

Comme nous l'avons mentionné précédemment, les propriétés magnétiques sont principalement liées aux électrons, donc l'étude des électrons et leurs interactions avec le milieu matériel nous permettra d'élucider ces propriétés magnétiques. Dans le but de poursuivre l'étude des propriétés magnétiques des ions dans un solide, il est nécessaire de décrire les états électroniques de basse énergie d'un ion ou d'un atome, soit d'un système à plusieurs électrons. Les règles de Hund permettent de déterminer l'état fondamental, et de prédire le comportement magnétique d'atomes ou d'ions.

Le traitement de la fonction d'onde indépendante du temps de l'électron de l'atome d'hydrogène, a conduit à choisir l'opérateur laplacien dans sa forme sphérique, en raison de la nature du potentiel atomique qui est central [4]. Les fonctions propres de l'hamiltonien du système sont données par :

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_n(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \quad (1.5)$$

où (r, θ, ϕ) sont les coordonnées sphériques de l'électron, $R_n(r)$ est la partie radiale, et $Y_l^m(\theta, \phi)$ sont les harmoniques sphériques. Les solutions de la partie radiale de la fonction d'onde physiquement acceptables, ont permis d'introduire le nombre quantique principale n sous la condition

qu'il soit un entier naturel non nul ; ce nombre a permis de quantifier l'énergie (ou le spectre énergétique).

La solution de la partie angulaire a permis d'introduire deux nombres quantiques, le moment cinétique orbitale l et le nombre quantique magnétique m_l ; avec les conditions : $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ($l \in \mathbb{N}^*$), et $-l \leq m_l \leq +l$ ($m_l \in \mathbb{Z}$). A ces trois nombres quantiques, qui caractérisent le mouvement de l'électron dans l'espace physique à trois dimension, on rajoute un nombre quantique qui décrit une propriété intrinsèque de l'électron : son état de spin.

Le spin peut être vu classiquement comme la rotation de l'électron autour de lui même. Mais cette analogie s'arrête à ce stade car ceci conduit à des contradictions : si on assimile l'électron à une sphère qui tourne, on retrouve que l'électron doit tourner à une vitesse tangentielle (sur son équateur) supérieur à la vitesse de la lumière c pour pouvoir acquérir un moment magnétique égale à son moment mesuré expérimentalement. Ceci est en contradiction avec le principe de la relativité restreinte, qui stipule que la vitesse maximale dans la nature est la vitesse de la lumière dans le vide (approximativement $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$). Le spin reste alors une propriété purement quantique [4].

Le spin est une grandeur propre aux particules élémentaires il est représenté par un opérateur, dont seul le module au carré et la projection sur l'axe de quantification z sont mesurables simultanément, c'est à dire leurs opérateurs commutent. La valeur propre du module du spin de l'électron au carré est $S^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)\hbar^2$ et sa projection sur l'axe de quantification z prend deux valeurs $\pm \frac{\hbar}{2}$.

La composition de deux moments cinétiques orbitaux l_1, l_2 , ayant des nombres quantiques associés l_1, l_2 donne un moment cinétique orbital totale l qui a un nombre quantique associé l tel que : $|l_1 - l_2| < l < |l_1 + l_2|$. Ceci s'applique aussi pour les moments de spins. La composition de tous les moments associés aux électrons d'un atome ou d'un ion donne plusieurs valeurs possibles du moment total J , qui est la somme des moments L et S , où

$$L = \sum_i l_i$$

et

$$S = \sum_i s_i$$

. Il se trouve que certain atomes ont un moment totale J nul et par conséquent ne sont pas magnétiques ; d'autre, ont un moment magnétique car J est non nul. Ceci est expliqué par le fait que le moment magnétique d'un atome μ est proportionnel à J : $\mu \propto J$.

Avant de décrire les règles de Hund, nous allons voir les hypothèses sous lesquelles s'appliquent ces règles.

- La première hypothèse suppose que l'interaction coulombienne est la plus importante (supérieure en valeur) de toutes les interactions.
- La deuxième hypothèse suppose que l'interaction spin-orbite est supérieur aux autres interactions (comme le champ cristallin).

Nous allons à présent voir les règles de Hund qui permettent sous ces hypothèses de retrouver les valeurs des moments associés à L , S , et J [5]. Elles sont classées par ordre décroissant d'importance, on commence par satisfaire la première, la deuxième, et puis la troisième. Les règles sont :

1. On organise les fonctions d'ondes électroniques de façon à maximiser la valeur S associée au vecteur spin totale. De cette façon l'énergie coulombienne est minimisée en raison du principe d'exclusion de Pauli, qui empêche les électrons de même spin d'occuper le même état orbital quantique. Ceci réduit la répulsion de Coulomb entre les électrons.
2. La deuxième règle consiste à maximiser L . Cela minimise également l'énergie coulombienne, et peut être compris en imaginant que les électrons dans les orbitales qui tournent dans le même sens peuvent s'éviter de façon plus efficace, et ceci réduit la répulsion électrostatique entre eux.
3. Enfin, la valeur de J est donnée par $J = |L - S|$ si la couche est moins de la moitié pleine et $J = |L + S|$ si elle est plus de la moitié pleine. Cette troisième règle résulte de la minimisation de l'énergie d'interaction spin-orbite.

Remarque

- Les deux premières règles consistent à vérifier la première hypothèse. Par ces deux règles empiriques on tente de minimiser l'interaction coulombienne.
- La troisième règle consiste à satisfaire la deuxième hypothèse. Par cette règle on tente de minimiser l'interaction spin-orbite.

Il est important de préciser que cette troisième règle n'est pas toujours applicable. Un bon contre exemple est celui des ions des métaux de transition en solution dans un solide : cette règle n'est pas respectée, car les énergies spin-orbite sont moins importantes que le champ cristallin. Pour les terres rares cette règle s'applique très bien, du fait que l'orbitale f est moins affectée par le champ cristallin, et du fait aussi que l'interaction spin-orbite y est importante.

Selon que les moments magnétiques sont portés par des électrons localisés ou itinérant on distingue deux type de magnétisme.

1.5 Type de Magnétisme

Il y a deux classes de magnétisme :

1. Le magnétisme itinérant dans les matériaux métalliques qui est décrit par la théorie des bandes. Les propriétés magnétiques des métaux sont essentiellement portées par les électrons de conduction et les électrons des orbitales de la sous couche 3d pour les métaux de transitions. Il y a une classe récente de système magnétiques qui s'ajoute à cette classe : le magnétisme des semiconducteurs dilués. Ces semiconducteurs sont dopés par de faibles

concentrations d'atomes. Ce semiconducteur peuvent ainsi être conducteurs et des matériaux magnétique à une température ambiante.

2. La deuxième classe est le magnétisme des isolants. Ce magnétisme est porté par des électrons localisés dans des orbitales atomiques(ou moléculaires). C'est ce magnétisme qui nous intéresse dans le présent travail.

sans interactions entre les moments magnétiques individuels l'aimantation serait nulle en absence de champ appliqué. l'interaction d'échange est responsable de l'apparition de l'ordre magnétique à longue portée. Cette interaction généralement de courte portée favorise une orientation relative de deux moments qui peut être parallèle ou anti-parallèle. La compétition entre l'interaction d'échange et l'agitation thermique est responsable de l'apparition de différentes phases et ordres magnétiques.

1.6 Phases et Ordres Magnétiques

Dans cette section nous allons introduire les principales phases et ordres magnétiques qu'on observe dans les solides.

1.6.1 Phase Paramagnétique

Considérons une collection de N moments de spins indépendants, *i.e* il n'y a pas d'interaction entre les moments (car les moments sont suffisamment éloignés). Ce système est désordonné (voir figure 1.1), ayant une aimantation nulle. Ceci représente la phase paramagnétique. Si on applique un champ magnétique à ce système, les moments de spins vont s'orienter parallèlement dans la direction du champ magnétique appliqué, et l'aimantation cesse dès qu'on annule le champ magnétique appliqué. Exemple de systèmes paramagnétiques : les ions de transitions en solution dans des sels comme Cr^{3+} dans $\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$, Fe^{3+} dans $\text{NH}_4\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$, et Gd^{3+} dans $\text{Gd}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. (ref [5]). A ceux-ci il faut rajouter tous les autres systèmes magnétiques (ferro-, antiferromagnétiques ...) à haute température, où l'agitation thermique empêche l'interaction d'échange d'établir un ordre à longue portée. La figure 1.1 schématise la phase paramagnétique.

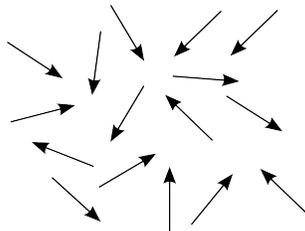


FIGURE 1.1: Phase paramagnétique

1.6.2 Ordre Ferromagnétique et Antiferromagnétique

Ici on considère la même collection de spins mais en présence de l'interaction d'échange. L'orientation parallèle de tous les spins représente l'ordre ferromagnétique (voir figure 1.2.a). Cet ordre magnétique se caractérise par une valeur d'aimantation spontanée non nulle (*i.e* aimantation permanente). Elle résulte de l'interaction d'échange entre les moments de spins ; par convention la valeur positive de la constante d'échange favorise une orientation parallèle des moments spins, par contre la valeur négative de cette constante favorise une orientation antiparallèle des spins, ce qui représente l'ordre antiferromagnétique (voir figure 1.2 .b). Les systèmes antiferromagnétiques se composent de deux sous réseaux de moments magnétiques identiques mais d'orientations différentes, ce qui donne une aimantation totale nulle. La figure 1.2 montre un schéma représentatif des deux ordres ferromagnétique et antiferromagnétique

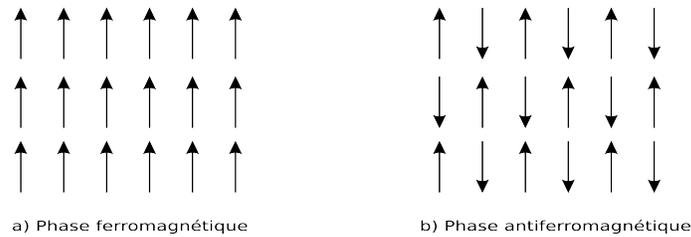


FIGURE 1.2: Phase ferromagnétique (a) et antiferromagnétique (b)

On peut citer ces Fe, Ni et EuO comme des exemples de systèmes ferromagnétiques et MnO, NiO comme ceux d'un système antiferromagnétique.

1.6.3 Ordre Ferrimagnétique

L'ordre ferrimagnétique est similaire à l'ordre antiferromagnétique, sauf que les deux aimantations des deux sous réseaux n'ont pas la même intensité ($|M_A| \neq |M_B|$) comme montré dans la figure 1.3. Ce qui donne une valeur de l'aimantation totale permanente non nulle. On retrouve cet ordre magnétique dans les ferrites (famille d'oxydes de fer : $\text{Fe}_3 \text{O}_4$) par exemple.

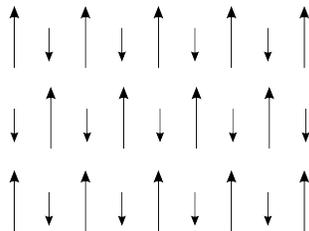


FIGURE 1.3: Ordre Ferrimagnétique

1.7 Etudes Théoriques

Le développement croissant des techniques de simulations numériques avec la performance élevée des machines de calculs ont permis la simulation d'un grand nombre de problèmes en physique statistique en particulier, et dans divers domaines de la physique de manière générale. Les systèmes traités par la physique statistique possèdent généralement un nombre de degré de liberté très élevé. Pour donner une illustration une mole de la matière possède un nombre N_A d'Avogadro d'atomes ; pour définir l'état de ce système on a besoin de $6N_A$ variables ($3N_A$ pour les vecteurs d'impulsions, et $3N_A$ pour les vecteurs positions des particules). Définir et suivre l'évolution exacte d'un tel système n'est pas possible, d'où la nécessité des approches statistiques.

Un autre exemple de système qui nous intéresse est le système de spins d'Ising qui contient N spins de valeur $s = \pm \frac{1}{2}$. Le nombre de configurations de ce système en tenant compte de la dégénérescence de spin est donnée par 2^N . Le nombre d'états accessibles au système augmente avec l'augmentation de N . Pour un système cubique qui contient 10 spins sur chaque côté, on a 2^{1000} états possibles pour le système, soit de l'ordre de 10^{301} états. Le traitement numérique de ce système nécessite un temps de calcul astronomique, d'où la nécessité de traiter le problème aux moyens des approches statistiques. Il y a principalement deux approches pour aborder la solution des problèmes en physique statistique : les techniques du groupe de renormalisation et les méthodes Monte Carlo [6]. La présente étude explore la deuxième approche. Celle-ci fait référence à un ensemble de méthodes qui utilisent un processus aléatoire et elle repose sur des techniques d'échantillonnages statistiques. L'échantillonnage est une technique qui permet d'estimer des moyennes statistiques sur un nombre réduit de configurations. Il y a deux types d'échantillonnages : échantillonnage simple qui consiste à évaluer des valeurs moyennes statistiques sur des configurations générées par les nombres pseudoaléatoires indépendamment de toutes contraintes extérieures (ex : température) , et échantillonnage par importance. La technique d'échantillonnage par importance est plus sophistiquée que la première ; l'idée principale de cette technique est qu'elle fait une moyenne statistique de différentes grandeurs physiques sur les états du système les plus probables, *i.e.*, ayant un poids statistique élevé. La technique d'échantillonnage simple souffre d'un problème de temps de calcul par rapport à la technique d'échantillonnage par importance, et aussi elle souffre d'un problème majeur : les états du système générés ne correspondent pas aux états d'équilibre à la température considérée. La technique d'échantillonnage par importance réussit à surmonter ces deux problèmes. Nous allons traiter un algorithme relatif à cette technique. Cet algorithme consiste à opérer successivement sur un seul spin du réseau choisit au hasard, c'est le principe de l'algorithme de Metropolis[12]. Il existe un autre algorithme par lequel on change l'état d'un bloc de spins simultanément. C'est l'algorithme de cluster de Wolff [14].

Modèles Magnétiques et Leurs Propriétés

2.1 Les Modèles Magnétiques

2.1.1 Le Modèle de Heisenberg

L'expression de l'énergie d'interaction de deux moments magnétiques de spins localisés dans des sites i et j dans le modèle de Heisenberg est donné par :

$$U = -J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.1)$$

où $J_{i,j}$ représente la constante d'échange comme mentionné dans l'introduction.[7]

De manière générale $J_{i,j}$ dépend de la distance entre les spins, et de l'orientation du vecteur $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ par rapport aux axes cristallins, c'est à dire de la symétrie du milieu. Dans le cas présent nous considérons que l'interaction d'un spin est limitée juste à ces premiers plus proches voisins et qu'elle prend une seule valeur, égale à J . L'hamiltonien de Heisenberg pour un solide en présence d'un champ magnétique externe \mathbf{H} s'écrit alors comme :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{H} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i \quad (2.2)$$

, où la sommation dans le premier terme s'effectue uniquement sur toutes les paires formées par les spins premiers voisins, le deuxième terme est celui de Zeeman qui décrit le couplage du champ magnétique appliqué \mathbf{H} avec les moments magnétiques du réseau.

Dans le cas où $J > 0$, nous remarquons que pour tous les réseaux cristallins, \mathcal{H} est minimal quand les spins sont orientés parallèlement les uns aux autres ; c'est l'état fondamental ferromagnétique obtenu aux basses températures. Dans le cas où $J < 0$, nous remarquons que pour tous les réseaux cristallins à l'exception des réseaux dont la maille élémentaire comporte

une face triangulaire équilatérale, \mathcal{H} est minimal si les spins sont orientés antiparalèlement les uns aux autres. Cette configuration antiparallèle des spins du système est l'état fondamental antiferromagnétique de Néel. Dans le cas où la maille possède au moins une face triangulaire équilatérale (dans le cas du réseau triangulaire et cubique à face centrées), \mathcal{H} est minimale lorsque les spins forment des angles distincts des deux premiers cas (ferromagnétique(0°), antiferromagnétique (180°)). Dans ce cas le système est dit frustré. On parle aussi de magnétisme non-colinéaire. il est à noter que le spin dans le modèle de Heisenberg peuvent être traités comme des opérateurs sur un espace d'Hilbert, auquel cas on parle de modèle de Heisenberg quantique. Celui-ci bien encore plus compliqué à résoudre que le modèle classique que nous étudions dans ce travail. Pour le modèle ferromagnétique l'état fondamental est le même que celui du modèle classique. Par contre pour le modèle antiferromagnétique on ne peut même pas connaître la forme exacte de l'état fondamental. En effet l'état de Néel n'est même pas un état propre de l'hamiltonien.

2.1.2 Le Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est issu du modèle de Heisenberg avec $S = \frac{1}{2}$, auquel on rajoute une forte anisotropie uniaxiale. Seuls les projections de S_i suivant l'axe d'aimantation facile sont alors pertinentes. L'hamiltonien d'Ising en présence d'un champ magnétique est donné par :

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{i,j} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z \quad (2.3)$$

Ce modèle est aussi utilisé pour décrire des systèmes non magnétiques, comme les alliages binaires. Pour ce faire on associe des valeurs $+1$ et -1 pour les deux types d'atomes de l'alliage, soit A et B, respectivement, et on définit les énergies d'interaction entre ces atomes : E_{AA}, E_{AB}, E_{BB} . On s'intéresse alors à, entre autres, l'étude de la transition ordre-désordre de ce système.

2.1.3 Le Modèle XY

Le modèle XY, est un modèle issu du modèle de Heisenberg, auquel on rajoute une forte anisotropie planaire ; l'hamiltonien correspondant à ce modèle est donné par :

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i \quad (2.4)$$

L'étude des modèles magnétiques présentés ici dans le cas où l'interaction $J_{i,j} = 0$ (cas paramagnétique) est chose facile. Mais les interactions $J_{ij} \neq 0$ rendent le problème difficile mais aussi intéressant. Nous allons présenter maintenant l'une des premières approches utilisée pour attaquer ce genre de problème.

2.2 Approximation du Champ Moléculaire de Weiss ou Champ Moyen

Il est plus facile d'illustrer la méthode du champ moyen de Weiss en l'appliquant au modèle d'Ising.¹ L'hamiltonien en absence de champ extérieur est donné par

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j.$$

La méthode du champ moyen consiste à remplacer les spins voisins par leurs valeurs moyennes $\langle S \rangle$ et on obtient

$$\mathcal{H} = -zJ \langle S \rangle \sum_i S_i.$$

où z est le nombre de premiers voisins. Ceci est un hamiltonien qui décrit un système de spins indépendants dans un champ magnétique "extérieur". Le calcul de $\langle S \rangle$ est facile à faire, on trouve

$$\langle S \rangle = \frac{+1 \times e^{zJ\langle S \rangle/k_B T} - 1 \times e^{-zJ\langle S \rangle/k_B T}}{e^{zJ\langle S \rangle/k_B T} + e^{-zJ\langle S \rangle/k_B T}}.$$

On obtient donc

$$\langle S \rangle = \tanh \left(\frac{zJ}{k_B T} \langle S \rangle \right).$$

C'est une équation transcendante à résoudre numériquement ou graphiquement comme montré sur la figure 2.1. On trouve que si $zJ/k_B T < 1$ l'équation admet une seule solution $\langle S \rangle = 0$. Si par contre $zJ/k_B T > 1$, l'équation admet trois solutions $\langle S \rangle = 0, \pm S^*$. Ainsi la température de transition est donnée par $T_C = zJ/k_B$. On peut continuer l'étude pour calculer les exposants critiques et autres propriétés mais cela sera fait plus bas dans la section sur la théorie de Landau. On voit que la théorie de Weiss permet de décrire la transition de phase paramagnétique-ferromagnétique dans le modèle d'Ising. En effet à hautes températures ($\frac{zJ}{k_B T} < 1$, l'unique solution $\langle s \rangle = 0$ correspond à la phase paramagnétique. Si on réduit la température au-dessous de T_c ($T_c = zJ/k_B > 1$). La solution $\langle S \rangle = \langle S^* \rangle$ décrit une phase ferromagnétique où le système possède une aimantation spontanée. La solution $\langle S \rangle = -\langle S^* \rangle$ correspond à une aimantation dans le sens opposé, mais ces deux solutions sont identiques. La solution $\langle s \rangle = 0$, quoique possible, est instable comme on va le voir dans la théorie de Landau qui n'est qu'une reformulation de la théorie du champ moyen.

2.3 Transitions de Phases

Pour introduire la notion de transition de phase, considérons l'exemple de l'eau. Ce dernier se présente dans la nature sous trois états (phases) : état gazeux, état liquide, et état solide. Le changement de l'état de l'eau d'un état vers un autre est appelé transition. Les transitions de

1. voir Marder[13] pp. 734-736.

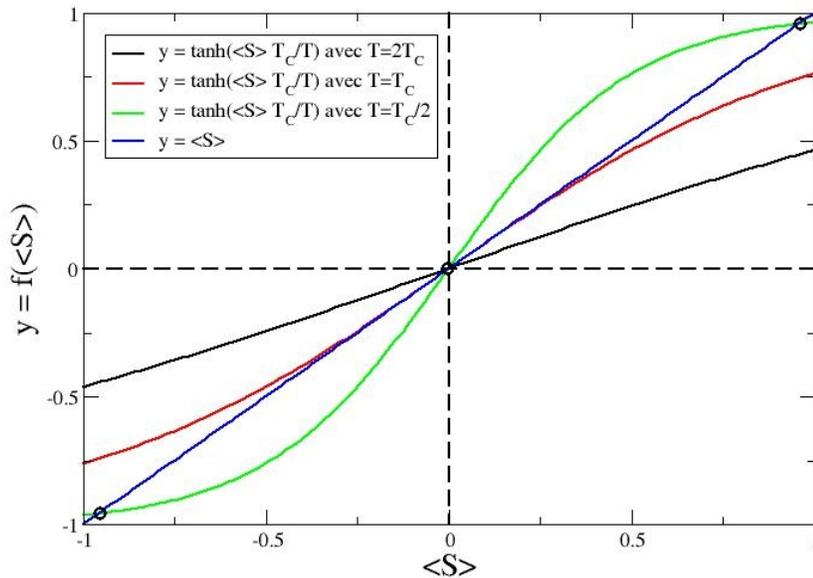


FIGURE 2.1: Solution graphique de l'équation transcendante donnant la valeur moyenne du spin $\langle S \rangle$ dans la théorie du champ moyen appliquée au modèle d'Ising. Pour $T > T_C$ il y a une seule intersection à $\langle S \rangle = 0$ et on est dans la phase paramagnétique. Pour $T < T_C$ trois intersections sont visibles : à $\langle S \rangle = 0$ et à $\langle S \rangle = \pm S^* \neq 0$.

phase de l'eau sont loin d'être un cas isolé et l'on observe une multitude de transitions de phase dans la nature. En particulier, la physique de la matière condensée est très riche d'exemples. On pourra citer les cas du ferromagnétisme, de la supraconductivité, des transitions ordre-désordre dans les alliages. Pour parler plus en détail des transitions de phases, il est nécessaire de décrire en premier la transition de phase.

2.3.1 Définition de la Phase

La phase liquide de l'eau à pression ambiante s'étend de $T = 0^\circ C$ jusqu'à $T = 100^\circ C$. A cette température ($T = 100^\circ C$) les deux phases liquides et solides sont en équilibre. la phase peut être définie comme étant un état homogène de la matière, qui se caractérise par des propriétés physiques et chimiques homogènes. La matière se présente principalement sous trois phases : gazeuse, liquide et solide. Ce qui distingue la phase solide des deux autres phases est la rigidité et la résistance des corps solides aux forces de cisaillement. Un gaz s'étale sur tout le volume qu'on lui dispose, et un liquide prend la forme de la partie du récipient qui le contient. D'un autre point de vue, il y a plusieurs types de phases qui sont issues de la phase solide. La phase cristalline est l'un des exemples de ces phases. Les solides se cristallisent dans des structures périodiques avec un empilement compacte de l'espace. Ces structures sont données

par les 14 réseaux de Bravais. Le réseau cubique simple, cubique à faces centrées et hexagonal sont des exemples de réseaux de Bravais. Dans ce travail nous nous intéresserons aux phases magnétiques. Les différentes phases dans ce cas ne concernent pas la composition chimique ou la distribution spatiale des constituants (atomes). La phase magnétique est donnée par l'ordre (à longue distance) où le désordre des moments magnétiques dans un solide. Pour décrire les transitions de phases de manière plus précise il est utile d'introduire la notion de paramètre d'ordre.

2.3.2 Paramètre d'Ordre

Le paramètre d'ordre est un coefficient introduit par Landau, il est utilisé pour caractériser une phase d'un système physique donné. De manière générale, le paramètre d'ordre prend une valeur non nulle à des basses températures, dans la phase moins symétrique ordonnée ; et une valeur nulle à des hautes températures, dans la phase symétrique, désordonnée.

La phase paramagnétique est invariante par rapport à l'application d'une opération de symétrie (ex : rotation). Par contre la phase ordonnée varie par rapport à l'application d'une opération de symétrie. La variation de ce paramètre en fonction des contraintes extérieures telles que la température, le champ magnétique appliqué, nous informe sur l'évolution du système et éventuellement sur les transitions de phase du système étudié. Nous donnons ici quelques exemples de paramètres d'ordre :

1. L'aimantation M est le paramètre d'ordre des systèmes de spins ferromagnétiques, et qui représente une somme vectorielle des moments magnétiques individuelles. La valeur de M est non nulle dans la phase ferromagnétique, et nulle dans la phase paramagnétique.
2. Dans la transition liquide-gaz le paramètre d'ordre est la différence des densités du liquide et du gaz. Cette différence est donnée par : $|\rho_L - \rho_G|$ où ρ_L est la densité du liquide et ρ_G est la densité du gaz.
3. Le paramètre d'ordre dans la théorie de Ginzburg-Landau de la supraconductivité est un nombre complexe $\psi(r)$ dont le module au carré est lié à la densité d'électrons supraconducteurs au point r .

Le passage d'une phase à une autre suite aux variations d'une ou plusieurs contraintes extérieures est appelé transition de phase. Ces transitions ne se font pas toutes de la même manière mais on peut les classer suivant des classifications que nous présentons dans ce qui suit.

2.3.3 Classifications des Transitions de Phases

La première classification est celle proposée par Ehrenfest [20] ; même si elle échoue dans sa description des systèmes réels, elle a permis d'introduire des idées nouvelles dans son époque. Cette classification est basée sur les propriétés analytiques de l'énergie libre (continuité et discontinuité des dérivées de l'énergie libre). La deuxième classification est basée sur la chaleur

latente.

Classification d'Ehrenfest

Selon la classification d'Ehrenfest, il y a plusieurs classes de transitions de phase. Cette classification est basée sur le degré de la continuité des dérivées n -ième de l'énergie libre. Les transitions du premier ordre sont celles pour lesquelles la dérivée première par rapport à une des variables thermodynamiques de l'énergie libre (ex : l'énergie interne, l'aimantation moyenne) est discontinue. Les transitions du deuxième ordre sont celles pour lesquelles la dérivée seconde par rapport à une des variables thermodynamiques de l'énergie libre n'est pas continue. Cette classification a été abandonnée car elle ne prévoyait pas la possibilité de divergence d'une dérivée de l'énergie libre.

Classification Basée sur la Chaleur Latente

Cette classification suppose que les transitions de premier ordre sont celles qui impliquent une chaleur latente. Au cours de ces transitions, le système absorbe ou émet une quantité d'énergie fixe, généralement grande. Comme l'énergie ne peut pas être transférée instantanément entre le système et son environnement, toutes les parties ne subissent pas la transition au même moment (c'est à dire il y a une coexistence de deux phases différentes). L'exemple typique en est la transition solide-liquide. Les transitions de second ordre sont des transitions de phase dites continues ; il n'y a pas de chaleur latente associée. Un exemple est la transition ferromagnétique-paramagnétique.

Dans ce qui suit nous allons discuter la transition de seconde ordre dans le cadre de la théorie de Landau des des transitions de phases. Cette théorie est basée d'une part sur l'introduction d'un paramètre d'ordre, et d'autre part sur un développement de l'énergie libre en fonction de ce paramètre d'ordre.

La Théorie de Landau des Transitions de Phase

Les phases ne possèdent pas les mêmes symétries avant et après la transition.[20] La phase à haute température (HT) est plus symétrique que la phase à basse température (BT). On parle alors de brisure de symétrie lors du passage $HT \rightarrow BT$. Pour décrire les transitions de phase avec changement de symétrie, Landau a introduit la notion de paramètre d'ordre m :

- $m = 0$ dans la phase haute température, symétrique, désordonnée.
- $m \neq 0$ dans la phase basse température, moins symétrique, ordonnée.

L'ordre d'une transition au sens de Landau est défini comme ceci : les transitions du premier ordre sont celles pour lesquelles le paramètre d'ordre est discontinu au point de la transition.

Les transitions du second ordre sont celles pour lesquelles le paramètre d'ordre reste continu au passage de la transition.

La théorie de Landau repose sur un développement limité de l'énergie libre en termes du paramètre d'ordre m . Pour les modèles ferromagnétiques qui nous intéressent dans ce travail le paramètre d'ordre m représente l'aimantation du système. A une température donnée, l'état d'équilibre stable correspond à une valeur de m qui minimise l'énergie libre $F(m, T)$. Au voisinage de la température de transition T_0 , m est petit, on peut donc développer $F(m, T)$ en série de puissances :

$$F(m, T) = F_0(T) + A_0(T)m + A(T)m^2 + B(T)m^3 + C(T)m^4 + \dots \quad (2.5)$$

Transition de seconde ordre

Pour une transition du second ordre [20] on considère que la fonction de l'énergie libre est symétrique, *i.e* $F(+m, T) = F(-m, T)$. Cette condition impose que les termes impaires soient nuls ($A_0(T) = B(T) = 0$) et $C(T) = c > 0$, le développement de l'énergie libre est donné par :

$$F(m, T) = F_0(T) + a(T - T_0)m^2 + cm^4 \quad (2.6)$$

où on a choisi $c > 0$ pour avoir un système stable, et $A(T) = a(T - T_0)$ pour avoir un coefficient $A(T)$ qui change de signe en passant de $T > T_0$ à $T < T_0$. On étudie la variation de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre m . La figure 2.2 illustre le comportement de l'énergie libre en fonction de la température.

Les solutions de l'équilibre correspondent aux valeurs de m , pour lesquelles :

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 0 \quad (2.7)$$

$$2a(T - T_0)m + 4cm^3 = 0 \quad (2.8)$$

$$m(2a(T - T_0) + 4cm^2) = 0 \quad (2.9)$$

Cette équation possède trois solutions :

$$m = 0, m = \pm \sqrt{\frac{a(T_0 - T)}{2c}}$$

A des températures supérieures à la température de transition T_0 seule $m = 0$ est acceptable. Les deux autres solutions sont rejetées car elles aboutissent à un paramètre d'ordre (aimantation) m imaginaire. A des températures inférieures à la température de transition T_0 les trois solutions acceptables sont :

$$m = 0$$

et

$$m = \pm \sqrt{\frac{a(T_0 - T)}{2c}}$$

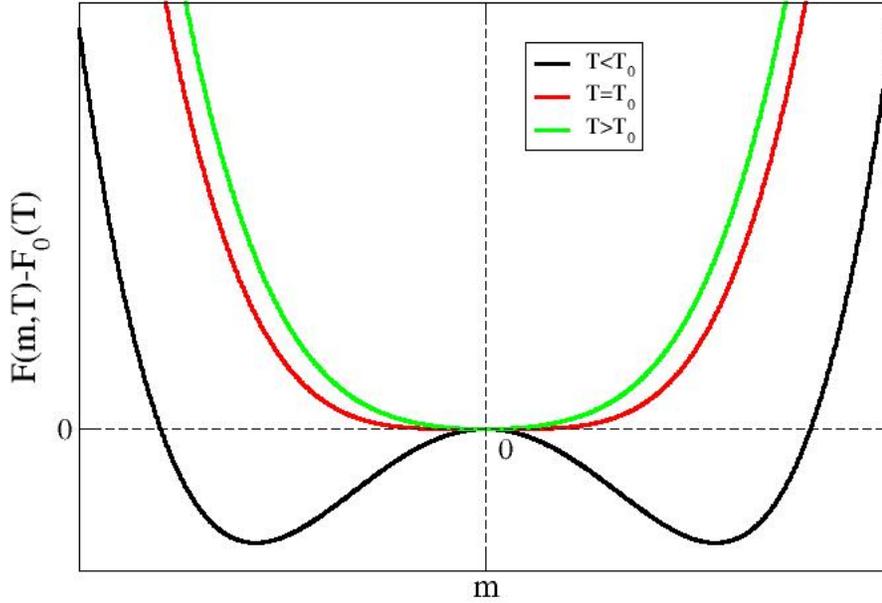


FIGURE 2.2: Énergie libre en fonction du paramètre d'ordre m et de la température T dans la théorie de Landau.

La solution $m = \pm \sqrt{\frac{a(T_0 - T)}{2c}}$ donne deux minima de l'énergie libre, correspondant à des équilibres stables (voir la figure 2.2). La solution $m = 0$ donne un maximum local de l'énergie libre qui correspond à un équilibre instable (voir la même figure). On voit déjà qu'on obtient l'exposant critique $\beta = \frac{1}{2}$ puisque $m \propto (T_0 - T)^{1/2}$.

L'analyse du comportement de l'entropie : on peut analyser le comportement de l'entropie à la transition, en utilisant l'expression de l'énergie libre [20] :

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} \quad (2.10)$$

$$S = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - am^2 - 2a(T - T_0)m \frac{\partial m}{\partial T} - C \frac{\partial m^4}{\partial T} \quad (2.11)$$

Pour T proche de T_0 par valeurs supérieures, on a $m = 0$, $\frac{\partial m}{\partial T}$, on aura

$$S = -\frac{\partial F_0}{\partial T} \quad (2.12)$$

car $m=0$ pour $T > T_0$. Pour T proche de T_0 par valeurs inférieures, on a $m = \pm \sqrt{\frac{a(T_0 - T)}{2c}}$; après développement on aura :

$$S = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - am^2 - \frac{a^2(T_0 - T)}{2c} + \frac{a^2(T_0 - T)}{2c} \quad (2.13)$$

$$S = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - am^2 \quad (2.14)$$

En remplace $-am^2$ par son expression et on aura :

$$S = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - \frac{a^2(T_0 - T)}{2c} \quad (2.15)$$

Ce deuxième terme $-\frac{a^2(T_0 - T)}{2c}$ est négligeable car $(T_0 - T) \approx 0$ pour $T \approx T_0$. $S = -\frac{\partial F_0}{\partial T}$ à $T = T_0$. Les conditions de continuité de l'entropie sont vérifiées, d'où la conclusion que la transition est continue à T_0 .

L'analyse du Comportement de la Chaleur Spécifique En s'appuyant sur cette relation [20] :

$$C_v = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \quad (2.16)$$

avec $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ et F est le développement de l'énergie libre au quatrième ordre (précédent).

$$C_v = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V \quad (2.17)$$

$$C_v = -T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} - a \frac{\partial m^2}{\partial T} \quad (2.18)$$

Pour des température proche de T_0 par des valeurs inférieures $m = \pm \sqrt{\frac{a(T-T_0)}{2c}}$, $m^2 = \frac{a(T-T_0)}{2c}$,

$$C_v = -T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} - a \frac{\partial \frac{a(T-T_0)}{2c}}{\partial T} \quad (2.19)$$

on aura :

$$C_v = -T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} - \frac{a^2}{2c} \quad (2.20)$$

Pour des températures T proches de T_0 par des valeurs supérieures, le paramètre d'ordre $m = 0$, l'expression de la chaleur spécifique est donnée par :

$$C_v = -T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \quad (2.21)$$

Ceci montre la discontinuité de la chaleur spécifique à la température de transition T_0 . Dans les cas magnétiques que nous étudions ici C_v diverge à $T = T_0$

2.3.4 Fonction de corrélation

La fonction de corrélation représente une grandeur importante dans l'étude des transitions de phase, elle est donnée dans le cas magnétique pour un système homogène :

$$G(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{S}(0) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle - \langle \mathbf{S}(0) \rangle \cdot \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \quad (2.22)$$

, où $S(0)$ est le spin à l'origine choisie arbitrairement, $S(r)$ est le spin à une position r , et $\langle \rangle$ est une notation indiquant une moyenne thermique. La longueur de corrélation ξ est définie comme étant la distance (ou la longueur) au-delà de laquelle le terme G est négligeable (c'est à dire la corrélation ne se manifeste pas). Les fluctuations de deux spins S_0 et S_r sont dites corrélés si $r < \xi$.

La corrélation entre deux spins a lieu directement si les spins sont voisins l'un de l'autre, ou par l'intermédiaire des autres spins, si les spins sont loins l'un de l'autre.

La relation qui décrit la dépendance de la fonction de corrélation avec la longueur de corrélation est donnée par :

$$G(r) = A \cdot \frac{e^{-r/\xi}}{r^{(d-1)/2}} \quad (2.23)$$

où A est une constante, d est la dimensionnalité du système. $G(r) = 0$, lorsque les fluctuations des spins ne sont pas corrélées (c'est à dire les spins sont indépendants), ceci a lieu à des températures supérieures à la température critique, dans la phase paramagnétique ; et aussi aux très basses températures dans les systèmes ferromagnétiques : les corrélations d'un spin avec les voisins lointains (troisième, quatrième..etc) sont négligeable, ainsi $G(r) = 0$. Les corrélations pour les premiers voisins prend une valeur finie non nulle. Les corrélations entre les spins augmentent avec l'augmentation de la température, et le terme $G(r)$ devient de plus en plus important. Dans le cas des transitions de phase de seconde ordre, la longueur de corrélation ξ diverge (tend vers l'infinie) à la température critique. Physiquement ceci veut dire que tous les spins sont corrélés (un spin est corrélé avec un autre spin à une grande distance (infinie))[10].

2.3.5 Exposants Critiques

Les exposants critiques sont des coefficients (paramètres) qui indiquent une dépendance fonctionnelle à la température critique, ou au voisinage immédiat. Dans une transition de phase de seconde ordre il est possible de définir ces six exposants à T_c : $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$. Les relations suivantes servent à définir ces exposants :

$$C_v = \left| \frac{T - T_C}{T_C} \right|^{-\alpha}, \quad M = M_0 \left(\frac{T_c - T}{T} \right)^\beta, \quad \chi = \chi_0 \left| \frac{T - T_C}{T_C} \right|^{-\gamma}$$

$$\xi \propto \left(\frac{T - T_C}{T_C} \right)^{-\nu}, \quad M = H^{1/\delta}, \quad G(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$$

où C_v, M, H , représentent respectivement la chaleur spécifique, le paramètre d'ordre et le champ appliqué, et χ_0, M_0 sont des constantes[10].

2.3.6 Classe d'Universalité

Les transitions de phase qui possèdent les même valeurs des exposants critiques appartiennent à la même classe d'universalité. D'une manière générale, la classe d'universalité dépend

de la dimensionnalité de l'espace, la nature de l'interaction mise en jeu, et la symétrie du paramètre d'ordre. Un exemple de quelques classes d'universalité est donnée dans le tableau 2.1

TABLE 2.1: Quelques exemples de classes d'universalité et les exposants critiques correspondants. Dans la théorie du champ moyen appliquée au modèle d'Ising la température critique est donnée par $T_c = \frac{zJ}{k_B}$, où z est le nombre de plus proche voisins. [10]

classe	symétrie	α	β	γ	ν	η	T_c
2d Ising	Z_2	0	$1/8$	$7/4$	1	$1/4$	2.27(carré)
2d Potts($q = 3$)	Z_3	$1/3$	$1/9$	$13/9$	$5/6$	$4/15$	0.36
2d Potts($q = 4$)	Z_4	$2/3$	$1/12$	$7/6$	$2/3$	$1/4$	$1/3$
3d Ising	Z_2	0.11	0.325	1.241	0.63	0.031	4.51(cub.)
3d XY	$O(2)$	-0.007	0.345	1.316	0.669	0.033	2.24(cub.)
3d Heisenberg	$O(3)$	0.115	0.3645	1.386	0.705	0.33	1.45(cub.)
champ moyen		0	$1/2$	1	$1/2$	0	$\frac{zJ}{k_B}$

La méthode Monte Carlo fait référence à un ensemble de méthode qui utilise un processus aléatoire. Elle s'applique généralement pour l'évaluation des intégrales multidimensionnels. Cette Méthode est basée sur des techniques d'échantillonnages statistiques, qui sont l'échantillonnage simple, et l'échantillonnage par importance.

3.1 Echantillonnage Simple

Cette technique consiste à générer un nombre N d'états microscopiques (configurations) d'une manière aléatoire. Dans le cas du modèle d'Ising cela revient à associer des valeurs $+1$ ou -1 aux spins du réseau. La valeur moyenne d'une observable A est calculée par :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N A_i \exp(-\beta E_i)}{\sum_{i=1}^N \exp(-\beta E_i)} \quad (3.1)$$

où $\beta = 1/k_B T$.

La précision sur la valeur moyenne de A augmente avec l'augmentation de N (nombre de configurations générées) ; mais il y a une limite due au temps de calcul. Si on veut avoir une bonne précision, on augmente le nombre N . En pratique le nombre de configurations qu'il faut générer pour avoir de bonne statistique nécessite de trop longs temps de calcul.

Un autre problème physique majeur qui est plus important que le précédent est que cette technique génère les configurations avec une probabilité égale pour toutes les températures, et par conséquent, ces configurations ne correspondent pas aux états d'équilibres à la température considérée. Ceci conduit à faire une grande erreur sur les sommes. Les zones de l'espace des phases où le terme de Boltzmann est important sont échantillonnées de la même manière que le

rèste de l'espace des phases qui ne contribuent pratiquement à la valeur moyenne de A . Il faut une méthode qui génère les configurations qui ont des poids statistiques importants.

3.2 Echantillonnage par Importance

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

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{c=1}^N A(c) \quad (3.2)$$

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

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

3.3 Algorithme Metropolis

Dans ce qui suit, nous allons définir les étapes de déroulement de l'algorithme Metropolis. [12] Nous avons appliqué cet algorithme pour la simulation du modèle d'Ising bidimensionnel et tridimensionnel, et aussi pour le modèle de Heisenberg. Dans l'objectif d'introduire cet algorithme de manière simple nous allons prendre le cas du modèle d'Ising.

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

- η est une variable réelle aléatoire appartient à l'intervalle $]0, 1]$.
- N est le nombre de spins du réseau, $N = L^2$ ou L^3 , où L est le nombre de spins sur un coté (une direction).
- Le cycle Monte Carlo est une variable qui dépend de la taille du système ; il est égale à N .

Dans un cycle Monte Carlo on parcourt en moyenne un site (spin) du réseau.

Avant de construire l'algorithme on fixe les paramètres du systtème étudié ; l'hamiltonien H du modèle d'Ising est donné :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j$$

On prend J comme unité d'énergie ($J = 1$), la température T est une variable en unité J/k_B . Le spin peut prendre deux valeurs distinctes ± 1 .

1. La première étape consiste à générer une configuration initiale de manière aléatoire. Pour réaliser cela on procède à un tirage équiprobable d'un nombre η sur un ensemble de nombres uniformément répartis sur l'intervalle $]0, 1]$. Si η appartient $]0, \frac{1}{2}]$ on associe un nombre $+1$ (spin up) pour le premier élément du réseau. Si η appartient $]\frac{1}{2}, 1]$ on associe -1 (spin down) pour le premier élément du réseau ; on procède de la même manière jusqu'à parcourir tous les sites du réseau.
2. La deuxième étape consiste à visiter un site au hasard. Pour cela on génère un nombre aléatoire α dans l'intervalle $]0, 1]$ et on le multiplie par N de telle sorte que $N \times \alpha$ appartienne à $[0, N - 1]$. On prend la partie entière de $N \times \alpha$ pour que ce nombre coïncide avec un site du réseau.
3. Une fois ce spin (S_i) est choisi, on calcul son énergie d'interaction avec les premiers quatre voisins, on calcul la différence d'énergie $\Delta E = E(S_i) - E(-S_i)$ entre l'état de spin actuel (S_i) et l'état après son renversement ($-S_i$).
 Si $\Delta E < 0$ on accepte le changement de l'état de spin ; ce qui est en accord avec le principe de minimisation de l'énergie.
 Si $\Delta E > 0$ on génère un autre nombre aléatoire et on le compare au facteur de Boltzmann $\exp(-\frac{\Delta E}{k_B T})$.
 Si le nombre aléatoire est inférieur à ce facteur on accepte le changement de l'état du spin, sinon on laisse son état tel qu'il est. On procède de la même manière jusqu'à terminer le premier cycle Monte Carlo ; on mesure et on cumule les valeurs de E, M, E^2, M^2 ..etc. On commence le deuxième cycle Monte Carlo par la configuration finale du premier cycle. On opère de la même manière jusqu'à terminer tout les cycles Monte Carlo, on calcule les moyennes statistiques des grandeurs E, M, M^2 .. , on sauvegarde les résultats dans un fichier pour les représenter.
 La précision sur les valeurs moyennes augmente avec l'augmentation du nombre de pas Monte Carlo.

3.4 Algorithme de Heat Bath

Cet algorithme s'applique aux cas où les spins sont continus, il consiste à choisir un spin au hasard S_i , puis à calculer l'énergie d'interaction de ce spin avec ses voisins. Celle-ci est donnée dans le modèle de Heisenberg par :

$$E = \mathbf{h}_i \cdot \mathbf{S}_i = h_i \cos(\theta),$$

où $\mathbf{h}_i = -J \sum_j \mathbf{S}_j$ est le champ produit par les voisins du spin S_i , et θ est l'angle entre ce champ et le spin S_i . [16] On choisit ensuite une nouvelle orientation θ avec une densité de probabilité $P(\theta)$ fixée par la condition que la distribution correspondante en énergie $P(E(\theta))$ soit donnée

par la distribution de Boltzmann. Ici il n'y a pas de rejet comme dans le cas de Metropolis. quand la température diminue et on se rapproche de la température critique des clusters de même orientation (projection) de spin ; les clusters se forment et sont de plus en plus grand. Si on prend un site au hasard la probabilité qu'il soit parallèle à ces voisins est grande, et donc la possibilité que son état puisse être changé devient minime. On perd alors de plus en plus de temps à essayer de renverser de spins en vain. c'est là que l'algorithme suivant vient en aide.

3.5 Algorithme de Wolff

On en donne une illustration d'abord en l'appliquant au modèle d'Ising. Il consiste à choisir un spin S_i au hasard qu'on utilise comme germe pour construire un cluster de spins à flipper ensemble. On commence d'abord par flipper ce spin même. Pour continuer on parcourt les premiers voisins de ce spin et on tente de flipper uniquement ceux qui lui sont parallèles avant le flip. On prend le cas d'un spin S_j et on voit que le changement de l'énergie de la paire (S_i, S_j) si on flippe S_j est de $\delta E = -2J$. Le flip est alors accepté avec la probabilité

$$P_{acc.} = 1 - \exp(-2J/k_bT).$$

Dans les simulations ceci veut dire qu'à ce stade on génère un nombre aléatoire uniforme $r \in]0, 1]$ et le flip est accepté si $r < P_{acc.}$. Si c'est le cas, alors on rajoute S_j au cluster qui aura ainsi grandi d'un site. Une fois épuisés tous les voisins du premier spin du cluster, on passe au deuxième et on refait la même opération, et ainsi de suite jusqu'à ce qu'il ne reste plus de voisins à parcourir pour le dernier spin du cluster. Pour le modèle de Heisenberg la seule modification concerne le sens du flip : on choisit une direction de l'espace au hasard et qui sera la normale à un plan qui passe par le site du spin. Le changement de l'état d'un spin consiste alors à lui donner sa réflexion par rapport à ce plan miroir comme nouvel état. Le single-flip (Metropolis) conduit à un grand nombre de rejets de flips à mesure que la température diminue (critical slowing down). Cela veut dire qu'on passe trop de temps à tenter de flipper des spins en vain, et le nombre de configurations différentes générés de cette façon s'en trouve réduit. Ce qui donne un impact négatif sur les statistiques. L'algorithme de Wolff sert à contourner ces problèmes.[14]

3.6 Mesure des exposants critiques

Le procédé que nous avons suivis lors de la simulation pour la mesure des exposants critiques est le suivant. Premièrement nous avons vérifié la nature de la transition de phase. comme l'énergie moyenne, et le paramètre d'ordre (l'aimantation) sont des fonctions continues de la température au point de la transition, et leurs fluctuations représentent un pic qui augmente avec l'augmentation de la taille du système (la divergence de ces deux grandeurs aura lieu si $L \rightarrow \infty$) ceci implique une transition de seconde ordre (au sens de Landau) donc on peut

définir ces exposants critiques : $\alpha, \beta, \gamma, \nu, \eta$. Deuxièmement nous avons procédé à l'évaluation de la température critique. La température critique est la coordonnée de l'intersection des cumulants de Binder [16]

$$U_l = 1 - \frac{2 \langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle \langle m^2 \rangle} \quad (3.3)$$

Les exposants critiques sont données par les relations suivantes

$$M = M_0 t^\beta$$

$$\chi = \chi_0 t^{-\gamma}$$

$$c_v = c_0 t^{-\alpha}$$

$$\xi = \xi_0 t^{-\nu}$$

avec

$$t = \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|$$

Dans le cadre d'une transition de phase de seconde ordre et pour des réseaux de grandes tailles, on peut utiliser la relation de l'énergie libre donnée par la technique de groupe de normalisation [16] :

$$F(L, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} F(tL^{\frac{1}{\nu}})$$

A partir de cette expression on peut avoir les fonctions scaling

$$M(L, T) = L^{\frac{-\beta}{\nu}} M^{(0)}(tL^{\frac{1}{\nu}})$$

$$\chi(L, T) = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi^{(0)}(tL^{\frac{1}{\nu}})$$

$$C_v(L, T) = L^{\frac{\alpha}{\nu}} C_v^{(0)}(tL^{\frac{1}{\nu}})$$

Les fonctions de scaling définies précédemment sont réduites à des constantes à la température critique :

$$M(L, T) \propto L^{\frac{-\beta}{\nu}}$$

$$\chi(L, T) \propto L^{\frac{\gamma}{\nu}}$$

$$C_v(L, T) \propto L^{\frac{\alpha}{\nu}}$$

Les relations de scaling entre les exposants sont les suivantes :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (3.4)$$

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (3.5)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (3.6)$$

Simulation du Modèle d'Ising

Dans ce chapitre, et le chapitre prochain, nous exposons les résultats de la simulation numérique faite sur le modèle d'Ising bidimensionnel ($2d$), et tridimensionnel ($3d$). Nous avons considéré un couplage ferromagnétique limité aux premiers voisins sur un réseau carré et un réseau cubique. Cette étude a été effectuée dans le but d'étudier la transition de phase ferro-paramagnétique. Nous avons testé la validité du programme construit par la comparaison de nos résultats aux autres résultats publiés. Les simulations sur le modèle d'Ising ont été réalisées avec la méthode Monte Carlo, par l'algorithme Metropolis. Par cette méthode, nous avons simulé des réseaux de différentes tailles : $L = 2, 4, 8, 16$ pour le cas d'Ising $2d$, et des réseaux de tailles $L = 3, 5, 10, 15, 20$ pour le cas d'Ising $3D$. Nous avons réalisé les deux premières simulations pour des nombres de cycles Monte Carlo variables, dans le but tester la qualité des résultats en fonction du nombre de cycles Monte Carlo. Dans ce qui suit nous allons présenter les résultats obtenus pour les quantités thermodynamiques : l'énergie interne, l'aimantation par spin qui est le paramètre d'ordre de la transition ferro-paramagnétique, et leurs fluctuations respectives : la chaleur spécifique et la susceptibilité magnétique.

Avant de présenter nos résultats il est utile de rappeler quelques propriétés connues du modèle étudié (d'Ising) :

- A une dimension le modèle d'Ising n'a pas de transition de phase, car l'énergie libre est définie pour toutes les températures (absence de singularité *i.e* températures critiques). La démonstration de l'absence de la transition de phase a été faite par Ising ; plus tard, ils ont démontré que tous les modèles à une dimension avec des interactions à courtes portées ne possèdent pas une transition de phase.
- A deux dimensions Rudolf Peirels a montré que ce modèle possède une transition de phase, Kramer et Wannier ont prédit la température critique à laquelle la transition de phase se

pas.

- Onsager a pu calculer la solution exacte du modèle d'Ising à deux dimension. Nous en donneront quelques résultats saillants plus ci-après. Les résultats exactes d'Onsager pour le modèle d'Ising à deux dimensions (voir ref[11]) :

- La température critique est de $T_C = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) = 2.2691853\dots$

- La chaleur spécifique :

$$C_m(T) \propto \ln|T - T_C|.$$

Ce qui donne un exposant $\alpha = 0$.

- L'aimantation est nulle ($M(T) = 0$) pour $T > T_C$ et pour $T \leq T_C$ elle est donnée par

$$M(T) \propto (T_C - T)^{1/8}.$$

Ce qui donne un exposant critique $\beta = 1/8$.

- La susceptibilité magnétique dans la région critique est donnée par

$$\chi(T) \propto |T - T_C|^{-7/4}.$$

Ce qui donne un exposant critique $\gamma = 7/4$.

- A trois dimensions le modèle d'Ising n'est pas encore résolu de façon analytique. Cependant, et comme on va le voir plus bas les simulations Monte carlo permettent d'estimer et de manière très précise la température critique, et les exposants critiques.

4.1 Résultats et Discussions du Modèle d'Ising Bidimensionnel

4.1.1 Courbe de l'Énergie Moyenne par Spin

La figure 4.1 montre la variation de l'énergie moyenne par spin pour différentes tailles du système : $L = 2, 4, 8, 16$. La courbe de l'énergie moyenne en fonction de la température se dévise en trois régions principales : région des basses températures, région des températures intermédiaires, et région des hautes températures.

- Aux basses températures $T \leq 0.68$ (en unité J/k_B) l'énergie moyenne par spin est égale à $E_0 \approx -2$ pour toutes les tailles. Ceci est expliqué par le fait que le terme dominant dans l'expression de l'énergie libre $F = E - TS$ est bien l'énergie interne E . Le deuxième terme ($-TS$) est négligeable. L'énergie interne contient une seule interaction magnétique entre les spins du réseau, qui est l'interaction d'échange J . Nous avons fait l'hypothèse qu'elle est limitée aux premiers voisins. Comme J est positive et égale à 1, on a un ordre ferromagnétique, où tous les spins sont parallèles. On peut trouver ce résultat de la simulation en calculant l'énergie moyenne :

$$\langle E \rangle = -\frac{J}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^4 S_i S_j$$

Lorsque les spins sont tous parallèles, c'est l'état fondamental ferromagnétique c'est à dire $\forall i, \text{ on a } S_i = 1$ on a :

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{J}{2N}N(1)(1 + 1 + 1 + 1) \\ \langle E \rangle &= -2J \end{aligned}$$

ou bien

$$\langle E \rangle = -\frac{J}{2N}N(-1)(-1 - 1 - 1 - 1) = -2J$$

d'où $\langle E \rangle = -2$. Cette valeur $\langle E \rangle = -2$ est deux fois dégénérée, correspond à une valeur moyenne d'énergie minimale des systèmes de spins. Cette énergie correspond à deux configurations parallèles des systèmes de spins, qui sont symétriques par une rotation d'un angle π . Ceci suggère que l'énergie n'est pas un bon paramètre d'ordre car l'énergie n'est pas unique, par contre l'aimantation moyenne par spin prend deux valeurs distinctes 1 pour la configuration parallèle dans le sens positif, et -1 pour la configuration dans le sens opposé. Ceci explique le choix de l'aimantation comme un paramètre d'ordre.

- Dans la région des températures intermédiaires ($0.68 \lesssim T \lesssim 4$) La courbe de l'énergie moyenne augmente avec l'augmentation de la température, et aussi avec la taille L . Il est important de mentionner que l'énergie moyenne est continue dans cette région pour toutes les tailles du système. L'augmentation de l'énergie moyenne avec la température est expliquée par le fait que les systèmes de spins absorbent l'énergie thermique (proportionnelle à $k_B T$).
- Dans la région des hautes températures ($T \gtrsim 4$), l'écart de l'énergie entre deux systèmes de spins de tailles successives ($L = 4, L = 2$), ($L = 8, L = 4$) diminue, jusqu'à tendre vers zéro pour les systèmes ($L = 16, L = 8$), *i.e* les courbes de l'énergie moyenne sont superposées. On observe qu' à partir d'une certaine température pour les systèmes $L = 8, L = 16$ leurs énergies moyennes tendent vers une même valeur. Ceci illustre une énergie propre à nouvelle phase paramagnétique. L'analyse de paramètre d'ordre nous éclairera d'avantage la nature de cette phase.

4.1.2 Courbe de la Chaleur Spécifique

La figure 4.2 montre la variation de la chaleur spécifique en fonction de la température pour différentes tailles du système.

- Aux basses températures $T < 0.81J/k_B$: la chaleur spécifique C_v est nulle pour toutes les tailles des systèmes de spins. Les fluctuations de l'énergie sont tellement petite qu'on peut les négliger (l'écart type moyen : $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = 0$), et les systèmes de spins s'ordonnent suivant la phase ferromagnétique. A partir d'une valeur de la température propre à chaque taille du système de spin, la chaleur spécifique commence à prendre une valeur non nulle ; et ainsi, suit un profil croissant en fonction de la température (et aussi avec

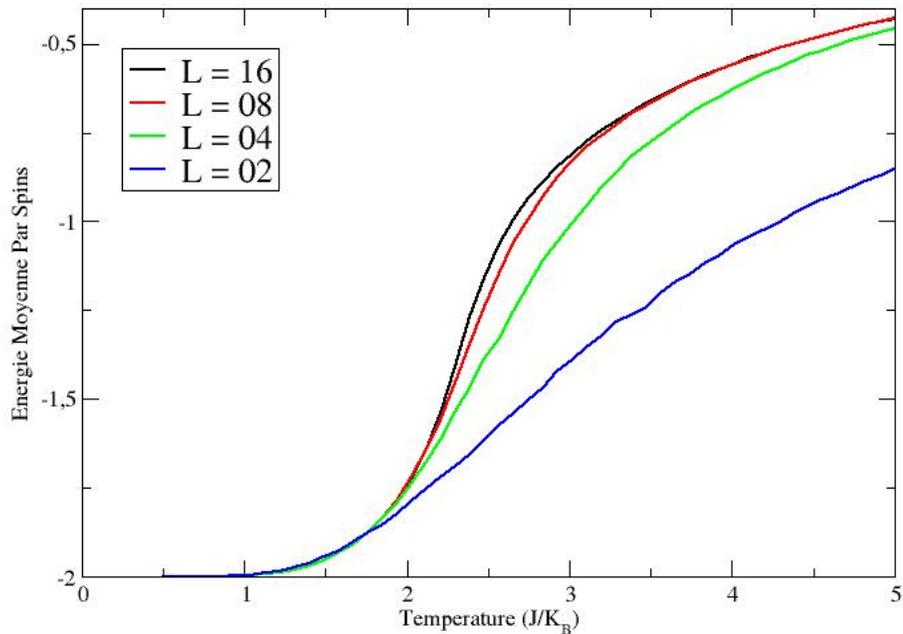


FIGURE 4.1: Energie moyenne du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

l'augmentation de la taille de système de spin), jusqu'à atteindre une valeur maximale à une température critique, caractéristique pour chaque système. Ceci est expliqué par les fluctuations de l'énergie du système qui augmentent avec l'augmentation de la température. L'expression de l'énergie libre est $F = E - T.S$, où E est l'énergie interne, T est la température, et S est l'entropie. L'augmentation de l'entropie avec la température tend à désordonner le système de spins, et ainsi l'augmentation de la chaleur spécifique.

- A la température de transition : le pic de la chaleur spécifique (voir les résultats d'Onsager et groupe de renormalisation) augmente avec l'augmentation de la taille du système (L). Ce pic suit une loi logarithmique en fonction de la taille du système : $C \propto \ln(L)$. En fittant la courbe des pics de la chaleur spécifique en fonction de $\ln(L)$, on aura :

$$C(\ln(L)) = 0.8311 \cdot \ln(L) + 0.058292 \quad (4.1)$$

où la valeur 0.8311 représente le coefficient de proportionnalité.

- A des températures supérieures à la température de transition, la courbe de la chaleur spécifique diminue pour toutes les tailles du système, et à des très haute température la chaleur spécifique converge vers la même valeur (tend vers zéro). Ce comportement (de la chaleur spécifique) caractérise la nouvelle phase paramagnétique désordonnée.

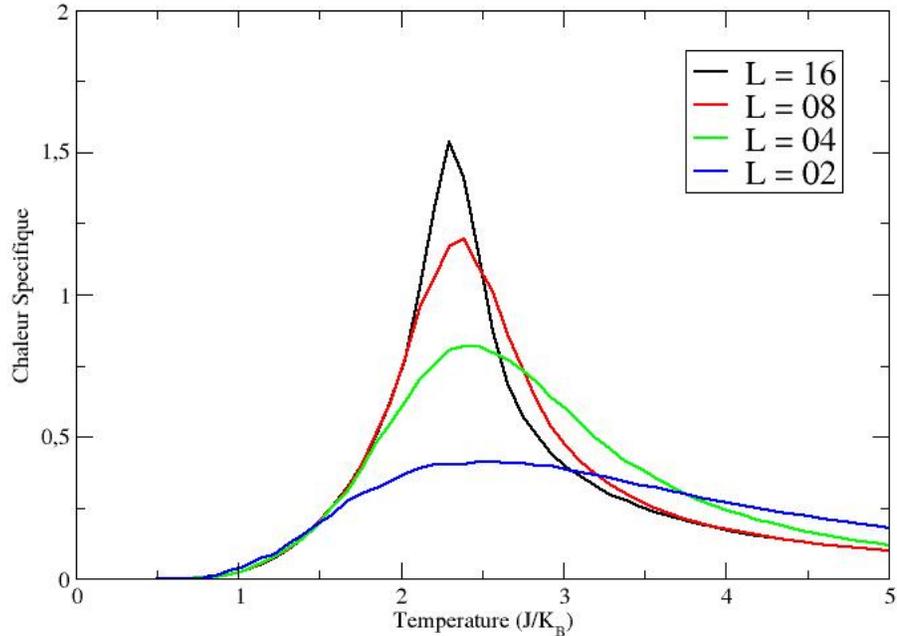


FIGURE 4.2: Chaleur spécifique du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

4.1.3 Courbe de l'Aimantation Moyenne par Spins

La figure 4.4 montre la variation de l'aimantation en fonction de la température. Cette variation est classée en trois régions principales : région des basses températures, région des températures intermédiaires, et région des hautes températures.

- Pour des températures $T < 0.77 J/k_B$, tous les réseaux de différentes tailles de spins ont la même valeur de l'aimantation $M = 1$. Aux basses températures, tous les réseaux de spins s'orientent parallèlement les uns aux autres, *i.e* la phase ferromagnétique, ce qui donne une valeur $M = 1$.
- Dans la région des températures intermédiaires $1.5 \lesssim 3.5$, l'aimantation diminue avec l'augmentation de la température pour toutes les tailles du systèmes. Par contre, la courbure de l'aimantation augmente d'une manière significative avec l'augmentation de la taille du système (une faible courbure pour $L = 2$, une plus grande courbure pour $L = 16$). Il est important aussi de mentionner que la courbe de l'aimantation est continue à la température de transition. L'augmentation de la température augmente l'entropie, ce qui favorise le désordre, d'où la diminution de l'aimantation.
- Aux hautes températures l'écart entre les valeurs de l'aimantation pour deux tailles du système de spin successive est grand par rapport à celui trouvé pour l'énergie moyenne.

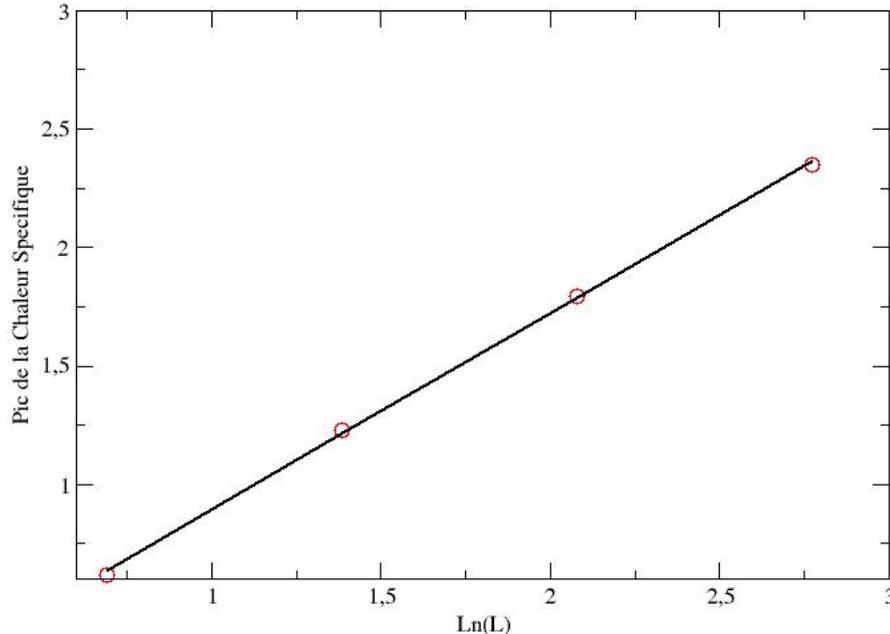


FIGURE 4.3: Pic de la Chaleur Spécifique en fonction de logarithme népérien de L du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

On remarque aussi que l'aimantation tend à prendre une valeur constante tend vers zéro à ces hautes températures. Aux hautes températures $T \gtrsim 4$, les réseaux de différentes tailles sont tous désordonnés, les moments ont des orientations aléatoires (1 ou -1), et leurs sommes tend vers une valeur nulle. L'aimantation doit être nulle pour qualifier cette transition de seconde ordre, mais comme la simulation est limitée à une taille finie de système, on ne pourra pas avoir une valeur nulle de l'aimantation à des hautes températures. L'aimantation diminue avec l'augmentation de la taille du système, à la limite $L \rightarrow \infty$ $M = 0$. La région des températures intermédiaires représente la région de la transition de phase ordre-désordre ou bien ferro-paramagnétique. Nous observons que l'énergie moyenne et l'aimantation sont continus d'où la conclusion que cette transition de phase est continue, et de seconde ordre (continuité de la dérivée première de l'énergie libre au point de transition). La température critique pour ces systèmes de spin est obtenue par l'intersection des cumulants, $T_C = 2.26$ en unité J/k_B .

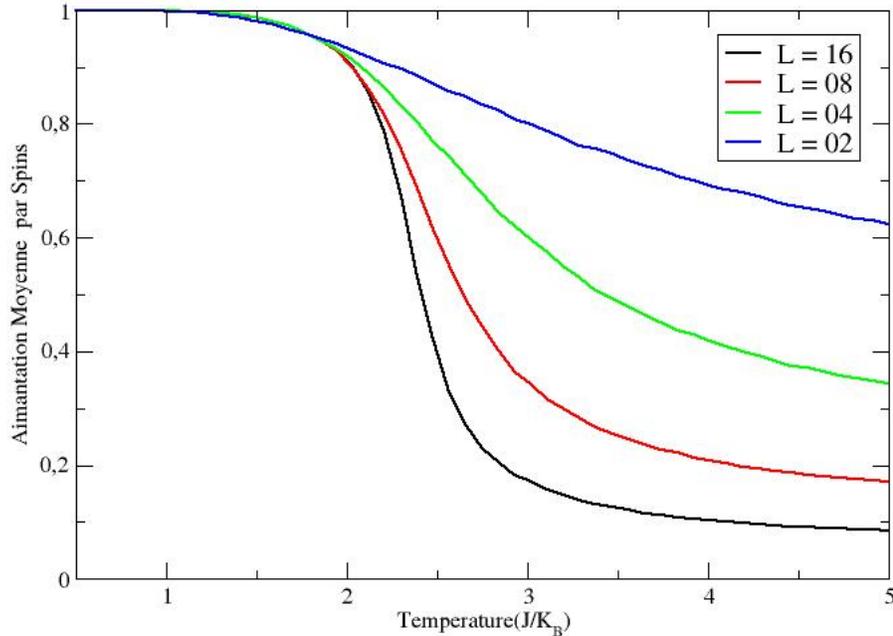


FIGURE 4.4: Aimantation moyenne du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

4.1.4 Courbe de la Susceptibilité Magnétique

La figure 4.5 montre la variation de la susceptibilité en fonction de la température. Cette variation est classée en trois régions principales : région des basses températures, région des températures intermédiaires, et région des hautes températures.

- Aux basses températures, la susceptibilité magnétique est nulle pour tous les systèmes de spins. Comme la susceptibilité est une grandeur qui représente les fluctuations (l'écart type moyen par T) de l'aimantation, et cette dernière est constante (égale à 1). Ce qui donne une valeur nulle de la susceptibilité.
- Dans la région des températures intermédiaires, la susceptibilité augmente pour toutes les tailles du système de spins jusqu'à atteindre une valeur maximale, correspondant à une valeur de la température de transition propre à chaque système de spin ; au-dessus de cette valeur de la température de transition, la courbe de la susceptibilité suit un profil décroissant jusqu'à atteindre des valeurs égales aux hautes températures qui tend vers zéro. On remarque aussi dans la région des températures intermédiaires que la courbe de la susceptibilité se retrécit avec l'augmentation de la taille du système. A la différence du pic de la chaleur spécifique qui est proportionnel à $\ln(L)$, le pic de la susceptibilité est proportionnel à L avec un facteur en puissance.

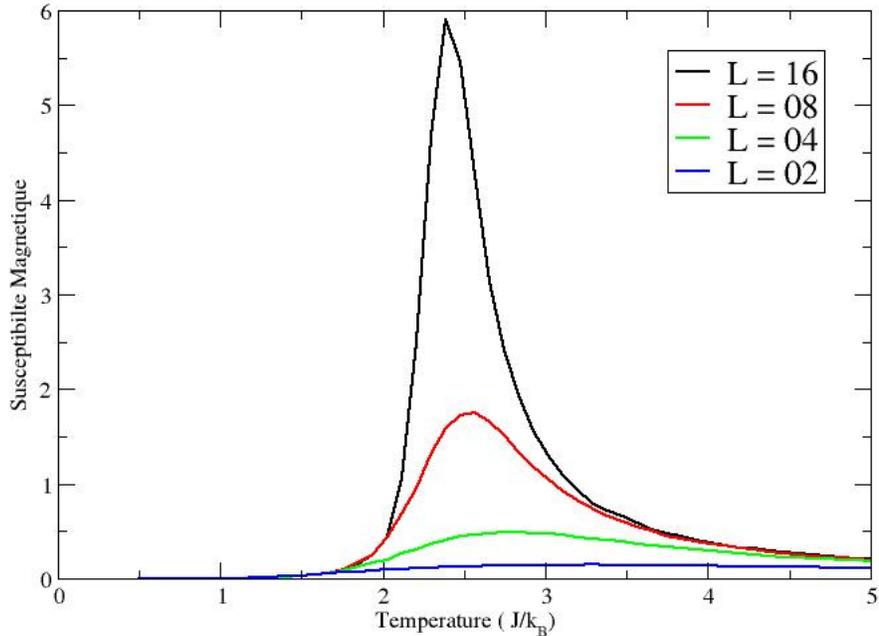


FIGURE 4.5: Susceptibilité magnétique du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

4.1.5 Mesure des Exposants Critiques

La figure 4.7 montre la variation de cumulant de Binder en fonction de la température. Avant de calculer les exposants critiques on mesure d'abord la température critique. Cette dernière correspond à la coordonnée du point d'intersection des cumulants Binder montrés dans la figure 4.7. Elle correspond à une valeur $T_C = 2.264$. Les résultats de l'analyse de la pente de l'aimantation à la température de transition $T_c = 2.264$ pour différentes tailles du système sont données dans le tableau suivant :

L	$M(L, T_c)$
4	0.844
8	0.783
16	0.718
32	0.656

Le rapport β/ν pour les tailles montrées dans le tableau précédent est donné par :

$$\frac{\beta}{\nu} = -\frac{\ln \frac{0.781}{0.783}}{\ln \frac{16}{8}} = 0.125$$

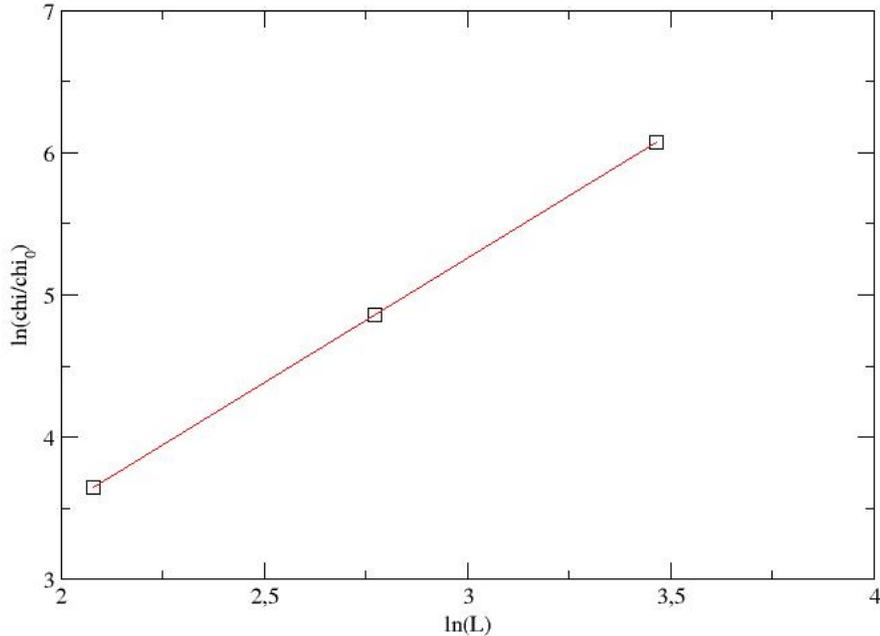


FIGURE 4.6: Pic de la susceptibilité magnétique du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

$$\frac{\beta}{\nu} = -\frac{\ln \frac{0.656}{0.781}}{\ln \frac{32}{16}} = 0.123$$

la valeur du rapport β/ν est estimée par une moyenne des deux rapports précédents

$$\frac{\beta}{\nu} = \frac{0.125 + 0.123}{2} = 0.124$$

Les résultats de l'analyse du pic de la susceptibilité magnétique pour différents L sont donnés dans le tableau suivant :

L	$\chi(L)$
8	1.747
16	5.900
32	19.803

Le rapport des deux exposants γ et ν est donné par :

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1.751$$

D'après les résultats du groupe de renormalisation et les calculs exactes d'Onsager l'exposant α est nul pour le cas du modèle Ising bidimensionnel car le pic de la chaleur spécifique est régi par une loi logarithmique. On prend la valeur $\nu = 1$ déduite par les relations de scaling. Nous

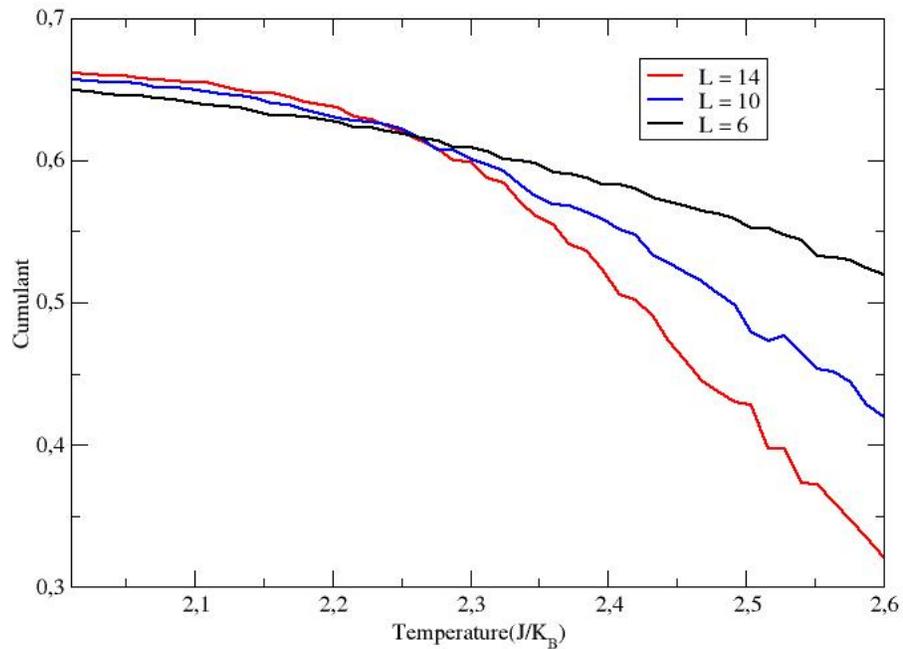


FIGURE 4.7: Cumulant de Binder du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

utilisons cette valeur pour trouver les autres exposants critiques [12, 17]. On trouve $\beta = 0.124$, $\gamma = 1.751$, et $\eta = 0.249$. Alors, nos résultats sont en bon accord avec les résultats trouvés par Kotze (voir ref [12]) et aussi avec les résultats théoriques.

5.1 Courbe de l'Aimantation Moyenne

La figure 5.1 montre la variation de l'aimantation en fonction de la température pour différentes tailles du système.

- Aux basses températures $0 \lesssim T \lesssim 2$ la valeur de l'aimantation pour toutes les tailles du système de spins est égale à 1. Ceci est expliqué par le fait que les systèmes de spins s'ordonnent suivant un ordre ferromagnétique. L'énergie libre du système est $F = E - TS$, $TS = 0$. L'énergie $E = -J \sum S_i S_j$. Comme $J > 0$ on obtient un ordre ferromagnétique. C'est l'état fondamental à $T = 0$.
- Aux températures intermédiaires $2 \lesssim T \lesssim 4.5$ l'aimantation diminue pour toutes les tailles du système. Il est important aussi de mentionner que l'aimantation est continue à la température critique. La diminution de l'aimantation est expliquée par le contact des systèmes de spins avec un réservoir de chaleur. Le terme TS prend une valeur non nulle et devient de plus en plus important avec l'augmentation de la température, d'où l'augmentation du désordre ainsi que la diminution de l'aimantation. La continuité de l'aimantation nous renseigne sur une transition de phase continue au point de la transition.
- Aux hautes températures $T \gtrsim 4.5$, l'aimantation tend à prendre des valeurs constantes proches de zéro. A ces températures les systèmes de spins sont désordonnés, on est dans la phase paramagnétique.

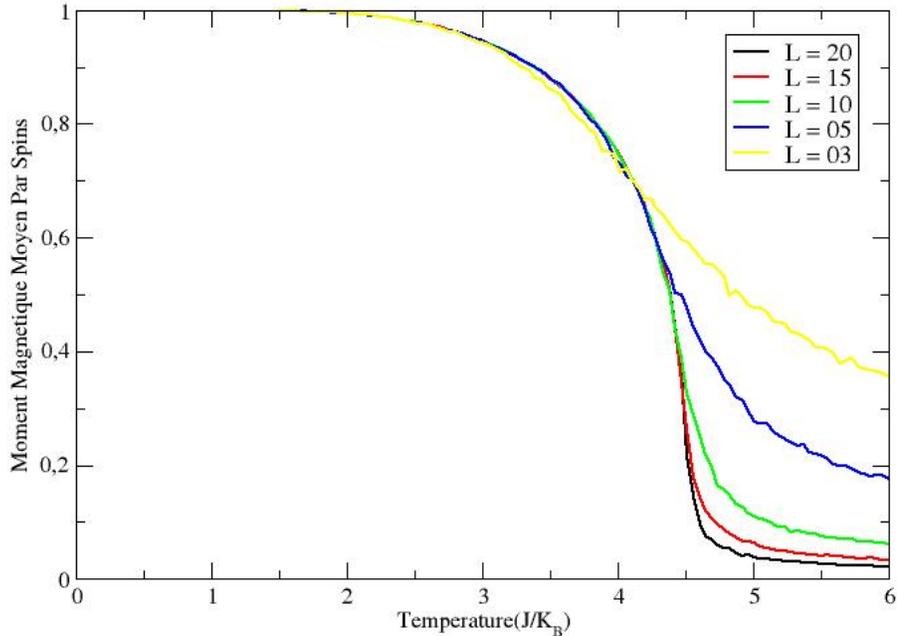


FIGURE 5.1: Aimantation par spin du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

5.2 Courbe de l'Energie Moyenne par Spin

La figure 5.2 montre la variation de l'énergie moyenne par nombre de spins pour différentes tailles du système. Cette courbe de l'énergie se divise en trois régions principales : région des basses températures, région des températures intermédiaires et région des hautes températures. Aux basses températures ($0 < T \leq 1.63$), l'énergie moyenne par spin correspond à une valeur $E_0 = -3$ pour toutes les tailles L du système. E_0 représente l'énergie de l'état fondamental. E_0 est deux fois dégénérés et correspond à la configuration parallèle de tous les spins (ordre ferromagnétique). Nous remarquons que l'aimantation à saturation persiste pour un intervalle de température relativement large. Ce comportement est expliqué par le fait que les spins dans le cas d'Ising ont une symétrie discrète. Il faut une énergie de l'ordre de $2J$ pour renversé un spin. Dans la région des températures intermédiaires ($3 \leq T \leq 5.5$) l'énergie augmente avec l'augmentation de la température pour toutes les tailles L du système. A la différence de la courbe de l'énergie moyenne dans le cas bidimensionnel, la courbure de l'énergie moyenne dans le cas tridimensionnel augmente (sa courbure à une forme d'un arc). L'énergie moyenne est continue à la température de transition ($T_c \approx 4.50$) L'augmentation de l'énergie est expliqué par le contact des systèmes de spin avec un réservoir de chaleur (l'absorption de l'énergie thermique). Nous avons remarqué que l'énergie et le paramètre d'ordre (aimantation)

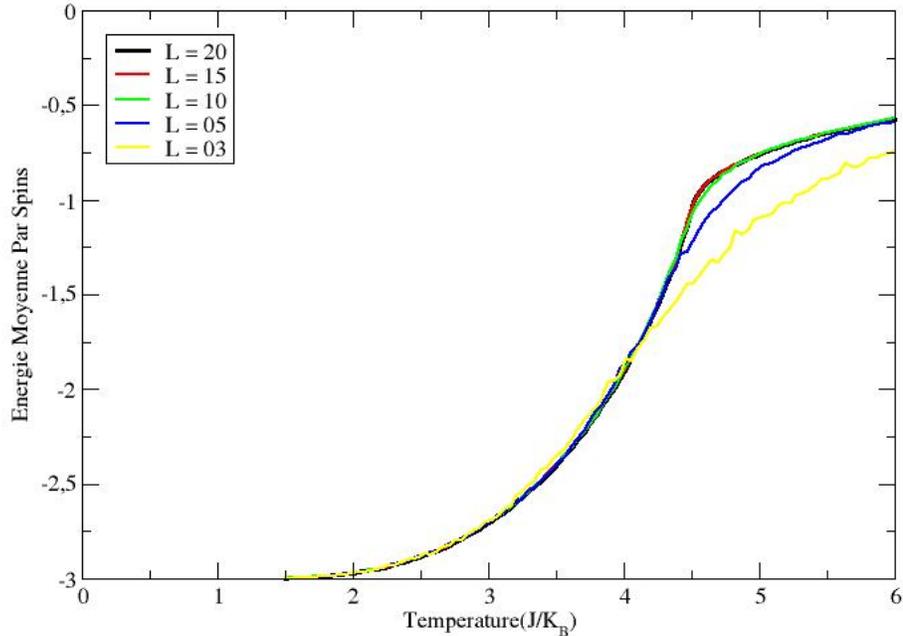


FIGURE 5.2: Energie moyenne par spins du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

sont continus dans cette région de température d'où la transition de phase est de seconde ordre. A des températures supérieures à la température de transition on observe que le taux d'augmentation de l'énergie diminue avec l'augmentation de la température pour toutes les tailles L du système de spins, et aussi les courbes d'énergie moyenne convergent (se superposent) pour de grandes tailles du système. Ces observations nous informent sur une énergie propre à une phase nouvelle désordonnée paramagnétique.

5.3 Courbe de la Chaleur Spécifique

La figure 5.3 montre la variation de la chaleur spécifique pour différentes tailles de système (L) en fonction de la température (T).

Dans la région des basses températures ($T_c \approx 0$) la chaleur spécifique est nulle pour toutes les tailles du système de spins. Cette grandeur représente les fluctuations de l'énergie. Comme l'énergie est constante, donc $\langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle$, $C = 0$. Dans la région des températures intermédiaires la courbe de la chaleur spécifique augmente jusqu'à atteindre une valeur maximale propre chaque taille du système de spin; puis elle diminue jusqu'à tendre vers des valeurs égales pour les systèmes de spin ($L = 10, 15, 20$) à des hautes températures. L'augmentation de la chaleur spécifique est expliquée par l'augmentation des fluctuations de l'énergie (contacte

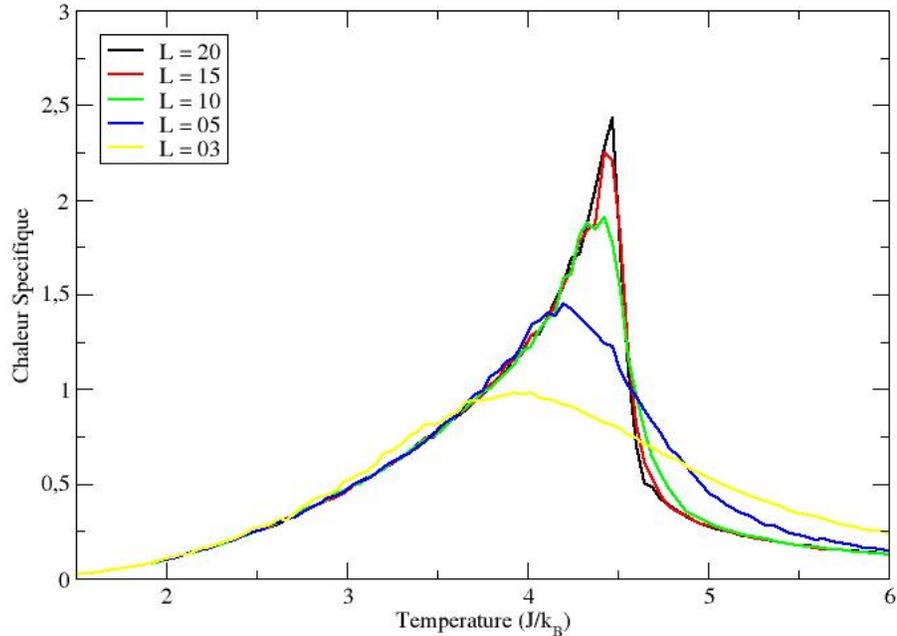


FIGURE 5.3: Chaleur spécifique du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

avec le réservoir de chaleur). Le pic de la chaleur spécifique augmente avec la taille du système (L), il est régi par cette loi : $C_v(L) \sim L^{\frac{\alpha}{\nu}}$ et sa valeur correspond à une température de transition propre à chaque taille du système de spin. Ceci est en accord à la théorie (voir résultats du groupe de renormalisation..) Physiquement pour voir une divergence dans le pic de la chaleur spécifique à la température de transition la taille du système L doit tendre vers l'infini ; malgré l'absence de cette divergence on peut qualifier celle-ci d'une transition de seconde ordre car cette divergence aura lieu pour une valeur de L qui tend vers l'infini. La courbe de la chaleur spécifique diminue au dessus de la température critique jusqu'à tendre vers des valeurs égales à des hautes températures (pour les systèmes de grandes tailles). Cette diminution est expliquée par le passage d'une région de transition de phase (éloignements de la température critique) vers une phase désordonnée qui se caractérise par des fluctuations d'énergies moins importantes.

5.4 Courbe de la Susceptibilité Magnétique

La figure 5.4 montre la variation de la susceptibilité en fonction de la température pour différentes tailles du système (différents L). Aux basses températures ($0 < T \leq 3$) la susceptibilité prend une valeur $\chi_0 \approx 0$ pour toutes les tailles du système de spins.

Par définition $dM = \chi dH$ et à très basse températures l'application d'un champ magnétique

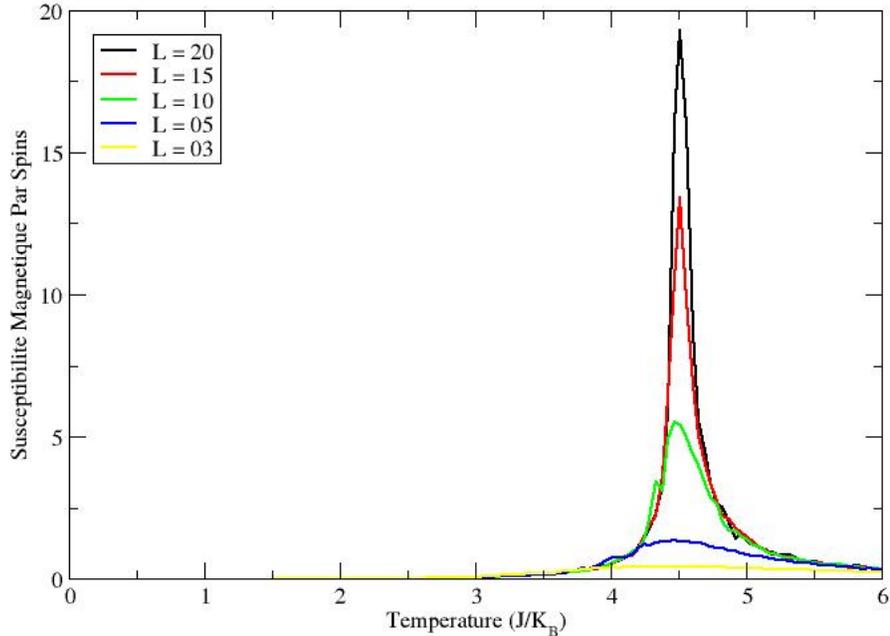


FIGURE 5.4: Susceptibilité magnétique du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

(faible) parallèlement ou antiparallèlement à M n'a pas d'effet sur celui-ci. On trouve donc une susceptibilité $\chi \approx 0$. On peut également lier susceptibilité aux fluctuations de l'aimantation par :

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{K_b T}$$

l'aimantation est constante aux basses températures, et par conséquent les fluctuations de l'aimantation sont nulles

$$\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = 0$$

ce qui donne une valeur $\chi = 0$.

Dans la région des températures intermédiaires, la susceptibilité magnétique montre un pic plus important avec l'augmentation de L . La variation de ce pic est proportionnelle à $L^{\frac{\alpha}{\nu}}$ (voir relations scaling du groupe de renormalisation). Ce pic correspond à une température de transition (critique) propre à chaque système de spin. Au dessus de la température de transition, la courbe de la susceptibilité est inversement proportionnelle à la température

$$\chi \propto \frac{1}{T - T_c}$$

où T_c est la température critique. Ce comportement de la susceptibilité est identique au comportement de la susceptibilité de Curie-Weiss, en effet aux hautes températures on a une phase

paramagnétique désordonnée.

5.4.1 Exposants Critiques

La figure 5.5 montre la variation de cumulant de Binder en fonction de la température. L'intersection des cumulants de Binder des réseaux $L = 4$, $L = 8$, et $L = 16$ correspond à une valeur de température critique $T_c = 4.499 \pm 0.013$. Le rapport $\alpha/\nu = 0.254$. Ce rapport est obtenu

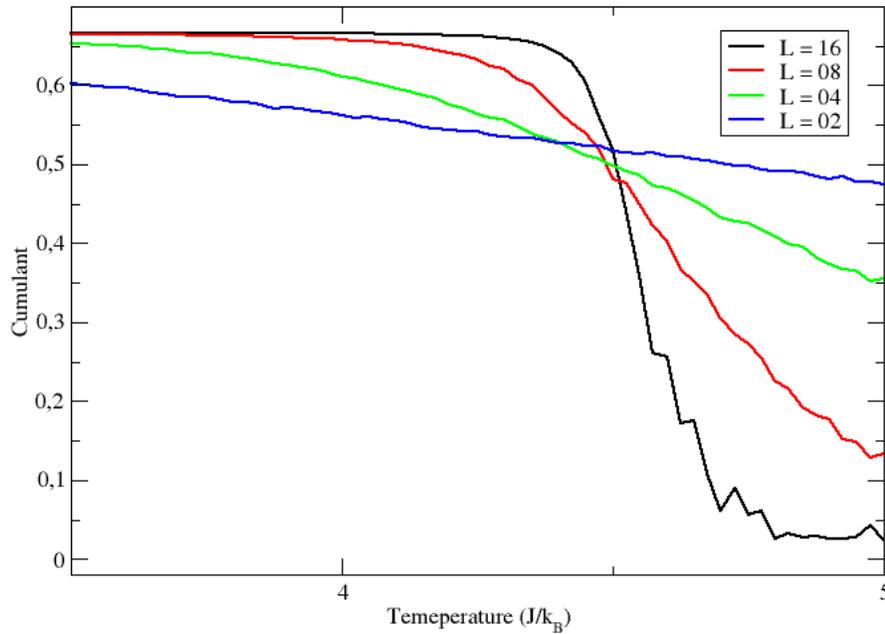


FIGURE 5.5: Cumulant de Binder du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

par l'intermédiaire de la relation de scaling du pic de la chaleur spécifique en fonction de la taille L . Nous avons utilisé les réseaux de grandes tailles $L = 20$ et $L = 15$. Le rapport théorique $\alpha/\nu = 0.174$; on peut améliorer la précision si on augmente d'avantage les tailles du réseau. Le tableau 5.1 montre la variation du pic de la chaleur spécifique.

TABLE 5.1: Pics de la chaleur spécifique du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

L	Pic de $C_V(L)$
20	2.41
15	2.24
10	1.87
5	1.43

TABLE 5.2: Pics de la susceptibilité magnétique du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

L	Pic de χ
20	22.03
15	13,21
10	5.49

Le tableau 5.2 montre la variation du pic de la susceptibilité magnétique. Le rapport $\gamma/\nu = 1.965$ est obtenu par l'analyse du pic de la susceptibilité magnétique pour des tailles du réseau $L = 20, 15, 10$. Ce rapport est approximativement égal au rapport théorique $\gamma/\nu = 1.96$.

Simulation du Modèle de Heisenberg

Dans ce chapitre nous exposerons les résultats de nos simulations du modèle ferromagnétique de Heisenberg sur un réseau cubique simple de tailles de tailles $L = 12, 14, 16, 20, 24, 26, 28, 30$. Mais avant cela nous tenons à rappeler quelques résultats concernant notamment les systèmes de basse dimensionalité.

6.1 Ondes de Spins ou Modes de Goldstone dans le Modèle de Heisenberg

De manière générale la brisure d'une symétrie continue conduit à l'apparition de ces modes d'excitations collectives. Les deux exemples les plus connus dans la physique du solides sont les phonons et les magnons. Les phonons sont associés à la brisure de la symétrie de translation lors de la transition liquide-solide. Les magnons sont associés à la brisure de la symétrie de rotation lors de la transition paramagnétique-ferromagnétique dans le modèle de Heisenberg par exemple. La relation de dispersion des magnons dans le modèle ferromagnétique de Heisenberg sur un réseau cubique simple est donnée par¹

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = 2JSz(1 - \gamma_{\mathbf{k}}),$$

où

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)].$$

où \mathbf{k} est le vecteur d'onde, $\hbar\omega$ est l'énergie correspondante, a est le paramètre de maille, S est le module de spin, et z est le nombre de premiers voisins. Dans la région des basses températures

1. Voir Diep[7] p. 141.

seuls les modes de plus basse énergie (de longue longueurs d'ondes) sont excités. On peut alors écrire

$$\gamma_{\mathbf{k}} \approx \frac{1}{3} [3 - (ka)^2/2],$$

ce qui donne

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} \approx JSz(ka)^2.$$

Cette relation $\hbar\omega_{\mathbf{k}} \propto k^2$ tient aussi pour $d = 2$ et $d = 1$.

L'aimantation est donnée par

$$M(T) = \sum_i \langle S_i \rangle = N \left(S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \right),$$

où $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ est le nombre moyen de magnons excités à la température T et il est donné par

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{\exp(\hbar\omega_{\mathbf{k}}/k_B T) - 1}.$$

Comme l'énergie du magnon de vecteur d'onde \mathbf{k} dépend uniquement de son module, on peut écrire

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \propto \int_0^\infty \frac{k^{d-1} dk}{\exp(\hbar\omega_{\mathbf{k}}/k_B T) - 1},$$

où la limite supérieure de l'intégrale est étendue à l'infini pour la raison qu'on s'intéresse aux basses températures uniquement, et où d représente la dimensionalité du système. Pour une T fixe et aux petites valeurs de k , le dénominateur devient

$$\exp(\hbar\omega_{\mathbf{k}}/k_B T) - 1 \approx JSz(ka)^2/k_B T,$$

et on voit alors que pour $d \leq 2$ cette intégrale diverge. Cela veut dire que l'aimantation s'annule par l'effet des excitations. Ceci explique alors l'absence d'ordre pour ce système de spins à une et deux dimensions. C'est l'essence du théorème de Mermin-Wagner introduit ci-après.

6.2 Théorème de Mermin-Wagner

Mermin et Wagner [21] ont montré qu'il n'y a pas de phase avec une brisure de symétrie continue pour $T > 0$ pour des système ayant une dimensionalité $d \leq 2$. Ce théorème s'applique au modèle de Heisenberg et XY mais pas au modèle d'Ising qui, lui, a une symétrie discrète. On a vu en effet que le modèle d'Ising à deux dimensions présente une transition de phase où l'aimantation passe d'une valeur nulle à haute température à une valeur finie à basse température. Le modèle XY présente un semblant de transition à deux dimensions même si l'aimantation y reste nulle à toute température finie : c'est la transition de Kosterlitz-Thouless. On y distingue par contre deux phases relativement au comportement de la longueur de corrélation : à haute température la fonction de corrélation décroît exponentiellement $G(r) \sim \exp(-r/\xi)$ pour $r \gg \xi$ mais

à basse température la fonction de corrélation obéit à une loi en puissance pour les distances suffisamment longues : $a \ll r \ll \xi$, où a est le paramètre de maille. C'est pour cette raison que nous nous intéressons au modèle tridimensionnel dans ce travail.

6.3 Echantillonnage dans le Modèle de Heisenberg

On peut naïvement croire qu'il suffit de générer deux nombres aléatoires avec une distribution uniforme $\theta \in]0, \pi]$ et $\varphi \in]0, 2\pi]$ et puis d'écrire les nouvelles composantes de S comme

$$\begin{aligned} S_{\text{nouv.}}^x &= \sin(\theta) \cos(\varphi), \\ S_{\text{nouv.}}^y &= \sin(\theta) \sin(\varphi), \\ S_{\text{nouv.}}^z &= \cos(\theta). \end{aligned}$$

Il s'avère cependant que la distribution de probabilité des nouvelles composantes n'est pas du tout uniforme. En effet, si on regarde de près on voit par exemple que pour la composante $S_{\text{nouv.}}^z$ la distribution²

$$P(S_{\text{nouv.}}^z) = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - (S_{\text{nouv.}}^z)^2}}.$$

Ceci implique que les régions où $S_{\text{nouv.}}^z$ prend les valeurs proches de ± 1 sont échantillonnées de manière trop biaisée. Il en va de même bien évidemment pour les deux autres composantes. Pour remédier à ce problème on procède comme suit³ : on génère deux nombres aléatoires r_1 et r_2 distribués uniformément dans $]0, 1]$. Puis on définit trois nombres

$$\begin{aligned} \xi_1 &= 1 - 2r_1, \\ \xi_2 &= 1 - 2r_2, \\ \xi^2 &= \xi_1^2 + \xi_2^2. \end{aligned}$$

Si $\xi^2 < 1$ la paire de nombres aléatoire est acceptée, sinon on en génère une autre et ainsi de suite jusqu'à ce que la condition $\xi^2 < 1$ soit satisfaite. En suite on définit les nouvelles composantes de S comme suit

$$\begin{aligned} S_{\text{nouv.}}^x &= 2\xi_1 \sqrt{1 - \xi^2}, \\ S_{\text{nouv.}}^y &= 2\xi_2 \sqrt{1 - \xi^2}, \\ S_{\text{nouv.}}^z &= 1 - 2\xi^2. \end{aligned}$$

Avec cet échantillonnage on obtient une distribution uniforme de $S_{\text{nouv.}}$ sur la sphère de rayon unité. Au fait on procède de la même manière pour générer la normale au plan miroir utilisé dans l'algorithme de Wolff appliqué au modèle de Heisenberg.

2. Voir Belorizky et Gorecki[15] pp. 11-13.

3. Voir ref. [16]

6.4 Résultats et Discussions

6.4.1 Courbe de l'Aimantation Moyenne par Spin

La figure 6.1 montre la variation de l'aimantation en fonction de la température pour différentes tailles du système. Aux très basses températures ($T \approx 0 J/k_b$) ($T = 0 J/k_B$) l'aimantation

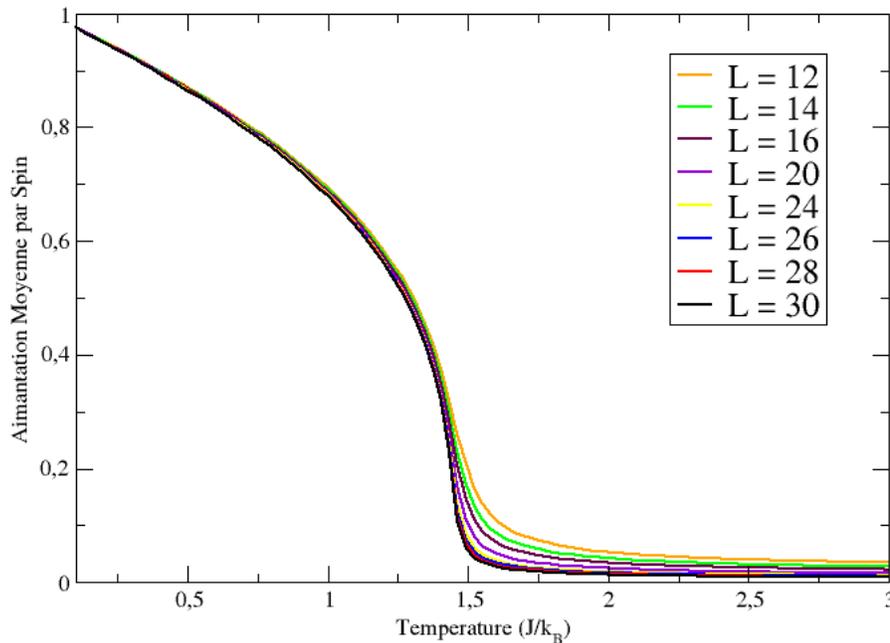


FIGURE 6.1: Aimantation par spin du modèle de Heisenberg $3d$ sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L .

prend une valeur $M_0 = 1$ pour chaque taille du système de spins. Pour une petite variation de la température, l'aimantation diminue. L'aimantation continue de diminuer jusqu'à à une température critique propre à chaque taille du système de spins. Au-dessus de ces températures, l'aimantation prend approximativement des valeurs constantes, qui devient de plus en plus proche de zéro avec l'augmentation de la taille du système de spins. Aux très basses températures tous les réseaux de spins s'ordonnent suivant un ordre ferromagnétique. Le système de spin dans le cas du modèle de Heisenberg sont très sensibles à l'effet de la température. Comme les vecteurs de spins S peuvent tourner continuellement dans la sphère de rayon $R = 1$. Les spins s'agitent facilement (suivant les deux degrés de liberté) sous l'effet de la température. Les systèmes de spins s'agitent de plus en plus en augmentant la température jusqu'à atteindre une température critique propre à chaque système. Au dessus de cette température, les systèmes de spins transiteront vers la phase désordonnée paramagnétique. Cette phase se caractérise par

une aimantation faible (proche de zéro ou nulle).

La théorie des magnons, valable aux basses températures, donne la loi de Bloch :

$$\frac{M(T) - M(0)}{M(0)} \propto T^{3/2}$$

pour l'aimantation en fonction de la température. Ce résultat a été confirmé expérimentalement.[3, 7] Ceci est à comparer avec les résultats Monte Carlo qui donnent une capacité calorifique (constante) aux basses températures.

6.4.2 Courbe de l'Énergie Moyenne

La figure 6.2 montre la variation de l'énergie moyenne en fonction de la température pour différentes tailles du système. Au voisinage de très basses températures ($T \approx 0J/k_B$) l'énergie

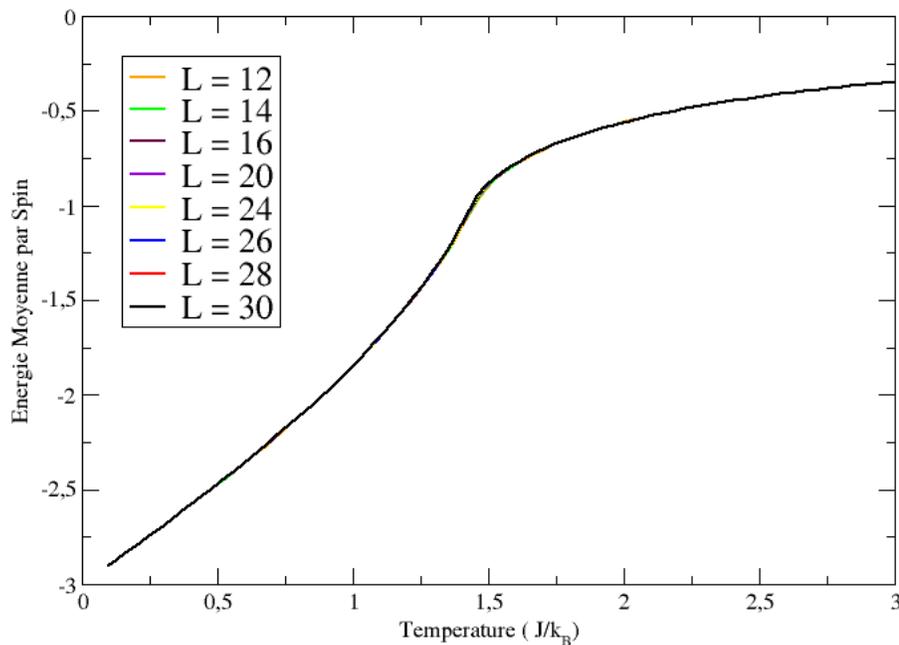


FIGURE 6.2: Energie Moyenne par Spins du modèle de Heisenberg $3d$ sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L

prend une valeur $E_0 \approx -3J$, pour chaque taille du système de spins ($L = 12, 14, \dots, 30$). L'énergie augmente avec l'augmentation de la température jusqu'à une température critique $T_c \approx 1.440$. Au-dessus de cette valeur de la température, l'augmentation devient de moins en moins prononcée. On observe que les courbes de l'énergie se superposent avec l'augmentation de la taille du système. L'énergie est continue à la température critique. L'énergie prend une valeur constante dans un intervalle de température relativement large pour le cas du modèle d'Ising. Par contre

pour le cas du modèle de Heisenberg on observe l'absence de cette région de basse température où l'énergie est constante. A la température $T \approx 0 J/K_B$ tous les systèmes de spins s'ordonnent suivant un ordre ferromagnétique. L'énergie mise en jeu pour changer l'état des spins (leurs orientation) est faible en comparaison aux spins dans le cas du modèle d'Ising, l'absorption d'une faible énergie thermique fait varier l'énergie de système. La variation de l'énergie aux très basses température est expliquée par la théorie des magnons, on trouve

$$E(T) - E(0) \propto T^{5/2},$$

ce qui donne pour la capacité calorifique magnétique

$$C_m \propto T^{3/2}.$$

L'augmentation de l'énergie moyenne est due à l'augmentation de l'énergie thermique $k_B T$ absorbée par les systèmes de spins.

6.4.3 Courbe de la Chaleur Spécifique

La figure 6.3 montre la variation de la chaleur spécifique pour différentes tailles de système (L) en fonction de la température (T).

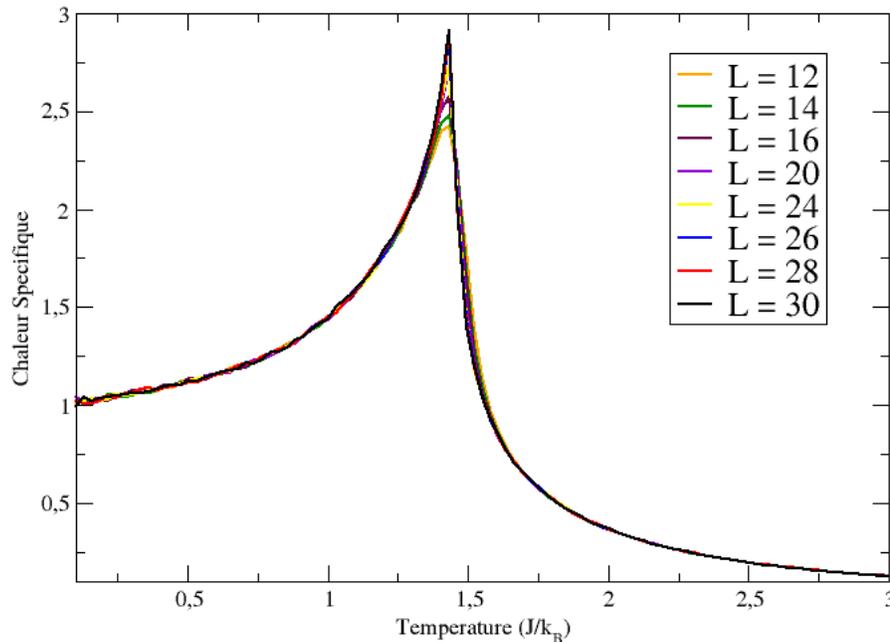


FIGURE 6.3: Chaleur spécifique du modèle de Heisenberg $3d$ sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L

Aux très basses températures ($T \approx 0$) la chaleur spécifique prend une valeur proche de 1 pour toutes les tailles du système. La valeur de la chaleur spécifique doit prendre une valeur nulle à $T_0 = 0$ ce qui correspond à la théorie. Pour un problème dû à la simulation la chaleur spécifique prend une valeur non nulle. Les fluctuations de l'énergie a lieu et augmente car les énergies des spins varient sensiblement avec la température. Le gap d'énergie dans ce cas est nul. la courbe de la chaleur spécifique augmente jusqu'à atteindre une valeur maximale propre chaque système de spin ; puis elle diminue jusqu'à tendre vers des valeurs égales nulle pour toutes les tailles du système de spin à des hautes températures. L'augmentation de la chaleur spécifique est expliquée par l'augmentation des fluctuations de l'énergie (contacte avec le réservoir de chaleur. Le pic de la chaleur spécifique augmente avec la taille du système (L), il est régi par cette loi $C_v(L) \sim L^{\frac{\alpha}{\nu}}$ et sa valeur correspond à une température de transition propre à chaque taille du système de spin. Physiquement pour avoir une divergence dans le pic de la chaleur spécifique à la température de transition la taille du système (L) doit tendre vers l'infini ; malgré l'absence de cette divergence on peut qualifier celle-ci d'une transition de seconde ordre, car cette divergence aura lieu pour une valeur de L qui tend vers l'infini. La courbe de la chaleur spécifique diminue au dessus de la température critique jusqu'à tendre vers des valeurs égales à des hautes températures (pour les systèmes de grandes tailles). Cette diminution est expliquée par le passage d'une région de transition de phase (éloignements de la température critique) vers une phase désordonnée qui se caractérise par des fluctuations d'énergies moins importantes.

6.4.4 Courbe de la Susceptibilité Magnétique

La figure 6.4 montre la variation de la susceptibilité en fonction de la température pour différentes tailles du système (différents L). Aux très basses températures ($T \approx 0J/k_B$) la susceptibilité prend une valeur $\chi_0 = 0$ pour toutes les tailles du réseau.

Par définition $dM = \chi dH$ et à très basse températures l'application d'un champ magnétique (très faible) parallèlement ou antiparallèlement à M n'a pas d'effet sur celui-ci. On trouve donc une susceptibilité $\chi \approx 0$. On peut également lier susceptibilité aux fluctuations de l'aimantation par :

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{K_b T}$$

l'aimantation est constante aux basses température, et par conséquent les fluctuations de l'aimantation sont nulles

$$\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = 0$$

ce qui donne une valeur $\chi = 0$ La courbe de la susceptibilité augmente avec la l'augmentation de la température jusqu'à une température propre à chaque taille du système. Cette augmentation est expliquée par les fluctuations de l'aimantation qui augmentent avec la température. Les valeurs moyennes des spins sur l'axe d'aimantation dans le cas de Heisenberg varient sensible-

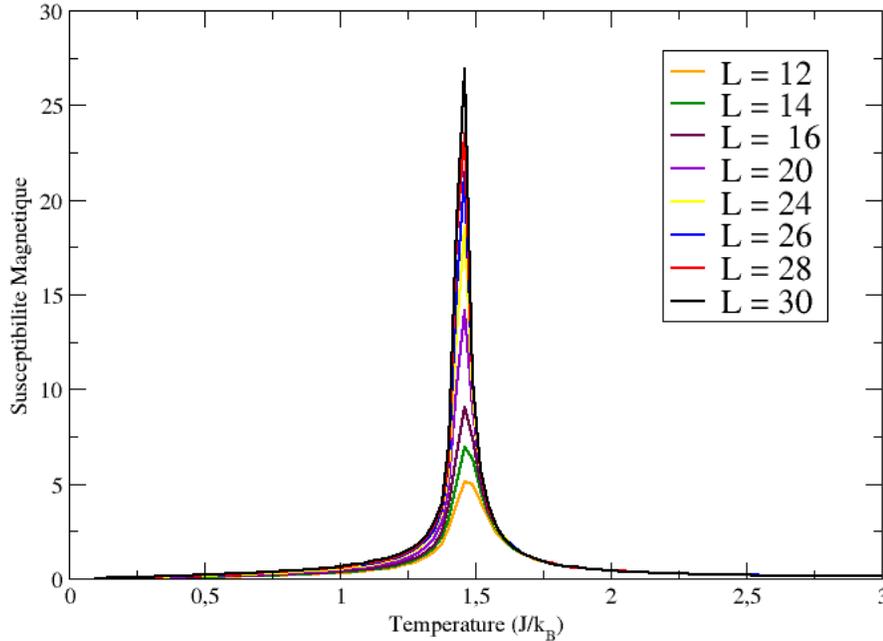


FIGURE 6.4: Susceptibilité magnétique du modèle de Heisenberg $3d$ sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L

ment sous l'effet de la température. Ceci est expliquée par les ondes de spins (voir les sections au début du chapitre présent sur le théorème Mermin Wagner, et les modes de Goldstones) : par une faible énergie on peut changer l'état d'un spin à une distance loin.

Au dessus de ces valeurs de températures la susceptibilité suit un comportement inversement proportionnel à la température ($\chi \propto \frac{1}{T-T_c}$). Ce comportement de la susceptibilité suit le comportement de la susceptibilité de Curie-Weiss, aux hautes températures on a une phase paramagnétique désordonnée.

La susceptibilité magnétique montre un pic plus important avec l'augmentation de L . La variation de ce pic est proportionnelle à $L^{\frac{\alpha}{\nu}}$ (voir relations scaling du groupe de renormalisation). Ce pic correspond à une température de transition (critique) propre à chaque taille du système de spins.

6.4.5 Exposants Critiques

La figure 6.5 montre la variation du cumulants en fonction de la température pour différentes tailles du système (différents L). La température critique correspond à une valeur $T_c = 1.440$.

Le tableau suivant montre les valeurs de l'aimantation à la température critique $T_c \approx 1.440$; ce qui nous a permis de déterminer l'exposant β :

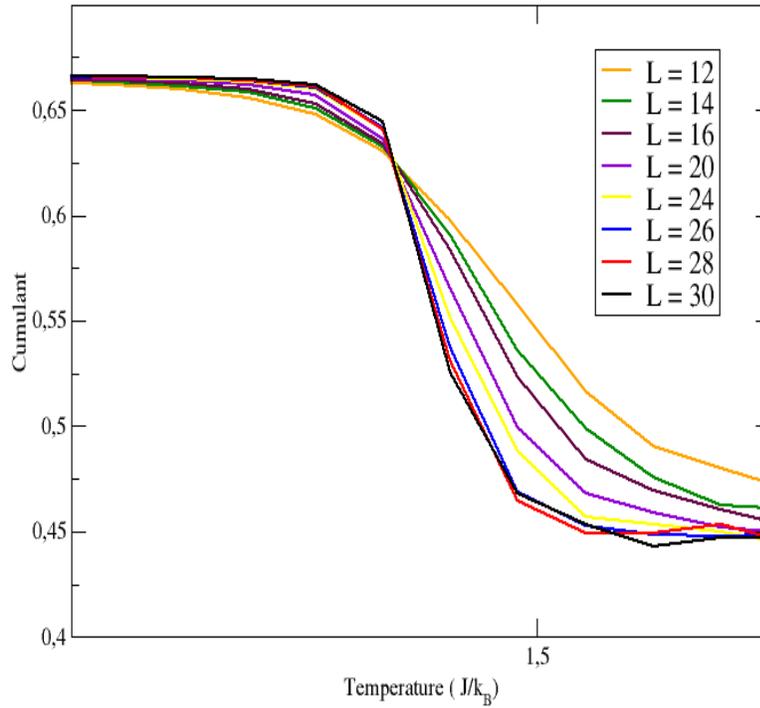


FIGURE 6.5: Cumulant de Binder en fonction de la température du modèle de Heisenberg $3d$ sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L

L	$M(L, T_c)$
30	0.194
20	0.236
10	0.337

En utilisant l'expression de scaling de l'aimantation (définie dans la partie théorique) on retrouve :

$$\frac{\beta}{\nu} = \frac{\ln(0.194/0.337)}{\ln(30/10)} = 0,502$$

pour les deux réseaux : $L = 30$ et $L = 10$.

Le tableau suivant montre la variation du pic de la chaleur spécifique en fonction de la taille du réseau à la température critique.

L	Pic de $C_V(L, T_c)$
30	3.1055
20	2.6719
10	2.3731

En utilisant la relation de scaling du pic de la chaleur spécifique on retrouve :

$$\frac{\alpha}{\nu} = 0.2448$$

. Le tableau suivant montre la variation du pic de la susceptibilité en fonction de la taille du réseau à la température critique.

L	Pic de χ
30	30.8898
20	13.7977
10	3.64057

On trouve alors $\frac{\gamma}{\nu} = 1.9463$. Les résultats des rapports trouvés par nos simulations sont en bon accord avec les résultats des rapports théoriques : $\frac{\gamma}{\nu} = 1,9659$ $\frac{\alpha}{\nu} = 0,1631$, $\frac{\beta}{\nu} = 0,5170$. Si on prend la valeur théorique de $\nu = 0.705$, on retrouve : $\alpha = 0.115$, $\beta = 0.3644$, $\gamma = 1.3721$. Ces exposants critiques sont en très bon accord aux valeurs théoriques (voir tableau 2.1).

Conclusion

Dans ce travail nous avons étudié la transition ferromagnétique paramagnétique dans le modèle d'Ising (2D et 3D), et le modèle de Heisenberg (3D) avec une constante d'échange $J = 1$. Nous avons constaté que l'aimantation à saturation persiste pour un intervalle de température relativement large pour le cas des systèmes de spins d'Ising alors que l'ordre pour le cas de Heisenberg est trop sensible à l'effet de la température. Dans ce cas l'aimantation diminue rapidement avec l'augmentation de la température, et l'ordre ferromagnétique se perturbe au voisinage de $T = 0 J/k_B$. Cette sensibilité à l'effet de la température explique aussi la température de transition de Heisenberg (3D) qui inférieure à celle d'Ising (3D) ($T_{c,Ising} = 1.440 < T_{c,Heisenberg} = 4.499$). Nous avons mesuré le paramètre d'ordre (l'aimantation) et l'énergie des systèmes de spins en fonction de la température et la taille du système ainsi que leurs fluctuations : la susceptibilité magnétique et la chaleur spécifique respectivement. Nous avons mesuré la température critique à l'aide de cumulants de Binder, ce qui nous a permis d'obtenir les exposants critiques. Les rapports α/ν , β/ν , γ/ν sont en très bon accord avec les rapports théoriques. Comme l'exposant critique ν souffre d'une grande erreur, nous avons opté pour utiliser sa valeur théorique afin d'avoir une bonne précision sur les autres exposants critiques. Par cette technique nous avons réussi à estimer les autres exposants critiques : $\alpha, \beta, \gamma, \eta$ avec une bonne précision.

Bibliographie

- [1] Carsten Timm, *Theory of Magnetism : International Max Planck Research School for Dynamical Processes in Atoms, Molecules and Solids* (2001).
- [2] J. M. D. Coey, *Magnetism and Magnetic materials*, Cambridge University Press (2009).
- [3] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics (seventh edition)*, John Wiley & Sons (1995).
- [4] David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Education (2005).
- [5] Stephen Blundell, *Magnetism in Condensed Matter*, Oxford University Press (2001).
- [6] M. E. J. Newman et G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press (1999).
- [7] Hung T. Diep, *Physique de la Matière Condensée*, Dunod (2003).
- [8] Marius Grundmann, *The Physics of Semiconductors : An Introduction Including Devices and Nanophysics*, Springer (2006).
- [9] R. E. Watson, M. Blume, et G. H. Vineyard, *Phys. Rev.* **181**, 811 (1969).
- [10] Hung T. Diep, *Physique Statistique : Cours, Exercices et Problèmes corrigés*, Ellipses (2006).
- [11] Barry McCoy, *Ising Model : Exact Results*, *Scholarpedia* 5(7) :10313, (2010).
- [12] Jacques Kotze, arXiv :0803.0217 [cond-mat.stat-mech]
- [13] Michael P. Marder, *Condensed Matter Physics (second edition)*, John Wiley & Sons (2010)
- [14] Ulli Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
- [15] Elie Belorizky et Wladimir Gorecki, *Introduction à la Mécanique Statistique*, O.P.U. (1993).
- [16] Cédrique Weber, Thèse de Master, EPFL (2003).

- [17] Marius Grundmann, *The Physics of Semiconductors : An Introduction Including Devices and Nanophysics*, Springer (2006).
- [18] R. E. Watson, M. Blume, et G. H. Vineyard, *Phys. Rev.* **181**, 811 (1969).
- [19] Francesca Gulminelli, *Mecanique Statistique des Transitions de Phase*, LPC Caen (2006).
- [20] V. Dupuis et G. Ferlat, *Transitions de Phases 2*, LP350 Etats de la matière (2013).
- [21] N. D. Mermin et H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).