

Table des matières

Introduction Générale	3
------------------------------------	---

Chapitre I

I. 1	Introduction.....	5
I. 2	L'origine du magnétisme dans les matériaux.....	5
I.3	Les principaux états magnétiques de la matière.....	6
I.3.1	Le diamagnétisme.....	8
I.3.2	Le paramagnétisme.....	8
I.3.3	Le ferromagnétisme.....	9
I.3.4	L'antiferromagnétisme.....	10
I.3.5	Le ferrimagnétisme.....	12

Chapitre II

II. 1	Généralités sur les transitions de phase.....	15
II. 2	Classification des transitions de phase.....	19
II. 2. 1	- Classification d' Ehrenfest (1880 - 1933).....	19
II. 2. 2	- Classification de Landau (1908 - 1968).....	21
II. 3	Théorie de Landau des transitions de phase.....	23
II. 3.1	Théorie de Landau des transitions de phase.....	23
II. 3. 2	Comportement de quelques grandeurs physiques.....	25
II. 4	Les phénomènes critiques.....	29
II. 4. 1	- Définition d'un exposant critique.....	29
II. 4. 2	Exemples de quelques exposants critique.....	30

Chapitre III

III.	Champ moyen application de spin $-3/2$	31
III. 1	- Introduction	32
III. 2	La méthode du champ moyen.....	32
III. 3	- Modèles à spin $-3/2$	36
III. 3.1	Introduction	36
III. 3. 2	Modèle de Sivardièrre et Blume	37

III . 3 . 2.1 Modélisation	37
III . 3 . 2 . 2 Diagrammes de phase pour $J>0$, $K>0$ et $h=0$	39

Chapitre IV

IV . Modèle d'ashkin-Teller.....	42
IV -1 INTRODUCTION	43
IV-2 Autres phases dans le modèle d'ashkin-teller	46
IV - 3 Etude du modèle d'ashkin-teller à spin $-3/2$ par le champ moyen.....	54
IV - 4 Programme fortran.....	57

Introduction Générale

La mécanique statistique est l'étude d'un ensemble de systèmes formés d'un grand nombre de particules, tels que les molécules dans un gaz, les atomes dans un cristal, les photons dans un rayon laser, les voitures dans une autoroute ...etc. Le but principal de cette science est la compréhension du comportement de ces systèmes comme un tout, en tenant compte du comportement de leurs constituants, de leurs degrés de libertés et de leurs interactions mutuelles.

L'étude des transitions de phases qui apparaissent dans un système, a reçu une attention particulière des scientifiques durant des années. Un intérêt particulier a été consacré sur les phénomènes associés au point critique qui se manifeste dans les transitions liquide-vapeur et dans les systèmes ferromagnétiques (antiferromagnétiques) au point de Curie (Néel).

Expérimentalement, une transition de phase est liée à la divergence des fonctions thermodynamiques comme la chaleur spécifique ou la susceptibilité. Ces divergences sont généralement gouvernées par des lois en puissances avec des exposants.

Ce mémoire comporte quatre parties :

Le premier chapitre donne un aperçu générale sur les systèmes magnétiques dans les solides.

Dans le deuxième chapitre, on décrira les différents types de transitions de phases et leur classification.

Dans le troisième chapitre on introduira la méthode du champ moyen et son application aux terres rares, DyVO_4 , et l'explication de son diagramme de phase par le modèle de Blume et Sivardière à spin- $3/2$.

Dans le quatrième chapitre, on introduira le modèle d'Ashkin-Teller et ses différentes variantes puis on étudiera le modèle d'Ashkin-Teller à spin- $3/2$. On calculera les différentes aimantations associées à ce modèle et on écrira un programme Fortran qui va nous permettre de résoudre ces équations self-consistantes.

Nous terminons ce mémoire par une conclusion générale et les perspectives.

Chapitre I

Généralités sur les systèmes magnétiques

1.1 Introduction.

Les phénomènes liés au magnétisme présentent un intérêt croissant à cause de leur importance et de leur implication dans plusieurs domaines technologiques tels que les domaines de la spintronique et des télécommunications . Sur le plan théorique, les systèmes magnétiques présentent l'intérêt d'être décrits par des modèles théoriques qu'on peut résoudre exactement, permettant ainsi une comparaison directe avec l'expérience.

En mécanique statistique, par exemple, on trouve que les systèmes ferromagnétique sont décrits par le modèle d'Ising et le modèle de Potts . L'application d'un champ magnétique sur ces systèmes induit un ordre magnétique et modifie leurs propriétés magnétiques. Ces dernières sont la conséquence des interactions entre les différents constituants de ces systèmes. Afin de comprendre les propriétés des systèmes magnétiques, nous allons d'abord présenter l'origine du magnétisme dans la matière et les différents types de systèmes magnétiques. Ensuite, nous allons présenter quelques généralités sur les phénomènes de transition de phase et les phénomènes critiques.

I.2 L'origine du magnétisme dans les matériaux

Avant de comprendre les phénomènes liés au magnétisme, il est impératif de connaître l'origine du magnétisme. Le magnétisme dans la matière est due aux propriétés des électrons telles que décrites par la mécanique quantique. Les électrons étant des particules chargées, leur mouvement engendre un moment magnétique permanent dans la matière. Ce moment magnétique résulte de deux contributions : une contribution orbitale associée au mouvement de l'électron autour de son orbite (magnétisme orbital), et une contribution de spin associée au moment intrinsèque de spin de l'électron (magnétisme de spin) .

Il existe aussi un moment magnétique nucléaire, mais comme le proton est environ 2000 fois plus lourd que l'électron, le moment magnétique nucléaire devient négligeable par rapport au moment magnétique porté par les électrons .

L'existence des interactions entre les électrons se trouve à l'origine de l'ordre magnétique dans les solides. En effet, une structure magnétique spontanée est imposée par ces interactions : d'une part, les interactions d'échange qui s'efforcent d'orienter les moments, soit d'une façon parallèle ou antiparallèle ; d'autre part, les interactions d'anisotropie qui définissent, sur chaque site, une ou plusieurs orientations privilégiées pour les moments magnétiques. La structure magnétique d'un matériau dépend aussi de son environnement. Ainsi, selon la configuration des moments, le matériau peut se situer dans un état avec un comportement magnétique donné. Nous allons maintenant faire un survol de ces états ou comportements magnétiques.

I.3 Les principaux états magnétiques de la matière.

Chaque matériau est constitué d'atomes contenant des électrons considérés comme des aimants élémentaires. Lorsqu'on applique un champ magnétique H à ce matériau, le champ agit sur les électrons, donc sur le moment magnétique du matériau. Suivant le type d'interactions entre les électrons, le comportement macroscopique global du matériau sous l'effet du champ ou de la température est complètement différent. D'où l'existence des différents types de magnétisme.

En effet, pour des matériaux dont les atomes ne comportent pas de moments magnétiques, le champ magnétique appliqué modifie le mouvement orbital des électrons : le comportement induit est alors qualifié de **diamagnétique**. Ce qui est contraire pour les matériaux comportant des atomes magnétiques où plusieurs comportements apparaissent. Lorsque les moments magnétiques n'interagissent pas entre eux, le comportement observé est de type paramagnétique, dans le cas contraire, il y a apparition des comportements de types ferromagnétique, antiferromagnétique ou ferrimagnétique. La théorie des interactions d'échange, proposée par Heisenberg en 1928, constitue donc le fondement théorique permettant d'expliquer ces comportements . Un système est dit **ferromagnétique** lorsque le couplage entre moments magnétiques favorisent un

alignement de ceux-ci. L'aimantation spontanée d'un système ferromagnétique est le résultat d'un alignement des moments magnétiques des atomes individuels .

Pour d'autres matériaux, la configuration la plus stable correspond à des moments antiparallèles. Dans ce cas, il n'y a pas d'aimantation car chaque moment élémentaire est compensé par son voisin. On parle alors de système antiferromagnétique. Le comportement **ferrimagnétique** est observé dans les matériaux produisant deux réseaux de moments magnétiques différents et orientés de façon opposée. Pour les matériaux diamagnétiques et **paramagnétiques**, les effets magnétiques sont faibles. Par contre, les systèmes ferromagnétiques modifient fortement la distribution du champ dans lequel ils sont plongés.

La grandeur qui résume les propriétés magnétiques des matériaux et leur classification est la susceptibilité magnétique χ_m . définie par :

$$M = \chi_m \cdot H \quad (1.1)$$

Où H désigne le champ magnétique appliqué au système . Le matériau possède une induction magnétique B reliée à son aimantation M par la relation suivante:

$$B = \mu_0 (H + M) \quad (1.2)$$

Où μ_0 représente la perméabilité magnétique du vide ($\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{H}{m}$).

Ainsi, la perméabilité magnétique relative du matériau est donnée par la relation:

$$\mu_r = 1 + \chi_m \quad (1.3)$$

Dans la suite, nous décrivons maintenant les états magnétiques de la matière.

I.3.1 Le diamagnétisme.

Le diamagnétisme est le comportement de certains matériaux qui ne s'aimantent qu'en présence d'un champ magnétique extérieur et dont l'aimantation induite par ce champ est très faible et opposée à ce dernier. La susceptibilité χ est une constante négative indépendante du champ et de la température. En général, tous les corps sont diamagnétiques mais le phénomène est réversible avec la disparition du champ magnétique extérieur. Dans les matériaux diamagnétiques, l'aimantation est nulle si le champ imposée est nulle.

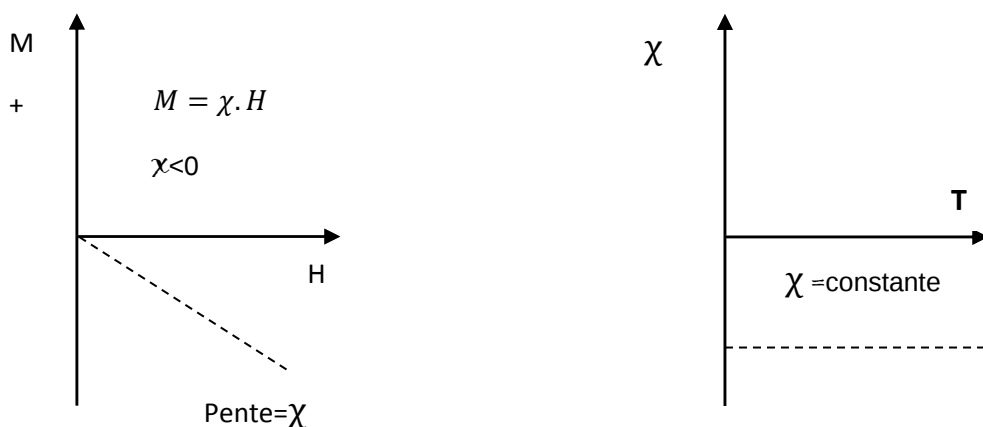


Figure 1.1 - Comportement diamagnétique des matériaux

I.3.2 Le paramagnétisme.

Dans les matériaux paramagnétiques, les moments magnétiques sont pratiquement sans interaction et s'orientent de façon désordonnée comme

représenté sur la figure 1.2. L'aimantation résultante de ces substances est alors nulle. Lorsqu'un champ magnétique est appliqué au matériau, la valeur moyenne de l'orientation des moments est modifiée et une aimantation induite parallèle au champ apparaît. Cette aimantation est d'autant plus faible que la température est élevée (agitation thermique importante). La susceptibilité paramagnétique χ est faible et positive mais supérieure, en valeur absolue, à celle observée pour un matériau diamagnétique.

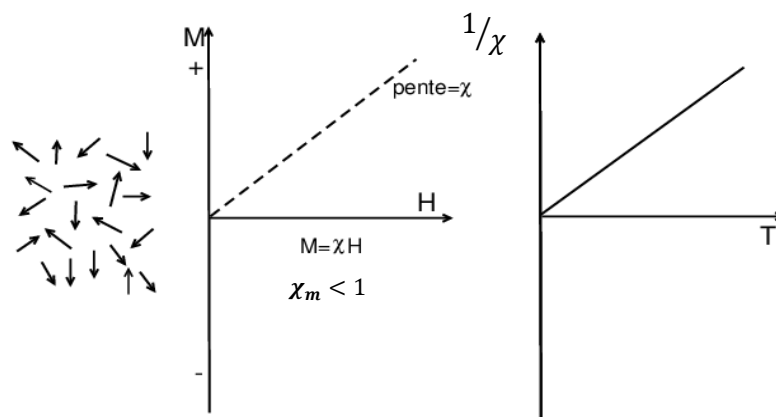


Figure 1.2 Comportement paramagnétique des matériaux

I.3.3 Le ferromagnétisme

Dans les matériaux ferromagnétiques l'interaction d'échange est positive et favorise un alignement parallèle des moments magnétiques ou des spins voisins. L'agitation thermique perturbe l'alignement parallèle et au dessus d'une température critique dite température de Curie (température de transition magnétique), le matériau passe de son état ordonné ferromagnétique à l'état désordonné paramagnétique, c'est la loi de Curie-Weiss. Les matériaux magnétiques sont constitués de petits domaines à l'intérieur desquels les atomes présentent une aimantation parallèle. En présence d'un champ, ces domaines tendent à s'orienter dans la direction du

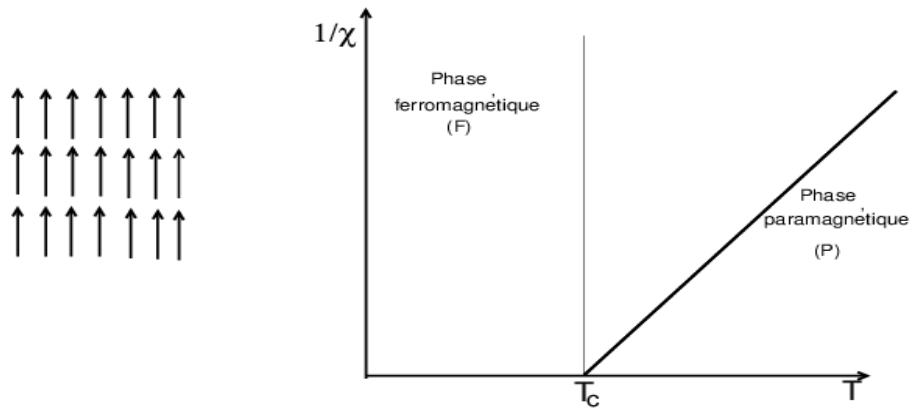


Figure 1.3 Comportement d'un matériau ferromagnétique

champ et leurs parois se déplacent pour renforcer le champ appliqué. La susceptibilité χ est élevée et positive.

Les matériaux ferromagnétiques sont utilisés pour fabriquer des aimants permanents. Ils sont également utilisés pour stocker des informations dans nos disques durs d'ordinateurs, car, non seulement ils peuvent être aimantés très fortement mais encore ils peuvent le rester grâce aux phénomènes d'hystérésis magnétiques.

I.3.4 L'antiferromagnétisme

Les matériaux antiferromagnétiques sont constitués de deux réseaux A et B couplés antiparallèlement. Les moments de ces réseaux sont égaux en valeurs absolues et se compensent pour donner une aimantation macroscopique nulle. On a $|M_A| = |M_B| \neq 0$ et $M_A = -M_B$ pour $T < T_N$ tel que

$$M = M_A + M_B = 0 \quad (1.4)$$

Les matériaux antiferromagnétiques ont également une rémanence nulle, pas d'hystérésis mais une susceptibilité faible et positive qui varie d'une manière particulière avec la température, comme on le voit sur la figure 1.4 . La clé de l'antiferromagnétisme est le comportement de la susceptibilité au dessous de la température critique appelée température de Néel (T_N) à partir de laquelle il suit loi de Curie-Weiss :

$$\chi = \frac{C}{T_N + \theta} \quad (1.5)$$

où C est la constante de Curie, T_N la température de Néel et θ la température de Curie paramagnétique.

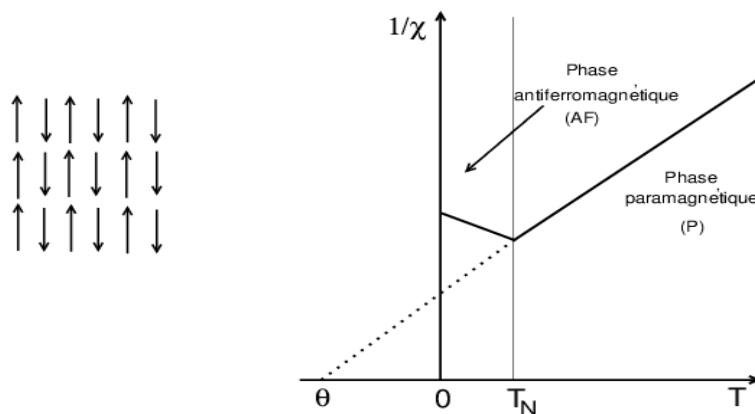


Figure 1.4 Comportement d'un matériau antiferromagnétique

L'antiferromagnétisme se caractérise par une disparition des propriétés magnétiques du matériau en dessous de la température de Néel (T_N).

I.3.5 Le ferrimagnétisme

Le ferrimagnétisme caractérise un matériau de type antiferromagnétique avec la différence que les deux sous réseaux A et B n'ont pas la même aimantation. Les moments magnétiques des deux sous réseaux ne sont pas égaux [43] c'est-à-dire que $M_A \neq M_B$. L'interaction d'échange est négative. Il n'y a alors plus de compensation exacte de l'aimantation des deux sous réseaux et par conséquent une aimantation spontanée apparaît au dessus de la température d'ordre T_c .

On a pour $T < T_c$:

$$M = M_A + M_B \neq 0 \quad (1.6)$$

Les propriétés macroscopiques d'un ferrimagnétique dans cette gamme de température peuvent présenter une ressemblance avec celle d'un ferromagnétique. Les matériaux ferrimagnétiques présentent de nombreuses caractéristiques des

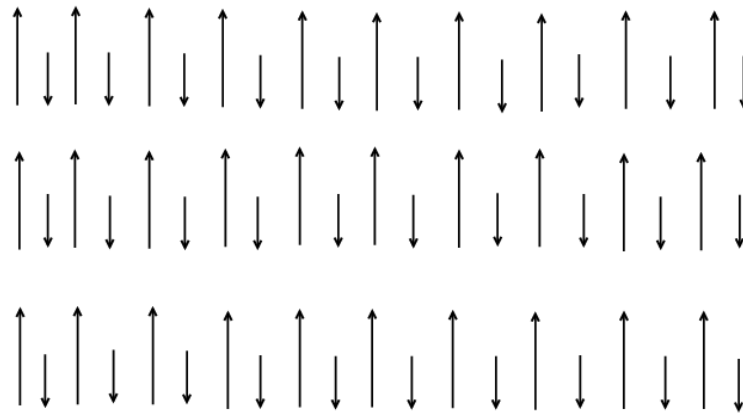


FIGURE 1.5 Comportement d'un matériau ferrimagnétique.

matériaux ferromagnétiques : aimantation spontanée, température d'ordre, hystérésis et rémanence. Toutefois, ferro et ferrimagnétiques sont très différents au niveau de l'ordre magnétique.

On peut résumer les différents comportements des matériaux magnétiques comme suit :

(a) : Pour les matériaux paramagnétiques, il n'y a aucun ordre magnétique, donc pas de moment magnétique global.

(b) : Pour une interaction de type ferromagnétique, au sein d'un matériau à une température inférieure à la température de Curie, il y a orientation parallèle des spins, donc l'existence d'une aimantation spontanée.

(c) : Pour une interaction de type antiferromagnétique au sein d'un matériau à température inférieure à la température de Néel, il y a orientation antiparallèle des spins avec compensation de spins, donc pas d'aimantation.

(d) : Pour une interaction de type ferrimagnétique au sein d'un composé à une température inférieure à la température de Curie, il y a orientation antiparallèle des spins sans compensation de spins.

Ces systèmes magnétiques peuvent passer d'un état magnétique à un autre par des influences extérieures en subissant le phénomène de transition de phase décrit ci dessous.

Chapitre II

Généralités sur les transitions de phase

II. 1 . Généralités sur les transitions de phase

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

- _ un réarrangement structural du réseau cristallin.
- _ le changement de comportement magnétique : de ferromagnétique à paramagnétique au point de Curie.

Le phénomène de transition de phase occupe une place importante en Physique de la matière condensée, pour diverses raisons : sa fréquence et sa diversité, son caractère spectaculaire et l'intérêt des problèmes conceptuels qui s'y rattachent. Commençons par prendre un exemple bien connu, l'eau et ses diverses phases : solide (glace), liquide, gaz (vapeur), qu'on peut distinguer dans l'expérience quotidienne. Les transitions d'une phase à l'autre, qu'un changement de température permet d'observer, sont très familières :

- _ gel (dégel) : transition solide-liquide
- _ ébullition (condensation) : transition liquide-gaz
- _ sublimation : transition solide-gaz.

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

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

Ce qui frappe tout d'abord, c'est la très grande diversité de ce domaine des transitions de phase : diversité des systèmes, des interactions mises en jeu, des paramètres physiques pertinents pour induire la transition et grandeurs thermodynamiques affectées, des ordres de grandeur, etc. Il faut, bien sûr, souligner qu'en dépit de cette richesse, ce champ d'étude présente également une

très grande unité : unité des concepts mis en jeu, des méthodes d'étude utilisées et surtout universalité d'un grand nombre de propriétés, notamment des propriétés critiques. Dans ce domaine d'une si grande diversité et d'une si grande complexité, il est tout à fait remarquable que certains résultats physiques aient une portée absolument générale. Comprendre ce caractère universel représente un défi particulièrement intéressant et important à relever.

Pour un système donné, on fait varier un certain nombre de paramètres (température, pression, champs extérieurs ... etc) pour mettre en évidence les diverses phases du système et en explorer les domaines d'existence, et on consigne les résultats sur une carte : on détermine un diagramme de phase.

Pour fixer quelques idées, considérons trois diagrammes de phases particuliers : La figure (II-1) est le diagramme de phase (pression, température) montrant les domaines d'existence de trois phases (solide, liquide, gaz). On note deux points particuliers : le point triple T_t , à la jonction des trois domaines : le point critique $(p_c; T_c)$, point d'arrêt à la frontière entre domaines liquides et gaz. En tournant autour du point critique, on peut passer continûment de la phase liquide à la phase gazeuse sans transition discontinue.

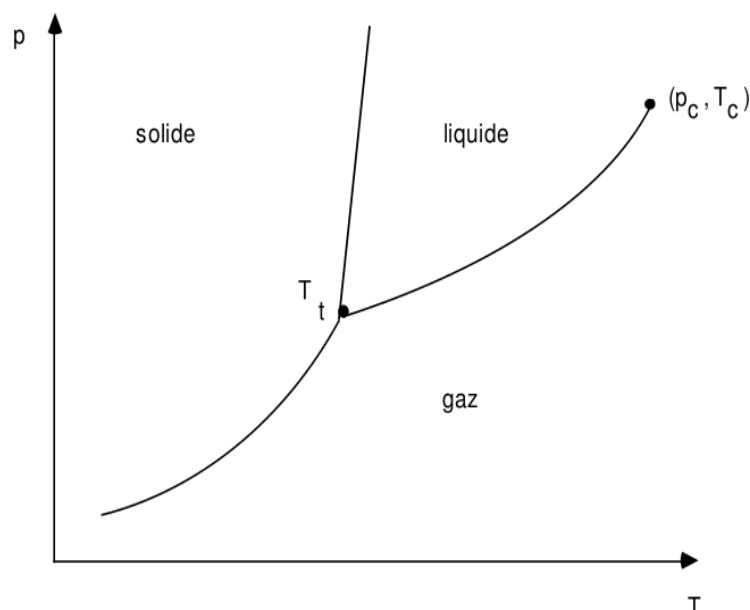


Figure II-1 - Le diagramme de phase de l'eau, avec ses trois phases stables : solide, liquide, gaz dans le plan (pression-température). La ligne de transition liquide-gaz présente un point d'arrêt.

- Le deuxième diagramme de la figure (II-2) est le diagramme de phase (champ magnétique, température) d'un corps qui présente une transition ferromagnétique. Ce diagramme présente une frontière sur l'axe $H = 0$ avec un point d'arrêt, qu'on appelle aussi point critique. En champ nul, à haute température on observe une phase désordonnée, dite paramagnétique sans aimantation. Lorsque $T = T_c$, au point critique, une transition se produit, et pour $T < T_c$, on observe une phase ordonnée, dite ferromagnétique, présentant une aimantation spontanée. Il y a une analogie avec la transition liquide-gaz, H et p jouant les rôles similaires. Dans le diagramme de la figure (II-3) si on traverse la frontière ($H = 0$; $0 < T < T_c$), on observe un saut de l'aimantation. Ce saut diminue quand le point de franchissement de la frontière se rapproche du point critique. Au point critique, il n'y a plus de saut de l'aimantation.

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

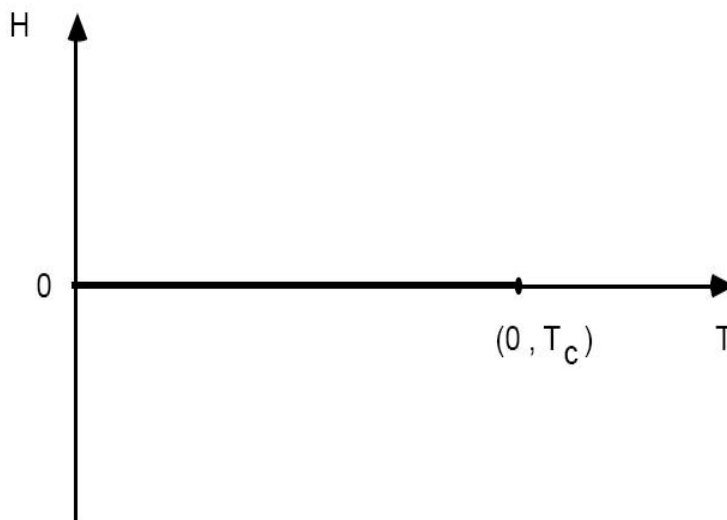


Figure II-2 _ Diagramme de phase d'un ferromagnétique dans le plan (champ magnétique - température). Il existe une ligne de discontinuité, sur l'axe $H = 0$, pour une température inférieure à la température critique T_c

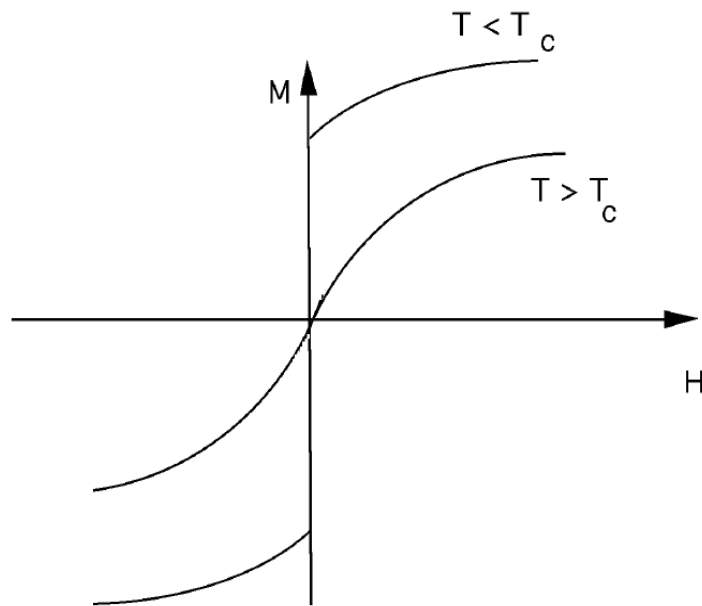


Figure II-3 _ Courbe d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique à différentes températures. Pour $T < T_c$, l'aimantation présente une discontinuité quand le champ magnétique change de signe. Cette discontinuité n'existe plus pour $T > T_c$.

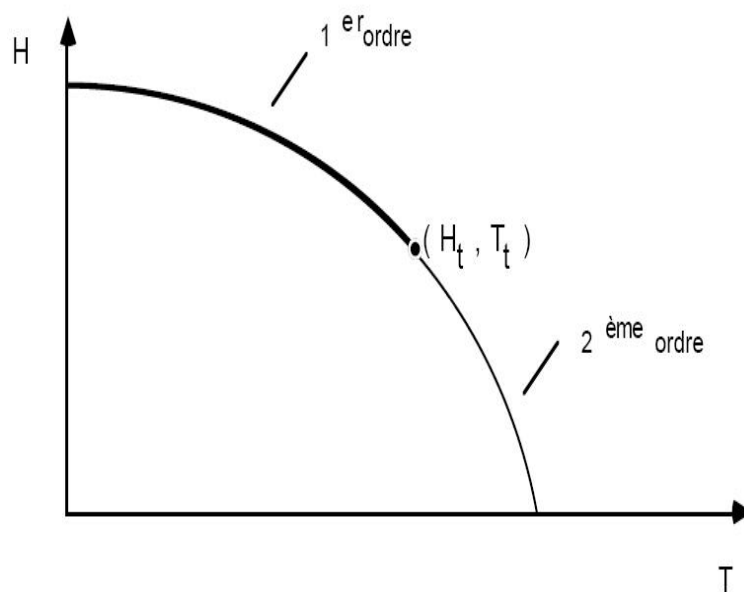


Figure II-4 _ Exemple de diagramme de phase montrant un point tricritique. Dans le cas présenté ici, il s'agit d'un matériau antiferromagnétique. On suppose, dans le cas présent, que l'ordre de la transition change sous l'effet d'un champ magnétique uniforme

II.2 Classification des transitions de phase

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

II . 2 .1 - Classification d' Ehrenfest (1880 - 1933)

Considérant le potentiel thermodynamique $G = U - TS + pV$, comme on l'a dit plus haut, Ehrenfest propasa d'appeler transition du premier ordre les transitions s'accompagnant de discontinuités dans les grandeurs physiques comme l'entropie, qui sont liées à des dérivées premières du potentiel thermodynamique, et transition du second ordre les transitions s'accompagnant de discontinuités dans les grandeurs physiques, comme la chaleur spécifique, qui sont reliées à des dérivées secondes du potentiel thermodynamique, les dérivées premières restant continues.

Plus généralement, si toutes les dérivées d'ordre $(n - 1)$ de G sont continues et que la dérivée d'ordre n est discontinue, la transition sera d'ordre n . Pour illustrer tout cela, considérons dans le plan des variables intensives $(p; T)$ de la figure (II - 5), soit une ligne de transition séparant deux phases I et II. En tout point de la courbe, la condition pour que l'équilibre soit assuré est donnée par :

$$G_I(p; T) = G_{II}(p; T) \quad (1.11)$$

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

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

$$dG_I = -S_I dT + V_I dp \quad (1.12)$$

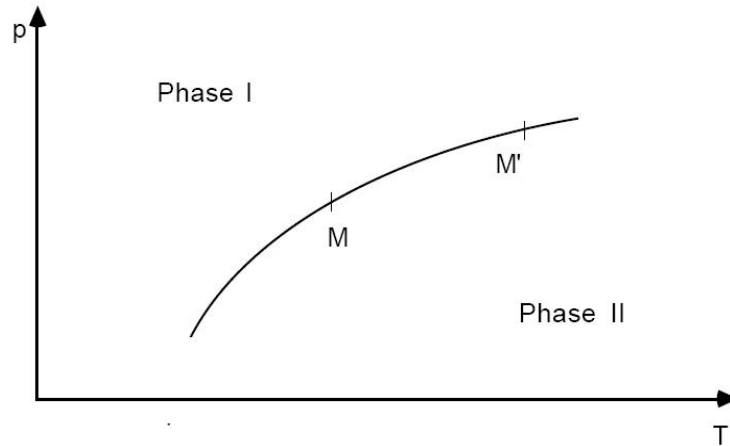


Figure II-5 _ Exemple de schéma illustrant la classification des transitions de phase selon Ehrenfest.

$$dG_{II} = -S_{II} dT + V_{II} dp \quad (1.13)$$

où les quantités V_j et S_j ($j = I; II$) sont les volumes molaires et entropies des deux phases.

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

$$\left(\frac{dp}{dT} \right)_{\text{courbe}} = \frac{S_{II} - S_I}{V_{II} - V_I} \quad (1.14)$$

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

C'est la relation de Clapeyron. Nous sommes ici dans le cas d'un changement de phase du 1^{er} ordre, puisque que les dérivées premières de G (ici S et V) sont discontinues. Si, au contraire elles sont continues, on aura $dS_I = dS_{II}$:

$$dS_I = \frac{1}{T} C_{pI} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T_I} dp \quad (1.15)$$

$$dS_{II} = \frac{1}{T} C_{pII} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T_{II}} dp \quad (1.16)$$

D'ou une autre relation similaire, mais pour une transition du 2nd ordre :

$$\begin{aligned} \left(\frac{dP}{dT}\right)_{\text{courbe}} &= \frac{1}{T} \frac{\Delta C_p}{\Delta\left(\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T\right)} \\ &= \frac{1}{TV} \frac{\Delta C_p}{\Delta \alpha} \end{aligned} \quad (1.17)$$

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

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

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{courbe}} = \frac{\Delta \alpha}{\Delta \chi_T} \quad (1.18)$$

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

À partir des équations (1.18 et 1.19), on obtient :

$$TV(\Delta \alpha)^2 = \Delta C_p \Delta \chi_T \quad (1.19)$$

Cette relation a bien été observée pour la transition Hélium normal – Hélium superfluide dans un certain domaine de température. En fait, Ehrenfest pensait à des discontinuités des dérivées du potentiel thermodynamique du type saut, par analogie avec la chaleur latente de la transition liquide – gaz $\Delta S = \frac{L}{T}$; mais, en fait, dans bien des cas, la chaleur spécifique diverge à la transition, quand celle-ci est du second ordre. Notons que, selon cette définition de l'ordre de la transition, une transition peut être d'ordre n , sans limitation sur la valeur de n .

II.2 . 2 - Classification de Landau (1908 - 1968)

En fait, si la classification d'Ehrenfest des transitions de phases a le grand mérite de mettre en évidence les similitudes entre les phénomènes aussi différents que le magnétisme, la ferroélectricité, la supraconductivité et la transition liquide/gaz au point critique, elle se limite cependant à une vision thermodynamique des

phénomènes . Si celle-ci est incontestablement importante, elle n'est toutefois pas suffisante. Un physicien comme L. D. Landau a fait remarquer, en 1937, qu'une transition de phase sans chaleur latente s'accompagnait d'un changement de symétrie (à l'exception de la transition liquide/gaz au point critique qui est spécifique). Ainsi, dans le cas d'un matériau magnétique celui-ci n'a pas de moment magnétique permanent au-dessus de sa température de Curie (état paramagnétique), au-dessous de cette température en revanche, il possède une aimantation permanente orientée dans une certaine direction (état ferromagnétique). On dit que la symétrie a été brisée à la transition : en dessous de la température de Curie, le matériau n'est invariant que par la rotation autour d'un axe orienté dans la direction de l'aimantation. Les questions de symétrie ont donc une grande importance dans l'étude des phénomènes de transitions de phases. Landau a associé à ces considérations sur les changements ou les brisures de symétrie accompagnant un phénomène de transition de phase, la notion de paramètre d'ordre. Le paramètre d'ordre est, de façon générale, une grandeur physique de caractère extensif qui est nulle dans la phase la plus symétrique (ou la plus désordonnée), et non nulle dans la phase la moins symétrique (ou ordonnée). Cette notion de paramètre d'ordre a une signification qualitative évidente : lors d'un abaissement de la température, on accroît l'ordre du système.

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

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

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

-Les transitions sans paramètre d'ordre pour lesquelles les groupes de symétrie des deux phases sont tels qu'aucun n'est strictement inclus dans l'autre : elles sont toujours du premier ordre (avec chaleur latente) au sens d'Ehrenfest.

- Les transitions pour lesquelles on peut définir un paramètre d'ordre, et qui sont telles que le groupe de symétrie de la phase la moins symétrique est un sous-groupe du groupe de symétrie de la phase la plus symétrique. Si le paramètre est discontinu à la transition, celle-ci est du premier ordre au sens d'Ehrenfest ; si celui-ci est continu à la transition, celle-ci est du second ordre (sans chaleur latente).

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

II.3. Théorie de Landau des transitions de phase

II . 3.1 Théorie de Landau des transitions de phase

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

Soit T_c la température de transition, on doit avoir :

$$m \equiv 0 \text{ si } T > T_c \text{ et } m \neq 0 \text{ si } T < T_c$$

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

$$F(T,m) = F_0(T) + A_0(T)m + A(T)m^2 + B(T)m^3 + C(T)m^4 + \dots \quad (1.20)$$

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

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

En revanche, pour $T < T_c$, l'énergie libre $F(T, m)$ est minimale pour une valeur de $m \neq 0$ et $A(T)$ doit être négatif. $A(T)$ représente la concavité en $m = 0$ de l'énergie libre $F(T, m)$. La concavité est positive pour $T > T_c$ et négative pour $T < T_c$.

Au point de transition, cette concavité est nulle, et par conséquent, $A(T_c) = 0$. La forme la plus simple de la fonction $A(T)$ qui satisfait à toutes ces conditions est $A(T) = a(T - T_c)$ où la constante a est positive. C'est naturellement cette expression qui avait été initialement retenue par Landau.

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

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

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

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

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

$$F(T, m) = F_0(T) + a(T - T_c)m^2 + cm^4 \quad (1.21)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial m} &= (2a(T - T_c)m + 4cm^3) \\ &= 0 \end{aligned}$$

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

Ces résultats apparaissent clairement sur la figure (II -6). On constate que pour $T < T_c$, la solution $m = 0$ est à rejeter, car elle correspond à un minimum de $F(T, m)$, c'est-à-dire un état d'équilibre instable.

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

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

II . 3 . 2 Comportement de quelques grandeurs physiques

Maintenant, nous allons étudier le comportement de la chaleur spécifique et de la susceptibilité au voisinage du point de transition. Par définition, la chaleur spécifique est donnée par la relation : $C_p = T \frac{dS}{dT}$ où $S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - am^2$

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

$$C_p = -T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \big|_{T=T_c}$$

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

$$C_p = -T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \big|_{T=T_c} + a^2 \frac{T_c}{2c}$$

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

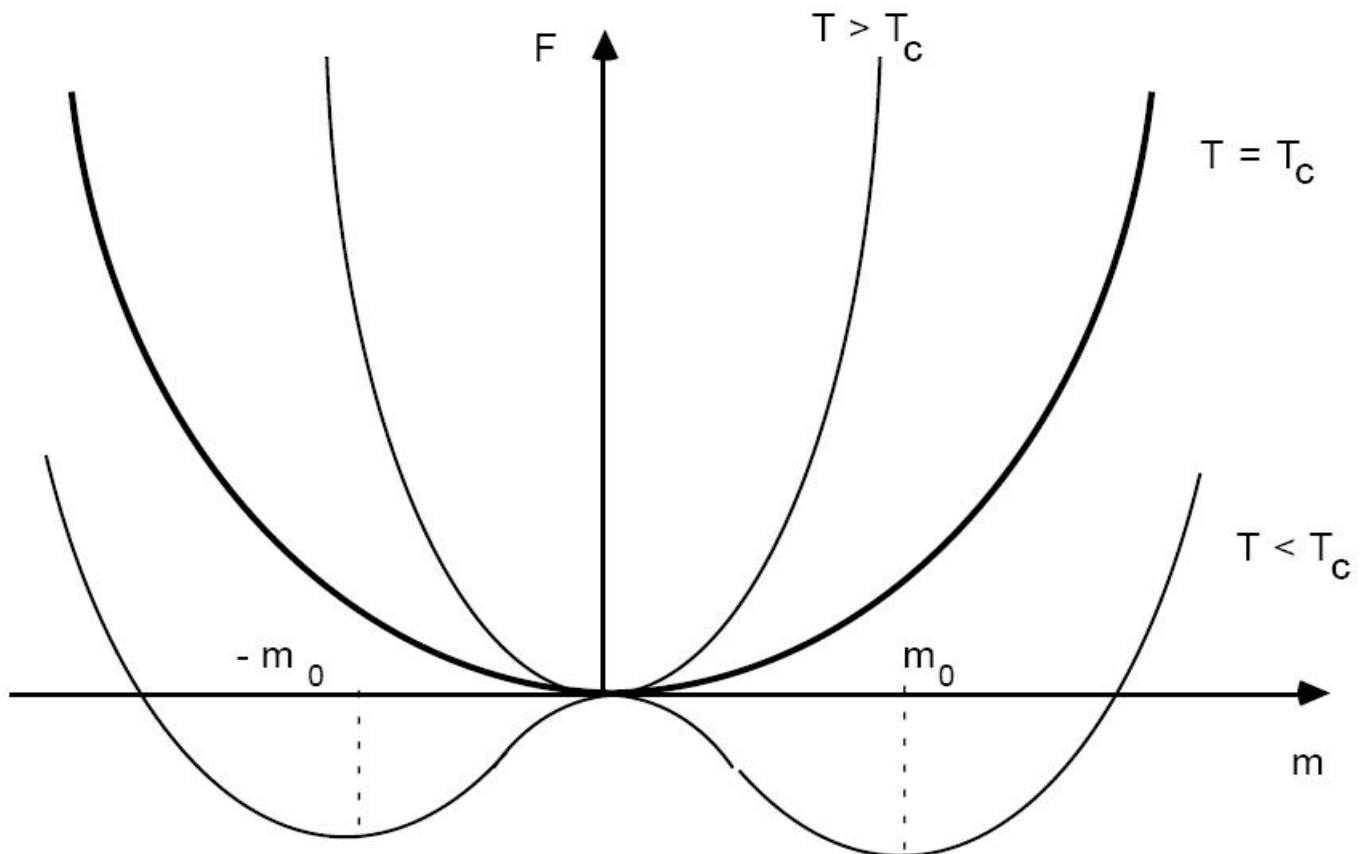


Figure II -6 _ Variation de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre m .

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

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

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

$$2a(T - T_c)\chi + 12cm^2\chi - 1 = 0$$

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

$$\chi = \frac{1}{2a(T - T_c)}$$

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

$$\chi = \frac{1}{4a(T_c - T)}$$

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

La théorie de Landau présente toutefois beaucoup d'intérêts, car les prédictions auxquelles elle conduit sont qualitativement bien vérifiées si on s'écarte suffisamment du point de transition, c'est à dire en fait en dehors de la zone où les fluctuations du paramètre d'ordre sont importantes. Si au point de transition, le paramètre d'ordre est discontinu, la transition est du premier ordre. Dans la théorie que nous venons d'exposer, on montre qu'il peut en être ainsi dans les deux cas suivants :

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

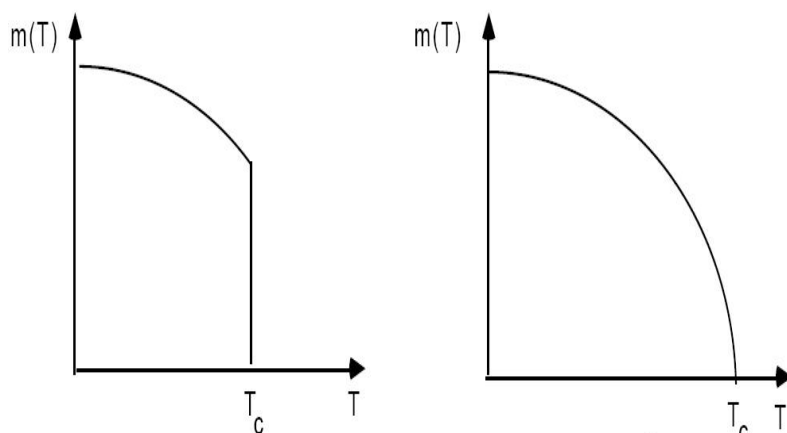


Figure II-7 - Comportement du paramètre d'ordre m à la transition du premier et du second ordre.

II .4 Les phénomènes critiques

On appelle phénomènes critiques, les phénomènes qui se manifestent au voisinage immédiat d'un point de transition du second ordre. Ces dernières années de très nombreux travaux leur ont été consacrés. Ces travaux, tant théoriques qu'expérimentaux, ont mis l'accent sur les insuffisances du modèle de Landau et se sont efforcés de déterminer les lois qui gouvernent l'approche d'un point de transition. Bien que la théorie des phénomènes critiques ne soit pas encore dans un état tout à fait satisfaisant, les résultats obtenus sont déjà importants.

II . 4 . 1 - Définition d'un exposant critique

Un exposant critique est un nombre qui caractérise le comportement d'une grandeur physique au voisinage d'un point de transition du deuxième ordre[37, 38]. Considérons une fonction réelle non-négative f de la variable réelle x définie dans l'intervalle $]0; x_0]$. Si, lorsque x tend vers 0 par valeurs positives, la limite

$$\lambda = \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{\log f(x)}{\log x}$$

existe, on dit que le nombre λ est un exposant critique et on note $f(x) \sim x^\lambda$

Un exposant positif caractérise une fonction qui tend vers zéro tandis qu'un exposant négatif caractérise une fonction qui tend vers l'infini. Les fonctions $|\log x|$, $|\log x|^{-1}$ et $1 + x^{3/2}$, par exemple, ont toutes trois un exposant critique nul. Cependant la première tend vers l'infini, la seconde vers zéro et la troisième vers 1. Lorsqu'une fonction f tend vers une constante non nulle, on peut préciser son comportement à l'aide d'un nouveau exposant λ_s défini de la manière suivante : si la dérivée k^{iem} de la fonction f est la première dérivée qui diverge lorsque x tend vers zéro par valeurs positives, on pose :

$$\lambda = k + \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{|\log f^{(k)}(x)|}{\log x}$$

La notion d'exposant critique étant précisée du point de vue mathématique, nous sommes en mesure de définir les exposants critiques des diverses grandeurs singulières au voisinage d'un point de transition du deuxième ordre.

II.4.2 Exemples de quelques exposants critiques

Des résultats expérimentaux très précis qui n'ont pu être obtenus que ces dernières années, ont révélé le fréquent désaccord au voisinage immédiat du point de transition entre la théorie de Landau et les résultats expérimentaux. En réalité, la théorie de Landau est surtout une analyse de rupture de symétrie qui peut s'opérer lors d'une transition de phase. Si on utilise l'hypothèse assez simple, que $A(T)$ peut s'écrire sous la forme $A(T) = a(T - T_c)$, on trouve un certain nombre de valeurs d'exposants associés à diverses grandeurs physiques. Par exemple, β l'exposant du paramètre d'ordre (défini par la relation $m \sim (T - T_c)^\beta$ prend alors la valeur $1/2$, ce qui n'est pas obtenu expérimentalement au voisinage de T_c .

Par exemple, de nombreuses substances magnétiques ont, au voisinage de la température T_c , une chaleur spécifique qui diverge comme $\log|T_c - T|$, une susceptibilité magnétique qui se comporte comme $|T_c - T|^{4/3}$ et une aimantation qui s'annule comme $|T_c - T|^{1/3}$.

Afin d'étudier le comportement de ces grandeurs physiques singulières au voisinage immédiat d'un point de transition du deuxième ordre, on a pris l'habitude de les représenter par une puissance de $|T_c - T|$.

Chaque grandeur est ainsi caractérisée par un exposant appelé exposant critique :

$$\Delta C_p \sim |T_c - T|^{-\alpha}.$$

$$\chi \sim |T_c - T|^{-\gamma}.$$

$$m \sim |T_c - T|^\beta$$

où ΔC_p est le saut de chaleur spécifique lorsqu'on passe de la phase de haute température à la phase de basse température.

Chapitre III

Champ moyen application de spin - 3/2

III . 1 – Introduction :

Les modèles de spins ont connu un essor considérable, ils nous ont permis une meilleure compréhension des transitions de phase dans les fluides et les systèmes magnétique. Introduits pour la première fois par Ising ,en 1929, pour étudier les transitions magnétiques, la solution exacte du modèle d'Ising n'a été trouvée qu'en 1944 Par Onsager pour un réseau bidimensionnel .L'absence d'un formalisme mathématique rigoureux pour résoudre exactement ce modèle (cas tridimensionnel) nous incite à utiliser d'autre méthodes de la mécanique statistique .Parmi ces méthodes, la méthode du champ moyen découverte par Weiss en 1907 pour expliquer le ferromagnétisme. Cette méthode s'est avérée comme étant l'approximation d'ordre zéro des théories exactes (le groupe de renormalisation , le finite -size-scaling...).Dans ce chapitre nous présenterons la méthode du champ moyen qui va nous permettre d'expliquer les transitions 3He - 4He et la cristallisations dans un alliage binaire .Nous étudierons ensuite les modèles à spin – $3/2$ et le phénomène microémulsion dans lequel nous essayerons de déterminer les phases lamellaires dans le modèle de Gompper et Schick .

III . 2 La méthode du champ moyen:

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

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (3-1)$$

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

$$H = -\sum_i h_i S_i \quad (3-2)$$

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

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

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(pA) \quad (3-3)$$

Où p désigne l'opérateur densité du système tel que $\text{Tr}(p) = 1$

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

$$F = \beta \text{Tr}(pH) + \text{Tr}(p \log p) \quad (3-4)$$

Où H représente l'hamiltonien du système .On en déduit :

$$p = \exp(-\beta H) / \text{Tr}(\exp(-\beta H)) \quad (3-5)$$

et

$$F = (-1/\beta) \log \text{Tr}(\exp(-\beta H)) \quad (3-6)$$

Comme en général, on ne sait pas calculer exactement la fonction de partition $Z = \text{Tr}(\exp(-\beta H))$, on doit se contenter d'une expression approchée $\tilde{F}$ de l'énergie libre obtenue à partir d'un opérateur densité approximatif p_0 , on a :

$$\beta \tilde{F} = \beta \text{Tr}(p_0 H) + \text{Tr}(p_0 \log p_0) \quad (3-7)$$

Très souvent il est possible d'associer à p_0 un hamiltonien d'essai H_0 tel que :

$$p_0 = \exp(-\beta H_0) / \text{Tr}(\exp(-\beta H_0)) \quad (3-8)$$

Il est alors commode d'écrire (3-7) en faisant apparaître explicitement H_0 , on a :

$$\beta \tilde{F} = \beta \text{Tr}(p_0 H_0) + \text{Tr}(p_0 \log p_0) + \beta \text{Tr}(p_0 (H - H_0)) \quad (3-9)$$

$$\tilde{F} = F_0 + \text{Tr}(p_0 (H - H_0)) \quad (3-10)$$

Où $F_0 = -\log(\text{Tr}(\exp(-\beta H_0))) / \beta$ est l'énergie libre du système décrit par l'hamiltonien H_0 on peut montrer que, quel que soit l'opérateur $p_0 \neq p$, l'énergie libre approchée est toujours supérieure à l'énergie libre exacte. Soit :

$$\tilde{F} \leq F_0 + \text{Tr}(p_0 (H - H_0)) \quad (3-11)$$

A chaque opérateur densité p_0 , appartenant à une certaine classe, correspond une énergie libre $\tilde{F}(p_0)$. A une température donnée, le meilleur opérateur densité de la classe

est celui qui minimise la fonctionnelle $\tilde{F}(p_0)$ de façon à approcher le plus possible l'énergie libre F . Dans la pratique, deux cas sont à distinguer ; soit que l'opérateur densité approximatif p_0 est défini à partir d'un hamiltonien d'essai H_0 . Dans ce cas il faut minimiser :

$$\tilde{F} = F_0 + Tr(p_0(H - H_0)) \quad (3-12)$$

Soit que l'opérateur densité p_0 est défini sans passer par l'intermédiaire d'un hamiltonien d'essai. Dans ce cas il faut minimiser

$$\tilde{F} = \beta Tr(p_0 H) + Tr(p_0 \log p_0) / \beta \quad (3-13)$$

La théorie du champ H_0 moyen, malgré qu'elle ne tient pas compte des fluctuations, donne des résultats qui sont qualitativement correctes. Cependant, la température critique obtenue par cette méthode est indépendante de la dimensionnalité de l'espace, ce qui contredit le critère d'universalité. Elle donne aussi des résultats pour les exposant critiques et tricritiques en contradiction avec les résultats expérimentaux et ceux obtenus par les méthodes exactes et numériques (Finite Size Scaling, Monte-carlo, Groupe de renormalisation) plus puissantes.

III. 3 – Modèles à spin – 3/2 :

III .3.1 Introduction :

L'étude des terres rares et des mélanges fluides ternaires a eu pour effet l'introduction de modèle à spin -3/2 .Le D_yVO_4 est l'un des composés des terres rares dont la formule générale est RVO_4 et sous une température ambiante il a la structure tétragonale. Son comportement est tout à fait différent du composé $GdVO_4$ {qui s'ordonne de manière antiferromagnétique à $T = 2.5^\circ K$ }. Le D_yVO_4 s'ordonne de façon antiferromagnétique dans le plan basal à $T_N = 3,0^\circ K$ fig.III-1.Des considérations par la théorie des groupes ont montré que cette ordre dans le plan basal à n'est possible que si le D_yVO_4 a déjà subit un changement de symétrie. Une analyse aux rayons X et des mesures de la chaleur spécifique voir fig. III-2, à base température, ont montré l'existence de 2 transitions de seconde ordre .L'une à $14^\circ K$ (T_D) ou le D_yVO_4 subit un changement de symétrie, de la symétrie tetragonale à une faible symétrie qui est probablement orthorhomoique. Cette distorsion cristallographique est appelée transition de Jahn-Teller. L'autre transition apparait à $3^\circ K$ (T_N) de la phase orthorhombique vers la phase antiferromagnétique .Des études optiques [ont montré que seulement le quadruplet $S=3/2$ participe dans les 2 transitions, à T_D il est séparé en 2 doublets et à T_N en quatre singlets.

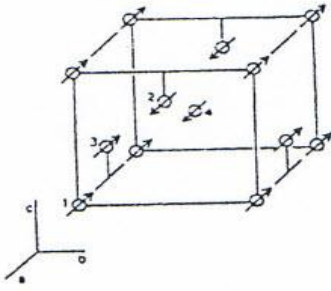


Fig .III-1.Le modèle de commande antiferromagnétique proposé à des températures bien en dessous T_N

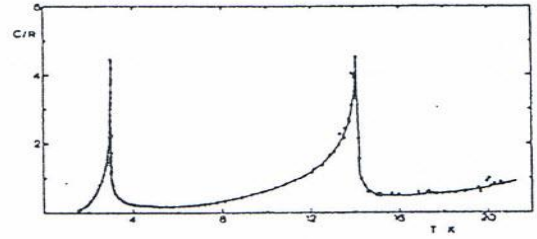


Fig . III-2 La chaleur spécifique de $DyVO_4$

III. 3 . 2 Modèle de Sivardière et Blume :

III. 3 . 2.1 Modélisation :

Sivardière et Blume ,en 1972 ,ont introduit un modèle d'Ising spin -3/2 contenant à la fois une interaction bilinéaire et biquadratique et soumis à un champ magnétique externe .Ils ont pu avec ce modèle simple expliquer qualitativement les 2 transitions qui existent dans le composé $DyVO_4$.Le modèle est défini par l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = -h \sum_i S_i^z - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_{\langle i,j \rangle} k_{ij} \left[(S_i^z)^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] \times \left[(S_j^z)^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] \quad (3-38)$$

$$S_i^z = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \quad S = \frac{3}{2}$$

Les interactions J_{ij} et K_{ij} proviennent des processus physiques différents. Ce sont en générale (dans le cas d'Ising) les interactions dipolaires et quadripolaires, respectivement, mais elles ne proviennent pas nécessairement des interactions magnétiques dipôle-dipôle et électrique quadripôle - quadripôle. Par exemple,

L'interaction quadripolaire K_{ij} peut provenir de l'échange de phonons entre les ions qui cause l'effet de John-Teller. Ainsi, des expériences séparées sont requises afin de déterminer les origines physiques des paramètres J_{ij} et K_{ij} . Une étude des excitations élémentaires (exp : phonons et magnons) et leur interactions peut distinguer entre les mécanismes possibles qui accompagnent ces transitions.

Pour le spin -3/2, il est en générale nécessaire de considérer l'ordre octupolaire associé au paramètre $\langle (S_i^z)^3 \rangle$. Il n'est pas considéré ici parce que l'hamiltonien ne contient pas un échange cubique de la forme $(S_i^z)^3 (S_j^z)^3$. Les équations self consistantes pour les paramètres d'ordre M et Q sont déduites par l'approximation du champ moyen. Les champs moléculaires associés à ces paramètres d'ordre sont :

$$H = -\sum_i J_{ij} S_j^z \quad \text{et} \quad \sigma = -\sum_j k_{ij} [(S_j^z)^2 - \frac{5}{4}] \quad (3-39)$$

A l'aide du principe variationnel pour l'énergie F

$$\left. \begin{array}{l} F \leq \Phi = F_0 + \langle V \rangle_0 \\ \text{et} \quad \frac{\partial \Phi / N}{\partial H} = 0, \quad \frac{\partial \Phi / N}{\partial \sigma} = 0 \end{array} \right\} \quad (3-40)$$

A partir de (3-40) on détermine les équations self consistantes et l'énergie libre F, soit :

$$H = 2JM$$

$$\sigma = 2KQ$$

$$M = \frac{3e^{2\beta KQ} \sinh(3\beta JM + \frac{3}{2}\beta h) + e^{-2\beta KQ} \sinh(\beta JM + \frac{1}{2}\beta h)}{Z_0}$$

$$Q = \frac{2e^{2\beta KQ} \cosh(3\beta JM + \frac{3}{2}\beta h) - e^{-2\beta KQ} \cosh(\beta JM + \frac{1}{2}\beta h)}{Z_0}$$

$$\frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_0) + JM^2 + KQ^2 \quad (3-41)$$

$$Z_0 = 2e^{2\beta KQ} \cosh(3\beta JM + \frac{3}{2}\beta h) + e^{-2\beta KQ} \cosh(\beta JM + \frac{1}{2}\beta h)$$

III . 3 . 2 . 2 Diagrammes de phase pour $J>0$, $K>0$ et $h=0$:

Considérons d'abord les cas particuliers :

a- $J=0$, on a de (3-41)

L'aimantation M et le moment quadripolaire sont donnés par :

$$M = 0 , \quad Q = \tanh(2\beta KQ).$$

Il n'y a pas d'ordre dipolaire et l'ordre quadripolaire ($Q \neq 0$) apparaît à KT_Q ($KT_Q=2K$) et la transition est du second ordre comme dans le modèle de spin -1/2, car à $J=0$, le système est équivalent au modèle d'Ising spin -1/2 . La fonction de partition Z est donnée par :

$$Z = \sum_{S_i^Z} \exp\{\beta \sum_{(i,j)} k_{ij} [(S_i^Z)^2 - \frac{5}{4}][(S_j^Z)^2 - \frac{5}{4}]\}$$

$$\text{Ou } S_i^Z = \pm \frac{1}{2} , \pm \frac{3}{2} \quad (3-42)$$

En posant $\sigma_i = (S_i^Z)^2 - \frac{5}{4}$ on aura :

$$S_i = +1 \text{ pour } S_i^Z = \pm \frac{3}{2}$$

et

$$S_i = -1 \text{ pour } S_i^Z = \pm \frac{1}{2}$$

Ainsi Z peut s'écrire :

$$Z = 2^N \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(\beta \sum_{(ij)} k_{ij} \sigma_i \sigma_j) \quad (3-43)$$

Qui est la fonction de partition du modèle d'Ising $S = 1/2$, pour lequel la transition est du second ordre .On voit que les seules solutions pour Q , sont $Q=1$ et $Q=-1$ qui correspondent à $S_i^Z = \pm \frac{3}{2}$ et $S_i^Z = \pm \frac{1}{2}$.

Donc le champ moléculaire s sépare le quadruplé $S = 3/2$ en deux doublets fig.III-3.

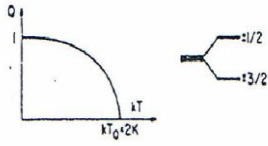


Fig-III-3

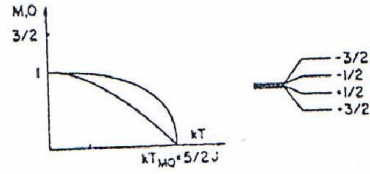


Fig-III-4

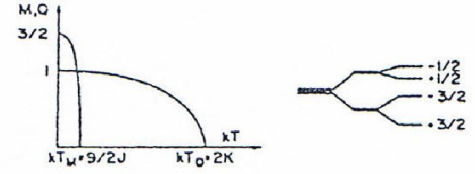


Fig-III-5

b- $K=0$, l'équation (3-41) donne :

$$M = \frac{3 \sinh(3\beta JM) + \sinh(\beta JM)}{2 \cosh(3\beta JM) + 2 \cosh(\beta JM)} \quad (3-44)$$

L'ordre dipolaire apparait pour $T < T_{MQ}$ avec $\left[T_{MQ} = \frac{5}{2}J = \frac{2}{3}JS(S+1) \right]$ et la transition est du second ordre et le quadruplé $S = 3/2$ est séparé en 4 singlets par le champ moléculaire H fig.III-4.

C - $J \ll K$, comme l'interaction dipolaire est faible, on s'attend à ce que la transition quadripolaire reste inchangée c'est-à-dire subsiste à T_Q . Au voisinage de $T = 0^\circ K$, $J \neq 0$, l'ordre dipolaire est maintenant possible et M donnée par l'équation (3-41) ou $Q = 1$ et $2\beta KQ \rightarrow \infty$ et $M = 3/2 \tanh 3\beta JM$. La transition apparait à T_M ($KT_M = \frac{9}{2}j$) et est du second ordre. Dans ce cas, les doubles sont séparés en singlets par le champ moléculaire H et on observe ainsi les deux transitions fig.III-5.

Pour déterminer le diagramme de phase dans le plan $(J/K, T/K)$ les équations self-consistantes sont résolues numériquement et on compare l'énergie libre des trois solutions $M = Q = 0$, $M = 0$, $Q = \tanh 2\beta KQ$; $M \neq 0$, $Q \neq 0$. Dans le diagramme de phase fig.III-6, on voit que :

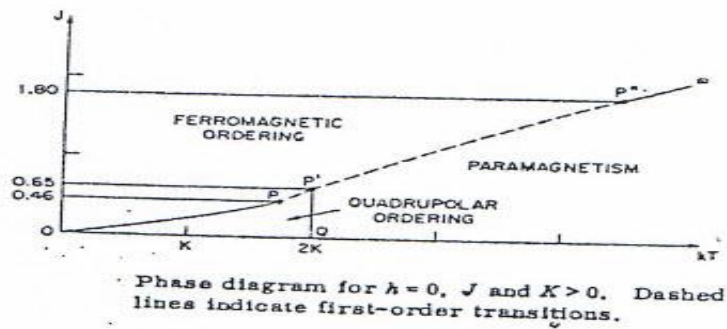


Fig-III-6

★ Pour $J > 1,8$. Une transition du second ordre apparait entre l'état paramagnétique et l'état où M et Q sont différents de 0.

★ Pour $1,8 > J > 0,65$, une transition de premier ordre vers l'état où M et $Q \neq 0$, avec p'' comme point tricritique.

★ Pour $0,65 > J > 0,46$, deux transitions de nature différentes apparaissent, une transition quadripolaire du second ordre et l'autre dipolaire du premier ordre.

★ Pour $0,46 > J > 0$, deux transitions de seconde ordre apparaissent comme dans le cas du composé D_yVO_4 .

Dans le cas où $K > 0$ et $J < 0$, l'interaction dipolaire favorise un ordre antiferromagnétique, on doit diviser le réseau en 2 sous-réseau équivalents A et B et introduire 4 paramètres ordre. Comme $h=0$, on a $Q_A = Q_B, M_A = -M_B$ et le diagramme de phase pour $J < 0$ est identique à celui où $J > 0$, sauf qu'on a la phase antiferro comme dans le D_yVO_4 . Donc, le modèle de Sivardière et Blume avec $J < 0, K > 0$ et $J < K$ permet de donner une explication qualitative des transitions que subit le D_yVO_4 à basse température c.à.d dans l'intervalle $[0, 20^\circ]$.

Chapitre IV

Modèle d'ashkin-Teller

IV -1 INTRODUCTION :

Quelques 70 années auparavant , Ashkin et Teller (1943) ont introduit un modèle statistique sur réseau ,connu maintenant sous le nom du modèle d'Ashkin-Teller(AT), comme généralisation du modèle d'Ising à un système à quatre composantes .Le modèle AT est définie sur un réseau carré dont les sites sont occupés par l'un des quatre types d'atomes A,B,C et D .Deux atomes voisins interagissent avec une énergie ε_0 pour AA , BB , CC , DD ; ε_1 pour AB , CD ; ε_2 pour AC , BD ; et ε_3 pour AD , BC . Si on interchange les atomes sur les sites du réseau, les quatre énergies peuvent être permutés .L'unique représentation physique du modèle d'AT , est l'adsorption du sélénium sur la surface Ni .Le diagramme de phase obtenu pour ce corps appartient à la même classe d'universalité que le modèle d'AT (Bak et al,1985).

Comme représentation en termes de spins (Fan 1972) du modèle d'AT est comme suit : Sur chaque site du réseau, on introduit deux spins (σ, τ) d'Ising de telle sorte à avoir un réseau à deux couches. Les quatre spins voisins interagissent par l'intermédiaire d'une interaction à quatre corps $-K = \frac{1}{4}(\varepsilon_0 + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ et deux interactions à deux corps $-J_1 = \frac{1}{4}(\varepsilon_0 + \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3)$ et $-J_2 = \frac{1}{4}(\varepsilon_0 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \varepsilon_3)$ pour chaque couche. Soit l'hamiltonien :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_1 \tau_i \tau_j + J_2 \sigma_i \sigma_j + K \tau_i \tau_j \sigma_i \sigma_j)$$

L'hamiltonien est invariant sous la transformation $\sigma_i \rightarrow \tau_i$ et $\tau_i \rightarrow \sigma_i$ et $J_1 \rightarrow J_2$. En performant la transformation dual pour les spins d'Ising dans chaque couche et en interprétant le résultat comme un modèle de vertex (Wu 1971; Kadanoff et wegner1971). De même (Wegner 1972) a pu montrer que le modèle d'AT est équivalent au modèle a huit vertex alterné.

Le cas qui a fait l'objet d'études diversifiées et détaillées, est le modèle d'AT isotrope où $J_1 = J_2 = J$. Le diagramme de phase de modèle est représenté en fonction des paramètres X et Z, Fig. 1, où :

$$Z = \exp (-4J) \quad , \quad X = \exp [-2(K+J)]$$

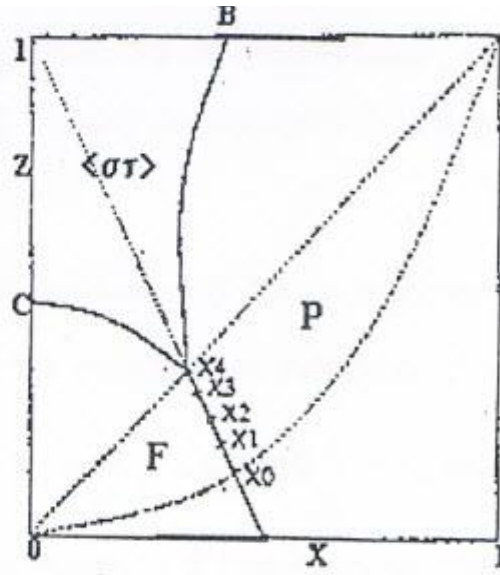


Fig. 1: Diagramme de Phase du modèle d'Ashkin-Teller ou modèle Z(4).

Décrivons d'abord les trois différentes phases induites par cet hamiltonien :

(a) Paramagnétique (p). Les couplages sont suffisamment faibles que le système est dans la phase paramagnétique où ni σ ni τ ni $(\sigma\tau)$ ne sont ordonnées. (b) La phase ferromagnétique (F) appelée aussi la phase Baxter qui existe à $T=0$. Les couplages sont suffisamment forts que σ et τ s'ordonnent indépendamment de façon ferromagnétique tel que $\langle \sigma \rangle = \pm \langle \tau \rangle$. Aussi dans cette phase $\langle \sigma \tau \rangle$ est non nulle et a le même signe que $\langle \sigma \rangle \langle \tau \rangle$.

(c) La phase $\langle \sigma \tau \rangle$, dans laquelle $\sigma \tau$ est ordonnée de manière ferromagnétique, mais $\langle \sigma \rangle = \langle \tau \rangle = 0$. Cette phase apparaît seulement pour $K > J$. - Une autre représentation de ce modèle est de considérer un réseau carré ayant en chaque site un spin $\vec{S}$ à deux composantes, et qui pointe dans les quatre directions le long des axes (Knops 1975). Soit l'hamiltonien :

$$H = - \sum_{i,j} \left[J(\vec{S}_i \vec{S}_j) + K \left[2 (\vec{S}_i \vec{S}_j^2) - 1 \right] \right]$$

- i. Si $J=0$, le modèle se réduit au modèle d'Ising à deux composantes avec des spins qui s'ordonnent soit le long de l'axe x ou le long de l'axe y . Ce modèle est critique pour $\exp(-2K) = \sqrt{2} - 1$.
- ii. Si $K = +\infty$, seulement les configurations ayant des spins parallèles ou anti parallèles restent. Aussi, on recouvre modèle d'Ising qui est critique pour $\exp(-2J) = \sqrt{2} - 1$.
- iii. On peut retrouver l'hamiltonien d'AT en représentant les orientations de $\vec{S}$ par deux spins (σ, τ) est en utilisant les relations $\sigma = S_X - S_Y, \tau = S_X + S_Y$ et la relation $(\vec{S}_i, \vec{S}_j) = \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{1}{2} \tau_i \tau_j$. Quand $K = 0$, on a la ligne $Z = X^2$ et le modèle est découpé en deux modèles d'Ising indépendants avec une interaction entre premiers voisins J ayant une transition au point X_0 et dont les exposants critiques sont de type Ising ($\alpha = 0, \gamma = \frac{7}{4}$ et $\beta = \frac{1}{8}, \nu = 1$).
- iv. Sur la ligne $Z=X$ ou $J=K$, le modèle d'AT est réduit au modèle de pots à quatre états. Le point X_4 est le point multicritique de pots à quatre états avec les exposants critiques ($\alpha = 2/3, \gamma = 7/6$ et $\beta = 1/12, \nu = 2/3$). Le Hamiltonien en ce point est invariant sous la transformation $\sigma_i \rightarrow \sigma \tau_i, \tau_i \rightarrow \tau_i$ qui n'est autre que la symétrie du modèle de pots à quatre états qui présente en $d=2$ une transition du second ordre. Il a été montré (Baxter 1972) que la ligne critique $X_0 X_4$ est isomorphe à la ligne critique du modèle à huit vertex alternés en utilisant la transformation de dualité, et que le long de cette ligne les exposants critiques varient. Cette ligne peut être trouvée exactement en utilisant la transformation de dualité du modèle d'AT (Domany et Riedel, 1979) et elle est donnée par $Z=1-2X$. Enfin ce point X_4 bifurque en deux lignes critiques $X_4 B$ et $X_4 C$ pas connues exactement, et qui sont de types Ising.

IV-2 – Autres phases dans le modèle d'ashkin-teller :

-Comme on a pu le voir , le modèle d' AT dans le cas où les interactions sont ferromagnétique , il y apparait une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle \sigma \tau \rangle$ à haute température .Dans le cas où l'interaction à quatre corps est antiferromagnétique , le modèle d' AT a , à $T=0$, en plus de la phase de Baxter , la phase où $\langle \sigma \tau \rangle_{AF}$ est ordonnée de manière antiferromagnétique alors que σ et τ sont désordonnées .L'étude de ce modèle par le champ moyen , les simulations de Monte-Carlo et le développement en série à haute et à basse température à montré l'existence , à $d=3$, d'une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle \sigma \rangle$ (où σ est ferromagnétique mais $\langle \tau \rangle$ et $\langle \sigma \tau \rangle$ sont désordonnées)et qui n'existe pas à $d=2$.Cette phase sépare la phase Baxter et la phase $\langle \sigma \tau \rangle$ par des transitions du premier ordre .

-L'étude du modèle d'AT anisotrope ($J_1 \neq J_2$) par le champ moyen, les simulations de Monte-Carlo en $d=2$ et $d=3$, a montré l'existence d'une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle \sigma \rangle$ en plus de la phase partiellement ordonnée $\langle \sigma \tau \rangle$, à haut température, fig 2 .

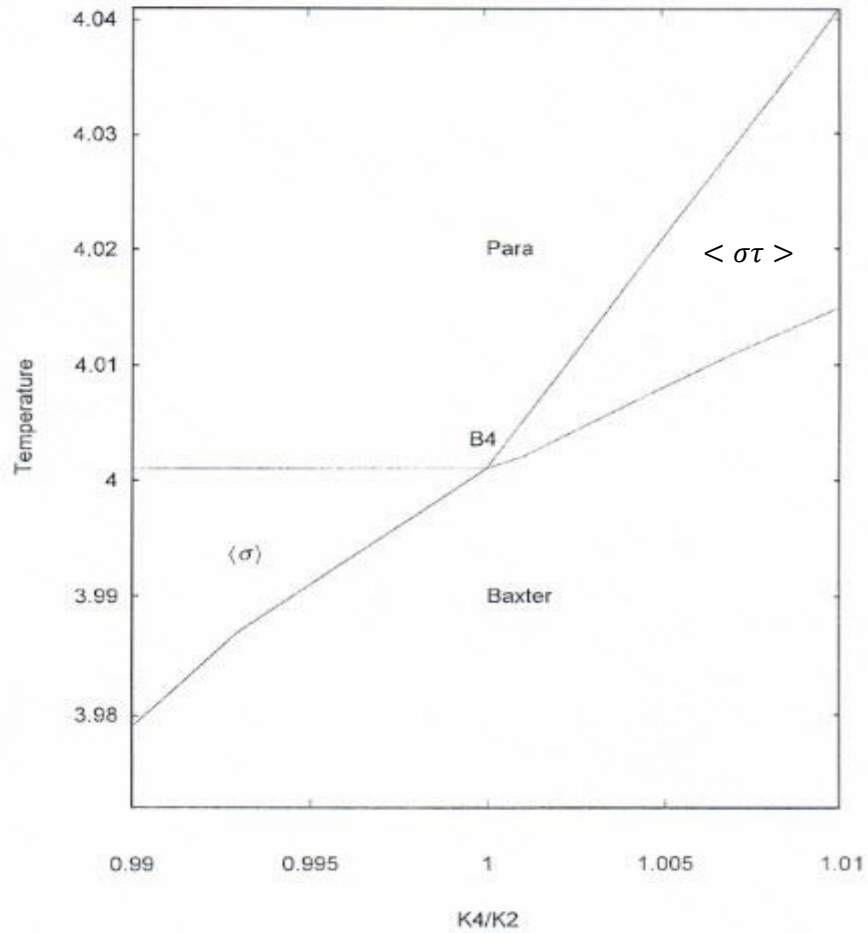


Fig. 2 diagramme de phase obtenu à partir de l'MFA pour le $L_2/K_2 = 0.15$. Lignes continues représentent la seconde transition de l'Ordre. Toutes les lignes critiques se rencontrent au point multicritique B^4

La différence entre $d=2$ et ($d=3$) est la disparition (apparition) de la ligne de transition du premier ordre. (fig. 3-4).

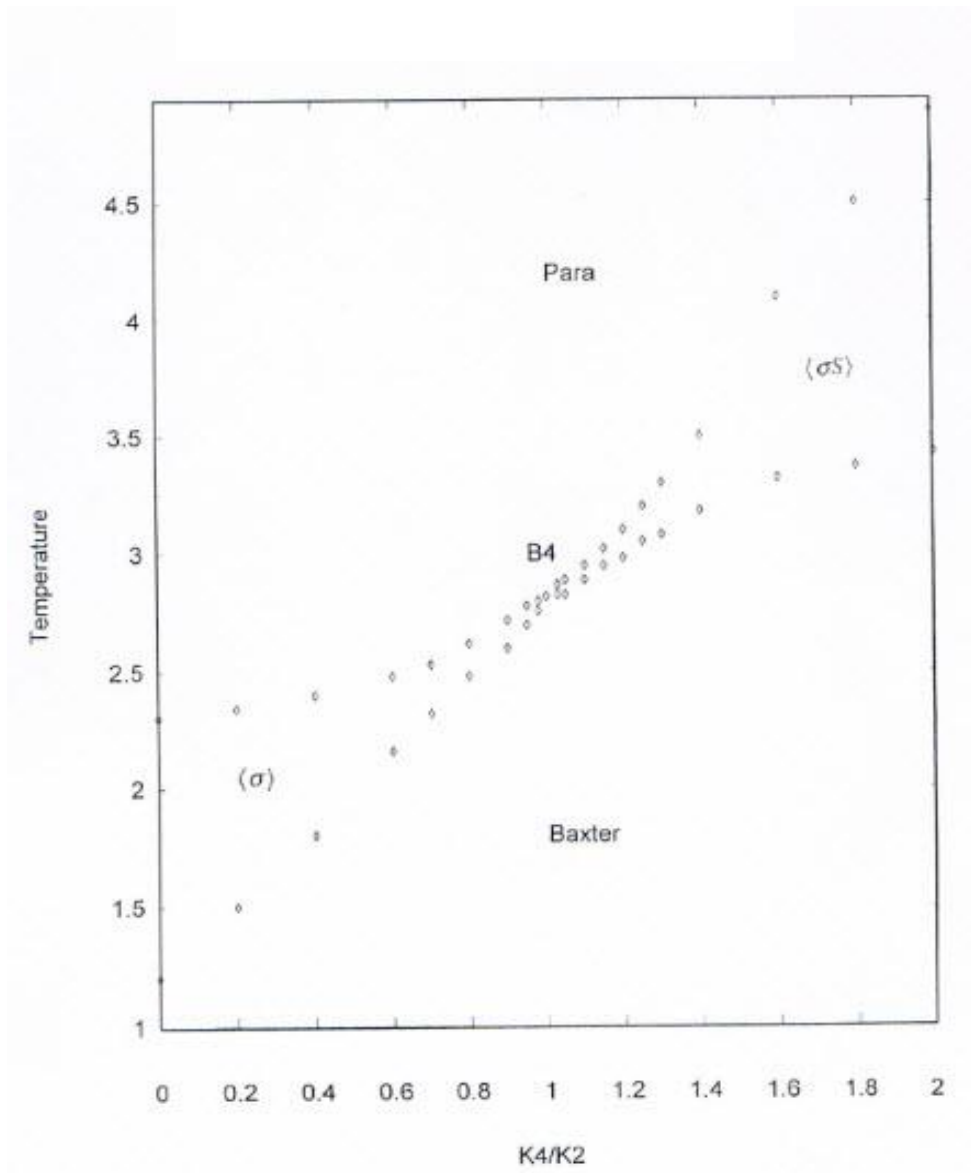


Fig 3 .Diagramme de phase obtenue à partir de simulations MC dans $d = 2$ et $L = 30$ pour $L_2/K_2 = 0,5$. Les diamants représentent deuxième transitions de phase de commande. La réunion de toutes les lignes critiques se trouve au niveau des points multicritiques B^4

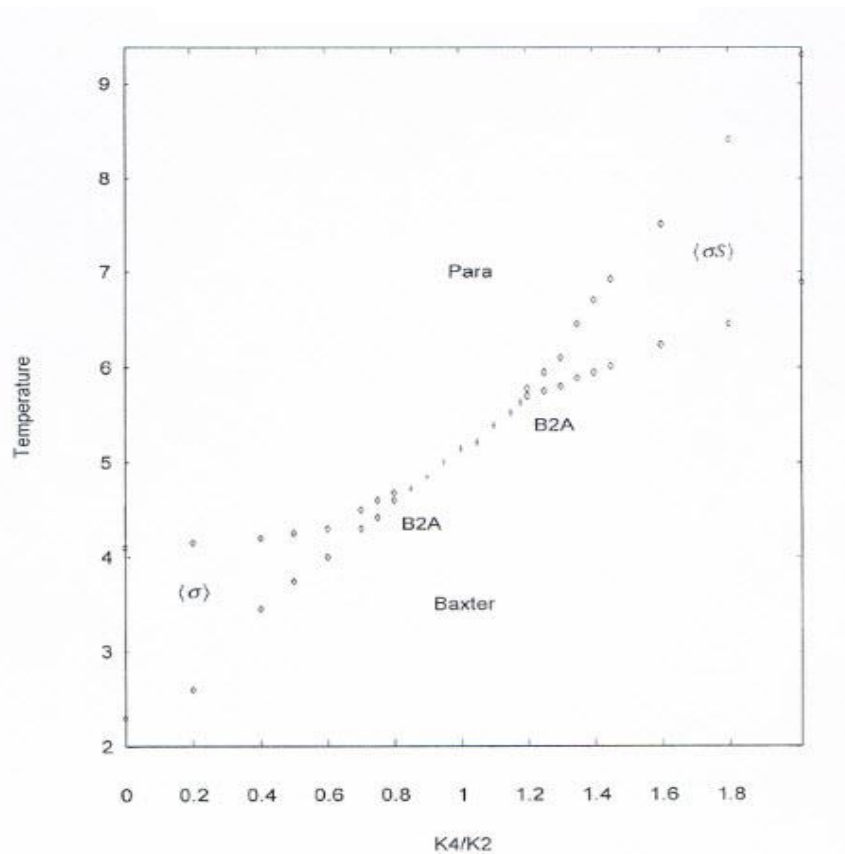


Fig .4 .Diagramme de phase obtenue à partir de simulations MC dans $d = 3$ et pour $L_2/K_2 = 0,5$ les diamants et désigner deuxième ordre respectivement de transition de phase du premier ordre .il ya deux points multicritiques B^4A .

L'étude de ce même modèle par la matrice de transfert en $d=2$, où les fluctuations sont très importantes, confirme l'existence de cette phase partiellement ordonnée à haute température fig. 5.

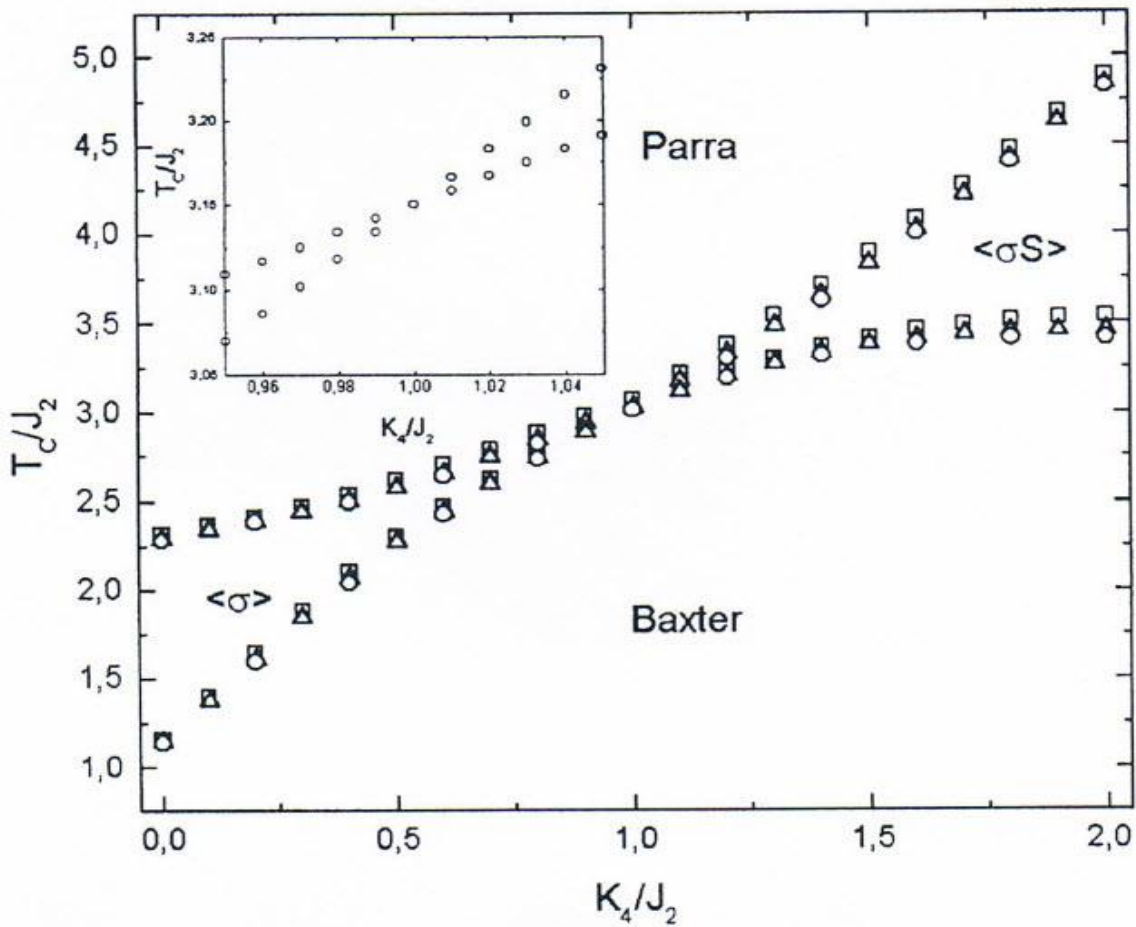


Fig. 5. Le diagramme de phase dans le plan K_4/J_2 , T/J_2 pour $L_2/J_2 = 0.5$. résultats des TM de $N/N' = \frac{3}{4}$ (carré) $\frac{4}{5}$ (triangle) et $\frac{5}{6}$ (cercle) mise à l'échelle (les données ne sont pas représentées $\frac{2}{3}$ pour clarté. Un des points multicritique B^4 est situé.

Le calcul des exposants critiques a montré que ce modèle présente une non-universalité c.à.d. , variations des exposants de ceux d'Ising vers pots à quatre états. fig. 6.

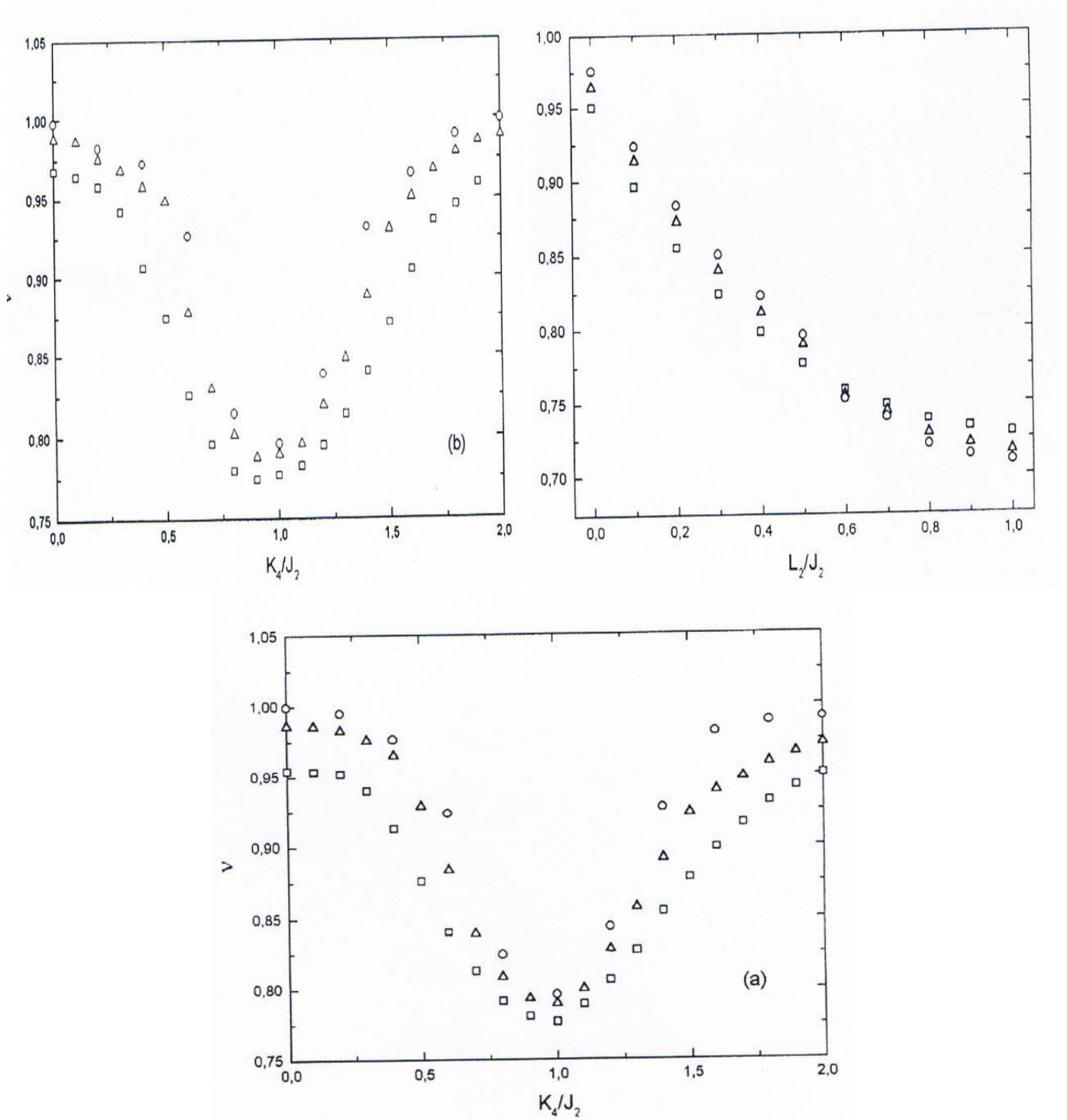


Fig . 6 . Estimations de rapport K_4/J_2 de l'exposant ν pour $L_2/J_2 = 0,5$ obtenue par des calculs de matrice de transfert à partir de $N/N' = \frac{3}{4}$ (carré) $\frac{4}{5}$ triangle et cercle $\frac{5}{6}$ mise à l'échelle (a) pour partiellement ordonné la phase -paramagnétique transition (b) pour baxter-partiellement transition de phase commandé

-Dans le cas où le spin est grand, spin -1, le modèle d'AT présente une nouvelle phase partiellement ordonnée $\langle \tau \rangle$ en plus de phase $\langle \sigma \tau \rangle$ à haute température et les transitions vers la phase Baxter sont du deuxième ordre et du premier ordre liées par un point tricritique. fig. 7.

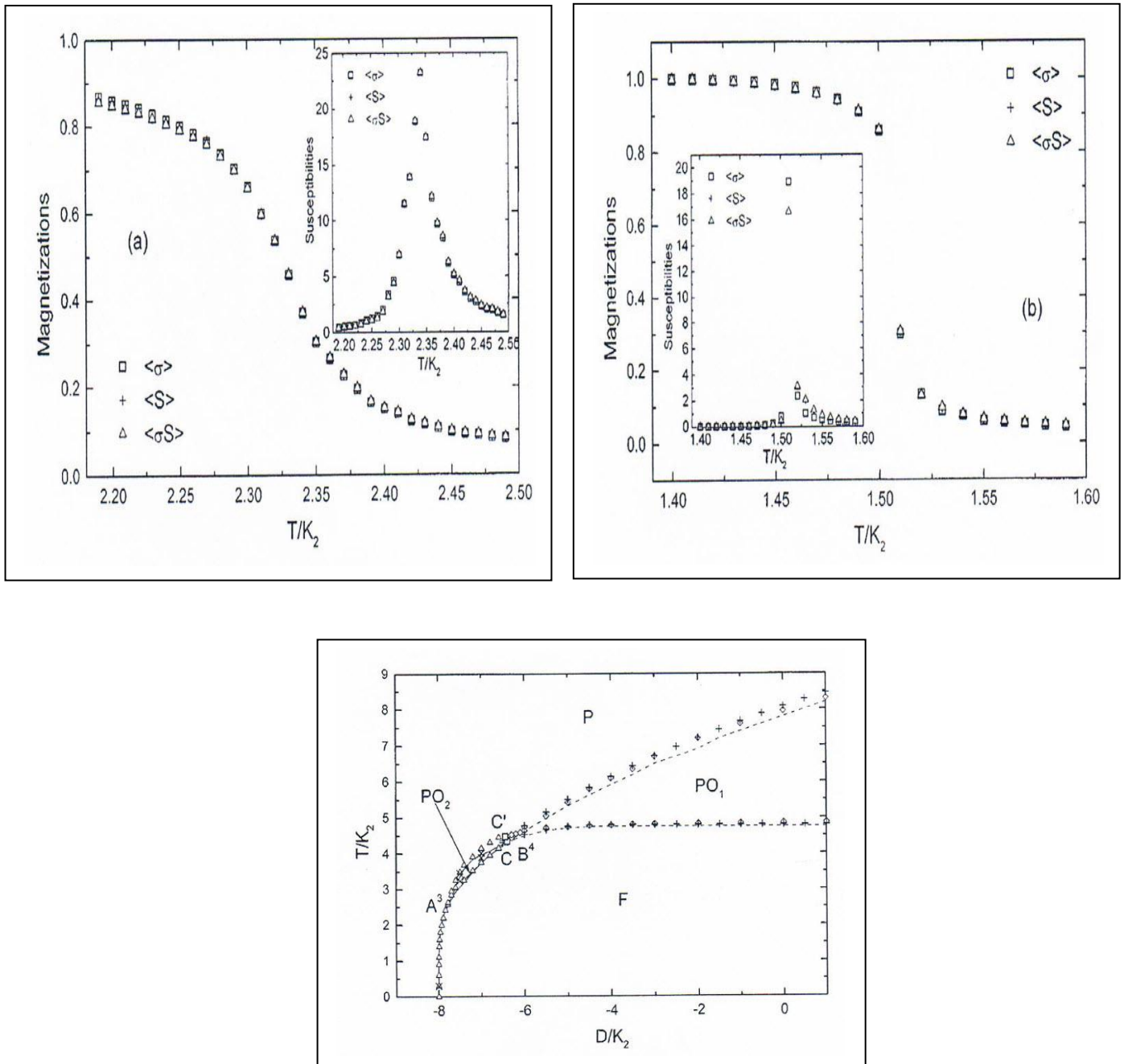


Fig . 7 . parcelle de paramètres afin $\langle \sigma \rangle$, $\langle S \rangle$ et $\langle \sigma S \rangle$ en fonction de T / K_2 pour $K_4 / K_2 = 1$ et différentes valeurs de l'anisotropie des simulations MC avec $L = 30$ et montrant qu'il n'y a qu'une seule transition l'encart correspondant montre susceptibilités associés . (a) $D / K_2 = -1$, les trois paramètres de commandes sont continue indiquant que la transition est de second ordre . (b) $D / K_2 = -2,5$ les trois paramètres de commandes sont discontinue indique que la transition est de premier ordre.

L'étude par la matrice de transfert et Monte-Carlo a montré que ce modèle aussi non-univresel .fig. 8.

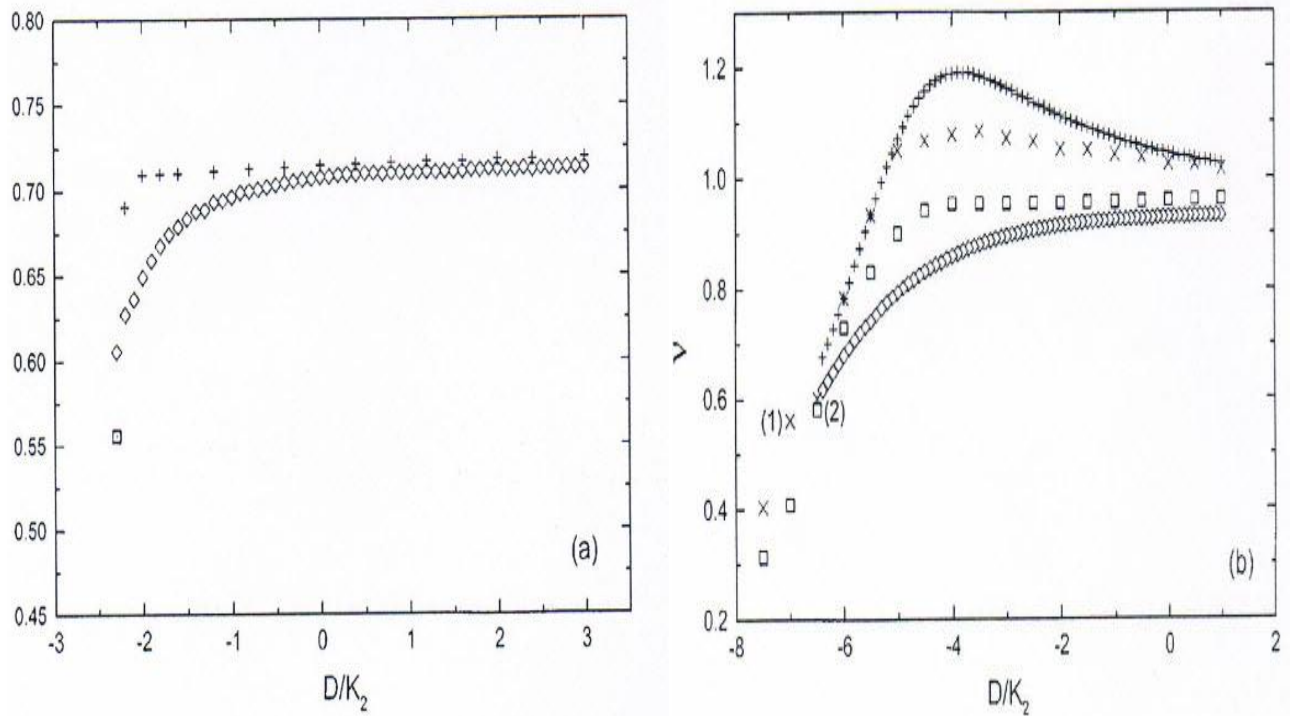


Fig . 8 .Estimations de ν par rapport à l'exposant D / K_2 pour différentes valeurs de K_4 / K_2 telles qu'obtenues par des calculs de transfert à matrice (voir texte pour la discussion) à partir de $N / N' = 2/3$ et $3/4$ mise à l'échelle. (a) $K_4 / K_2 = 1$, ($\diamond$) à partir de $2/3$ mise à l'échelle et (+) de mise à l'échelle $3/4$. ($\square$) Désignent le point tricritique de $3/4$ mise à l'échelle. (b) $K_4 / K_2 = 6$, (+) à partir de $2/3$ et mise à l'échelle (x) à partir de $3/4$ échelle pour $PO_1 - P$ et transitions de phase $F - PO_2$, (1) est le point de tricritique associé, où ($\diamond$) à partir de $2/3$ et mise à l'échelle ($\square$) à partir de $3/4$ échelle pour $F - PO_4$ PO_1 et de phase $PO_2 - P$ transitions, (2) désigne le point correspondant tricritique

IV – 3 Etude du modèle d'ashkin-teller à spin -3/2 par le champ moyen

L'hamiltonien du système est :

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

$K_2, K_4 > 0$, D : champ cristallin.

Soient h_σ, h_s et $h_{\sigma s}$ les champs moléculaires associés aux paramètres d'ordre $\langle \sigma \rangle, \langle s \rangle$ et $\langle \sigma s \rangle$ respectivement et soit j représentant tous les premiers voisins au site i .

$$\hbar_\sigma = \sum_{j(i)} \langle \sigma_{j(i)} \rangle K_2, \hbar_s = \sum_{j(i)} \langle s_{j(i)} \rangle K_2 \text{ et } \hbar_{\sigma s} = \sum_{j(i)} \langle \sigma_{j(i)} s_{j(i)} \rangle K_4$$

l'hamiltonien effectif s'écrit :

$$H_0 = -(\hbar_\sigma \sum_i \sigma_i + \hbar_s \sum_i s_i + \hbar_{\sigma s} \sum_i \sigma_i s_i)$$

il génère la fonction de partition Z_0

$$Z_0 = \text{Tr } e^{-\beta H_0} = A$$

$$\begin{aligned} &= 2(e^{\frac{3}{2}\beta(\hbar_s+3D)} \cdot \cosh_{\frac{3}{2}}\beta(\hbar_\sigma+\frac{3}{2}\hbar_{\sigma s}) + e^{\frac{3}{2}\beta(-\hbar_s+3D)} \cdot \cosh_{\frac{3}{2}}\beta(\hbar_\sigma-\frac{3}{2}\hbar_{\sigma s})) \\ &+ 2(e^{\frac{1}{2}\beta(3\hbar_s+5D)} \cdot \cosh_{\frac{1}{2}}\beta(\hbar_\sigma+\frac{3}{2}\hbar_{\sigma s}) + e^{\frac{1}{2}\beta(-3\hbar_s+5D)} \cdot \cosh_{\frac{1}{2}}\beta(\hbar_\sigma-\frac{3}{2}\hbar_{\sigma s})) \\ &+ 2(e^{\frac{1}{2}\beta(\hbar_s+5D)} \cdot \cosh_{\frac{3}{2}}\beta(\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma s}) + e^{\frac{1}{2}\beta(-\hbar_s+5D)} \cdot \cosh_{\frac{3}{2}}\beta(\hbar_\sigma-\frac{1}{2}\hbar_{\sigma s})) \\ &+ 2(e^{\frac{1}{2}\beta(\hbar_s+D)} \cdot \cosh_{\frac{1}{2}}\beta(\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma s}) + e^{\frac{1}{2}\beta(-\hbar_s+D)} \cdot \cosh_{\frac{1}{2}}\beta(\hbar_\sigma-\frac{1}{2}\hbar_{\sigma s})). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{➤ } m_\sigma &= \langle \sigma_i \rangle_0 = \frac{\text{Tr } \sigma_i e^{-\beta H_0}}{Z_0} \\ &= \frac{B}{A} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B &= 3e^{\frac{3}{2}\beta(\hbar_S+3D)} \cdot \sinh \frac{3}{2}\beta(\hbar_\sigma+\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) + 3e^{\frac{-3}{2}\beta(\hbar_S-D)} \cdot \sinh \frac{3}{2}\beta(\hbar_\sigma-\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) \\ &+ 3e^{\frac{1}{2}\beta(\hbar_S+5D)} \cdot \sinh \frac{3}{2}\beta(\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) + 3e^{\frac{-1}{2}\beta(\hbar_S-5D)} \cdot \sinh \frac{3}{2}\beta(\hbar_\sigma-\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) \\ &+ e^{\frac{1}{2}\beta(3\hbar_S+5D)} \cdot \sinh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma+\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) + e^{\frac{-1}{2}\beta(3\hbar_S-5D)} \cdot \sinh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma-\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) \\ &+ e^{\frac{1}{2}\beta(\hbar_S+D)} \cdot \sinh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) + e^{\frac{-1}{2}\beta(\hbar_S-D)} \cdot \sinh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma-\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) \end{aligned}$$

$$m_\sigma = \frac{B}{A}$$

$$\text{➤ } m_s = \langle s_i \rangle_0 = \frac{\text{Tr } s_i e^{-\beta H_0}}{Z_0} = \frac{C}{A}$$

$$\begin{aligned} C &= 3e^{\frac{3}{2}\beta(\hbar_S+3D)} \cdot \cosh \frac{3}{2}\beta(\hbar_\sigma+\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) - 3e^{\frac{3}{2}\beta(-\hbar_S+3D)} \cdot \cosh \frac{3}{2}\beta(\hbar_\sigma-\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) \\ &+ 3e^{\frac{1}{2}\beta(3\hbar_S+5D)} \cdot \cosh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma+\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) - 3e^{\frac{1}{2}\beta(-3\hbar_S+5D)} \cdot \cosh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma-\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) \\ &+ e^{\beta(\hbar_S+3D)} \cdot \cosh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) - e^{\beta(-\hbar_S+3D)} \cdot \cosh \frac{1}{2}\beta(\hbar_\sigma-\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) \end{aligned}$$

$$\text{➤ } m_{\sigma S} = \frac{\sum_i \sigma_i s_i e^{-\beta H_0}}{Z_0} = \frac{D}{A}$$

$$\begin{aligned}
D = & \frac{9}{2} e^{\frac{3}{2}\beta(\hbar_S+3D)} \cdot \sinh_{\frac{3}{2}}\beta(\hbar_\sigma+3\hbar_{\sigma S}) + \frac{9}{2} e^{\frac{3}{2}\beta(-\hbar_S+3D)} \cdot \sinh_{\frac{3}{2}}\beta(-\hbar_\sigma+3\hbar_{\sigma S}) \\
& + \frac{3}{2} e^{\frac{1}{2}\beta(3\hbar_S+5D)} \cdot \sinh_{\frac{1}{2}}\beta(\hbar_\sigma+3\hbar_{\sigma S}) + \frac{3}{2} e^{\frac{1}{2}\beta(-3\hbar_S+5D)} \cdot \sinh_{\frac{1}{2}}\beta(-\hbar_\sigma+\frac{3}{2}\hbar_{\sigma S}) \\
& + \frac{3}{2} e^{\frac{1}{2}\beta(\hbar_S+5D)} \cdot \sinh_{\frac{3}{2}}\beta(\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) + \frac{3}{2} e^{\frac{1}{2}\beta(-\hbar_S+5D)} \cdot \sinh_{\frac{3}{2}}\beta(-\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) \\
& + \frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}\beta(\hbar_S+D)} \cdot \sinh_{\frac{1}{2}}\beta(\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S}) + \frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}\beta(-\hbar_S+D)} \cdot \sinh_{\frac{1}{2}}\beta(-\hbar_\sigma+\frac{1}{2}\hbar_{\sigma S})
\end{aligned}$$

$$\triangleright F = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 + \langle H - H_0 \rangle$$

$$\begin{aligned}
F = & -\frac{1}{\beta} \sum_i \ln Z_0 + K_2 (\sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + \sum_{\langle ij \rangle} \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle) + \\
& K_4 \sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i s_i \rangle \langle \sigma_j s_j \rangle .
\end{aligned}$$

IV. 4 Programme fortran

```

*****
*           ETUDE DU MODELE ASHKIN-TELLER (3/2)           *
*           PAR LA METHODE DU CHAMP MOYEN                 *
*           -METHODE D'ITTEATION-                         *
*           m4                                             *
*****
PARAMETER (N=500)
REAL FX(N), K2, K4, L2, eps, FF, FM
REAL M01A, M01B, M02A, M02B, M03A, M03B
REAL M1A, M2A, M3A, M1B, M2B, M3B, M4A, M4B
REAL MX1A(N), MX2A(N), MX3A(N)
REAL MX1B(N), MX2B(N), MX3B(N)
REAL MS1A(N), MS2A(N), MS3A(N)
REAL MS1B(N), MS2B(N), MS3B(N)
IZ=4
eps=1E-9
YL=1.
  YD=-2.
  XK=-3.5
C      OPEN (UNIT=1, FILE='TEST2.RES', STATUS='UNKNOWN')

      WRITE (*, *) 'T='
      READ (*, *) T

C      WRITE (*, *) 'YL='
C      READ (*, *) YL

C      WRITE (*, *) 'XK='
C      READ (*, *) XK

C      WRITE (*, *) 'YD='
C      READ (*, *) YD

      WRITE (*, *) 'M01A='

      READ (*, *) M01A

      WRITE (*, *) 'M01B'
      READ (*, *) M01B

```

```

WRITE(*,*) 'M02A='
READ(*,*) M02A
WRITE(*,*) 'M02B'
READ(*,*) M02B

```

```

WRITE(*,*) 'M03A='
READ(*,*) M03A
WRITE(*,*) 'M03B'
READ(*,*) M03B

```

```

K2=1./T
L2=YL*K2
K4=XK*K2
D=YD*K2
L=0

```

```

M1A=M01A
M1B=M01B
M2A=M02A
M2B=M02B
M3A=M03A
M3B=M03B

```

```

4  X1B=( (3.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1A+9./2.*
&      K4*M3A)))+(3.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+3.*D))*SINH(2.*
&      (3.*K2*M1A-9./2.*K4*M3A)))+
&      (3.*exp(2.*(L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
&      (3.*exp(2.*(-L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1A-9./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*(K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*(K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*SINH(2.*(K2*M1A+1./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2A-1.*D))*SINH(2.*(K2*M1A-1./2.*K4*M3A))) )
&
&      / (2.*
&      (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+9./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-9./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A+1./2.*K4*M3A)))+
&      (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A-1./2.*K4*M3A))) ) )

```

```

X1A=((3.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1B+9./2.
& *K4*M3B)))+(3.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+3.*D))*SINH(2.*(3.*K2*
& M1B-9./2.*K4*M3B)))+(3.*exp(2.*(L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(3.
& *K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))+(
& (3.*exp(2.*(-L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1B-9./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(K2*M1B-3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2B+D))*SINH(2.*(K2*M1B+1./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2B-1.*D))*SINH(2.*(K2*M1B-1./2.*K4*M3B))))
&
& / (2.*
& ((exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B+9./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B-9./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B-3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B-3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1B+1./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2B+D))*COSH(2.*(K2*M1B-1./2.*K4*M3B))))))

X2B=((3.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+9./2.
& *K4*M3A)))-(3.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A
& -9./2.*K4*M3A)))+(
& (3.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))-(
& (3.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A+1./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A+1./2.*K4*M3A)))-(
& (exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A-1./2.*K4*M3A)))-(
& (exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A-1./2.*K4*M3A))))
&
& / (2.*
& ((exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+9./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-9./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A+1./2.*K4*M3A)))+(
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A-1./2.*K4*M3A))))))

X2A=((3.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B+9./2.
& *K4*M3B)))-(3.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B-
& 9./2.*K4*M3B)))+(
& (3.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))-(
& (3.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B-3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2B+D))*COSH(2.*(K2*M1B+1./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B+1./2.*K4*M3B)))-(
& (exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2B+D))*COSH(2.*(K2*M1B-1./2.*K4*M3B)))-(
& (exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B-1./2.*K4*M3B))))
&
& / (2.*
& ((exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B+9./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B-9./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))+(
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1B-3./2.*K4*M3B)))+(

```

```

&      (exp(2.*(L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))+

&      (exp(2.*(-L2*IZ*M2B+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1B-3./2.*K4*M3B)))+
&      (exp(2.*(L2*IZ*M2B+D))*COSH(2.*(K2*M1B+1./2.*K4*M3B)))+
&      (exp(2.*(-L2*IZ*M2B+D))*COSH(2.*(K2*M1B-1./2.*K4*M3B))))

X3B=((9./2.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1A+9.*K4*
& M3A)))+(9./2.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*SINH(2.*(-3.*K2*M1A+9.
& *K4*M3A)))+(3./2.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*(K2*M1A+
& 3./2.*K4*M3A)))+(3./2.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*
& (-1.*K2*M1A+3./2.*
& K4*M3A)))+(3./2.*exp(2.*(L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1A+3./2.
& *K4*M3A)))+(3./2.*exp(2.*(-L2*IZ*M2A+5.*D))*SINH(2.*(-3.*K2*M1A+
& 3./2.*K4*M3A)))+(1./2.*exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*SINH(2.*(K2*M1A+
& 1./2.*K4*M3A)))+(1./2.*exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2A+D))*SINH(2.*(-1.*K2*
& M1A+1./2.*K4*M3A))))/(2.*
& ((exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+9./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-9./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A+1./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A-1./2.*K4*M3A)))))

X3A=((9./2.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1B+9.*
& K4*M3B)))+(9./2.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+9.*D))*SINH(2.*(-3.*K2*M1B
& +9.*K4*M3B)))+
& (3./2.*exp(2.*(3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(K2*M1B+3./2.*K4*M3B)))+
& + (3./2.*exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(-1.*K2*M1B+3./2.*K4
& *M3B)))+(3./2.*exp(2.*(L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(3.*K2*M1B+3./2.*
& K4*M3B)))+(3./2.*exp(2.*(-L2*IZ*M2B+5.*D))*SINH(2.*(-3.*K2*M1B+
& 3./2.*K4*M3B)))+(1./2.*exp(2.*(L2*IZ*M2B+D))*SINH(2.*(K2*M1B+1./2.
& *K4*M3B)))+
& + (1./2.*exp(2.*(-1.*L2*IZ*M2B+D))*SINH(2.*(-1.*K2*M1B+1./2.*K4*
& M3B))))/(2.*
& ((exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+9./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+9.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-9./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-3.*L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A+3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+5.*D))*COSH(2.*(3.*K2*M1A-3./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A+1./2.*K4*M3A)))+
& (exp(2.*(-L2*IZ*M2A+D))*COSH(2.*(K2*M1A-1./2.*K4*M3A)))))

c      write(*,*) 'M1A,M1B',X1A,X1B
c      write(*,*) 'M2A,M2B',X2A,X2B
c      write(*,*) 'M3A,M3B',X3A,X3B

DM1A=ABS(X1A-M1A)
DM2A=ABS(X2A-M2A)
DM3A=ABS(X3A-M3A)
DM1B=ABS(X1B-M1B)
DM2B=ABS(X2B-M2B)
DM3B=ABS(X3B-M3B)

```

```

      IF (DM1A.LT.eps.AND.DM2A.LT.eps.AND.DM3A.LT.eps.AND.
&      DM1B.LT.eps.AND.
&      DM2B.LT.eps.AND.DM3B.LT.eps) GO TO 40

      M1A=X1A
      M2A=X2A
      M3A=X3A
      M1B=X1B
      M2B=X2B
      M3B=X3B
GOTO 4

40      YU1= FFL(L2,IZ,M1B,M2B,M3B,K2,K4,D)

      YU2= FFL(L2,IZ,M1A,M2A,M3A,K2,K4,D)
      FF=(-0.5)*LOG(4.*YU1*YU2)

C      Write(*,*) 'SOLUTION'
C      write(*,*) 'M1A,M1B,X1F,X1AF',M1A,M1B,X1F,X1AF
C      write(*,*) 'M2A,M2B,X2F,X2AF',M2A,M2B,X2F,X2AF
C      write(*,*) 'M3A,M3B,X3F,X3AF',M3A,M3B,X3F,X3AF
C      write(*,*) 'M4A,M4B,X4F,X4AF',M4A,M4B,X4F,X4AF
C      write(*,*) 'FF',FF
C      write(*,*) '*****'
      L=L+1
      MX1A(L)=M1A
      MX2A(L)=M2A
      MX3A(L)=M3A
      MX1B(L)=M1B
      MX2B(L)=M2B
      MX3B(L)=M3B
      FX(L)=FF
      IF (L.EQ.1) THEN
        J=1
        MS1A(J)=MX1A(L)
        MS2A(J)=MX2A(L)
        MS3A(J)=MX3A(L)
        MS1B(J)=MX1B(L)
        MS2B(J)=MX2B(L)
        MS3B(J)=MX3B(L)
        FM=FX(L)
        M1A=MS1A(J)
        M2A=MS2A(J)
        M3A=MS3A(J)
        M1B=MS1B(J)
        M2B=MS2B(J)
        M3B=MS3B(J)
      ELSE
        IF (FX(L).LE.FM) THEN
          J=L

```

```

      MS1A(J)=MX1A(L)
      MS2A(J)=MX2A(L)
      MS3A(J)=MX3A(L)
      MS1B(J)=MX1B(L)
      MS2B(J)=MX2B(L)
      MS3B(J)=MX3B(L)
      FM=FX(L)
      M1A=MS1A(J)
      M2A=MS2A(J)
      M3A=MS3A(J)
      M1B=MS1B(J)
      M2B=MS2B(J)
      M3B=MS3B(J)
      END IF
END IF
M4B=(1.+TANH(2*K4*M3A)*TANH(2*K2*M1A)
&      *TANH(IZ*L2*M2A))
&      *(1./(1.+TANH(2*K2*M1A)*TANH(IZ*L2*M2A)
&      *TANH(2*K4*M3A)
&      +(1./(2*exp(D)*COSH(IZ*L2*M2A)
&      *COSH(2*K4*M3A))))))

M4A=(1.+TANH(2*K4*M3B)*TANH(2*K2*M1B)
&      *TANH(IZ*L2*M2B))
&      *(1./(1.+TANH(2*K2*M1B)*TANH(IZ*L2*M2B)
&      *TANH(2*K4*M3B)
&      +(1./(2*exp(D)*COSH(IZ*L2*M2B)
&      *COSH(2*K4*M3B))))))

XL1F=(M1A+M1B)/2.
XL1AF=(M1A-M1B)/2.
XL2F=(M2A+M2B)/2.
XL2AF=(M2A-M2B)/2.
XL3F=(M3A+M3B)/2.
XL3AF=(M3A-M3B)/2.

write(*,*)'*****'
Write(*,*) 'SOLUTION'
WRITE(*,321)
&      M1A,M1B,XL1F,XL1AF,
&      M2A,M2B,XL2F,XL2AF,
&      M3A,M3B,XL3F,XL3AF,
&      M4A,M4B,
&      FM
321  FORMAT (
&1X,'M1A=',F10.7,2X,'M1B=',F10.7,2X,'X1F=',F10.7,2X,'X1AF=',F10.7/
&1X,'M2A=',F10.7,2X,'M2B=',F10.7,2X,'X2F=',F10.7,2X,'X2AF=',F10.7/
&1X,'M3A=',F10.7,2X,'M3B=',F10.7,2X,'X3F=',F10.7,2X,'X3AF=',F10.7/
&10X,'QA=',F10.7,1X,'QB=',F10.7/
&16X,'FM=',F16.8/)
      END

```

```

#####
FUNCTION FFL(L2, IZ, M1B, M2B, M3B, K2, K4, D)
  REAL L2, M1B, M2B, M3B, K2, K4, D, FFL
  INTEGER IZ
  FFL= exp(3.*L2*IZ*M2B+9.*D)*COSH(2.*(3.*K2*M1B+9./2.*K4*M3B))
&    +exp(-3.*L2*IZ*M2B+3.*D)*COSH(2.*(3.*K2*M1B-9./2.*K4*M3B))
&    +exp(3.*L2*IZ*M2B+5.*D)*COSH(2.*(K2*M1B+3./2.*K4*M3B))
&    +exp(-3.*L2*IZ*M2B+5.*D)*COSH(2.*(K2*M1B-9./2.*K4*M3B))
&    +exp(L2*IZ*M2B+5.*D)*COSH(2.*(3.*K2*M1B+1./2.*K4*M3B))
&    +exp(-1.*L2*IZ*M2B+5.*D)*COSH(2.*(3.*K2*M1B-1./2.*K4*M3B))
&    +exp(L2*IZ*M2B+D)*COSH(2.*(K2*M1B+1./2.*K4*M3B))
&    +exp(-1.*L2*IZ*M2B+D)*COSH(2.*(K2*M1B-1./2.*K4*M3B))
END FUNCTION FFL
#####

```

Conclusion Générale

L'approche par la mécanique statistique dans l'étude des transitions de phases est très concluante, elle permet de décrire qualitativement quantitativement les systèmes magnétiques aussi bien ordonnés que désordonnés.

Dans ce travail nous avons abordé les différents types de transitions et les mécanismes qui les expliquent.

Nous avons utilisé la méthode du champ moyen qui est exacte pour des dimensions grandes ($d > 3$) mais présente des aberrations en $d=2$ où les fluctuations deviennent prédominantes. Par cette méthode très utile en mécanique statistique, nous avons étudié le modèle d'Ashkin-Teller à spin-3/2. Nous avons pu écrire les équations des différentes aimantations et le programme fortran qui nous permet de résoudre ces équations.

Bibliographie :

- C . KITTEL , introduction à la physique de l'état solide dunod.
- S . BEKHECHI , Doctorat d'etat es-science , 1999 université Med V -Rabat – MAROC .
- DITZIAN R .V , Banavar , J . R Grest , G . S .and Kadanoff , L . P .(1980).
Physique – Revb 22 , 2542.