

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 HAMANE Radia

Domaine : Science de la matière

Spécialité : Physique des matériaux et nano-composites

Intitulé du projet :

Simulations du Modèle Magnétique de Heisenberg avec Anisotropie et Interactions Dipolaires Incluses.

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 très chers parents, qui ont été toujours à mes côtés et m'ont toujours soutenu tout au long de ces longues années d'études. En signe de reconnaissance, qu'ils se trouvent ici, l'expression de ma profonde gratitude pour tout ce qu'ils ont consenti d'efforts et de moyens pour me voir réussir dans mes études.

A ma chère sœur Katiba, mes chers frères Brahim, et Salim pour leurs encouragements et leurs amours. A ma grand mère Megdouda que dieu la garde pour nous.

A la mémoire, de ma chère grand mère Yamina qui me manque tant, que dieu l'accueille dans son vaste paradis.

A mes tantes, et à tous mes cousins surtout Nawel et Sarah.

A tout mes amis et pour toute la promotion (2015).

Je présente mes remerciements, mon respect et ma gratitude à mes professeurs à l'université qui doivent voir dans ce travail la fierté d'un savoir bien acquis.

Remerciements

Au terme de notre travail : on tient tout d'abord à remercier le bon dieu le tout puissant pour le courage, la patience et la santé qu'il nous a donné pour suivre nos études.

J'exprime ma gratitude et tout mon respect à mon encadreur **Mr H.Zenia**, de m'avoir suivis tout au long de notre travail. Je le remercie pour sa patience, sa disponibilité et surtout ses judicieux conseils. Je tient également à remercier les membres de jury qui ont accepté de juger ce travail et d'y apporter leur caution :

Le président du jury **Mr Y. Kasri** et les membres du jury **Mr A. Houari**, **Mr K. Boufala**. Je désire aussi remercier les professeurs qui m'ont fourni les outils nécessaires à la réussite de mes études universitaires ; spécialement **Mr K. Louzazna** qui est mon enseignant de module Théorie avancée de la matière condensée et du module de physique des semi-conducteurs approfondie, vous m'avez donnée une autre vision pour la physique, Je n'oublierais jamais vos enseignements et votre méthode de travail dont j'espère un jours s'inspirer, un modèle que j'essaierai de suivre dans de ma vie. Merci! .

Résumé

Ce travail se compose de cinq chapitres qui se déclinent comme suit. Les deux premiers sont consacrés à une présentation générale du magnétisme et des modèles magnétiques. Le troisième chapitre contient un résumé sur la méthode de simulation Monte Carlo. Dans le quatrième nous présentons une application de la méthode à un modèle magnétique simple : Modèle d'Ising. Dans le dernier chapitre sont rapportés les résultats de nos simulations Monte Carlo du modèle de Heisenberg avec l'anisotropie et les interactions dipolaires. L'objectif de notre travail consiste à étudier la transition ferromagnétique paramagnétique, ainsi que les transitions entre différentes phases ordonnées résultant de la compétition entre des interactions diverses.

Table des matières

Table des matières	vi
1 Introduction	1
1.1 Historique	1
1.2 Domaines d'Applications du Magnétisme	3
1.2.1 Medecine	3
1.2.2 Electronique et Electrotechnique	3
1.2.3 Informatique	3
1.3 Moments magnétiques et interactions	4
1.3.1 Cas classique : Interaction dipolaire	4
1.3.2 Cas quantique : Échange	4
1.4 Origine des moments sur les atomes	7
1.4.1 Cas d'un ion hydrogénoïde	7
1.4.2 Cas d'un ion ou atome à plusieurs électrons	7
2 Interaction et Modèles Magnétiques	10
2.1 Interactions d'échange et ordre magnétique	10
2.1.1 Ordres magnétiques	11
2.2 Généralité sur les transitions de phase	12
2.2.1 Classifications des Transitions de Phases	12
2.2.1.1 Classifications d'Ehrenfest	12
2.2.2 Théorie de Landau	13
2.2.2.1 Définition du paramètre d'ordre	13
2.2.2.2 Comportement de la chaleur spécifique :	15
2.2.3 Fonction de corrélation-longueur de corrélation	15
2.2.4 Exposants critiques :	16
2.3 Les Modèles Magnétiques	17
2.3.1 Modèle d'Heisenberg	17
2.3.2 Modèle d'Ising	17
2.3.3 Modèle XY :	18

2.4	Approximation du champ Moléculaire de Weiss ou Champ Moyen	19
2.4.1	Validité de la théorie du champ moyen	19
3	Simulation Monte Carlo	21
3.1	Echantillonnage Simple	21
3.2	Echantillonnage par importance	22
3.3	Algorithme de Metropolis	22
3.3.1	Les étapes de déroulement de l'algorithme Metropolis	22
4	Simulation du Modèle d'Ising	25
4.1	Détails de Calculs	25
4.2	Résultats et Discussions du Modèle d'Ising Bidimensionnel	26
4.2.1	Courbes Energie et Aimantation Bidimensionnel	26
4.2.2	Courbe de la Capacité Calorifique et la Susceptibilité Magnétique Bidimensionnel	28
4.2.3	Méthodes pour déterminer la température de transition T_c	30
4.2.4	Mesure des Exposants critiques de l'aimantation	31
4.3	Résultats et Discussions du Modèle d'Ising Tridimensionnel	32
4.3.1	Courbes Energie et Aimantation Tridimensionnel	32
4.3.2	Courbe de la Susceptibilité Magnétique et la Capacité Calorifique	33
4.3.3	Exposants Critiques	35
5	Simulation du Modèle de Heisenberg Avec Anisotropie et Interactions Dipolaires	37
5.1	Introduction	37
5.2	Simulation du modèle de Heisenberg tridimensionnel	37
5.2.1	Détails de calculs	38
5.2.2	Résultats et discussions	39
5.2.2.1	Courbes de l'énergie et de l'aimantation	39
5.2.2.2	Chaleur spécifique et susceptibilité magnétique	41
5.2.2.3	Températures et exposants critiques	43
5.3	Anisotropie uniaxe et planaire	44
5.3.1	Simulations du modèle de Heisenberg anisotrope	44
5.3.2	Résultats et discussions	46
5.3.2.1	La susceptibilité magnétique	46
5.3.2.2	Diagramme de phase	47
5.3.2.3	Aimantation	47
5.4	Modèle de Heisenberg avec anisotropie et interactions dipolaires	48
5.4.1	Le modèle	49
5.4.1.1	Aimantation	51
	Bibliographie	54

1.1 Historique

Le magnétisme est parmi les sciences les plus anciennes. Il a été observé et défini dans la Grèce antique. On tentait d'expliquer l'effet de minerais riches en magnétite (Fe_3O_4). Les Chinois avaient aussi découvert les propriétés magnétiques de la magnétite en 1040. Par la suite ils ont été les premiers à trouver une utilité pratique au magnétisme. En effet, en plaçant une cuillère faite de magnétite sur une surface liquide, on remarquait que cette dernière pointait toujours le sud. On utilisa donc ce nouvel objet (cuillère et bol d'eau) et on lui donna le nom de "pointeur de sud". Depuis, les connaissances dans ce domaine se sont grandement améliorées. L'utilisation de la boussole dans les techniques de navigation daterait du *XIII*^e siècle et son usage était restreint à des navigations côtières à cette époque. Les boussoles faisaient usage du champ magnétique terrestre, c'est pour cela qu'elle peut nous indiquer le pôle magnétique et aussi la direction du pôle géographique terrestre [1].

La première étude sur le magnétisme est attribuée à l'anglais William Gilbert, qui a fait une étude scientifique du magnétisme. Il fut le premier à proposer que la planète Terre est un gigantesque aimant. Le français Charles Coulomb découvrit que la force d'attraction entre les aimants diminuait proportionnellement avec le carré de la distance qui séparait les aimants. Par ici la compréhension du magnétisme prenait forme. Juste après le danois Hans Christian Oersted affirma que l'électricité et le magnétisme étaient intimement reliés.

Vers 1820, François Arago découvrit qu'une boucle de fil parcourue par un courant électronique, peut induire des comportements magnétiques sur un morceau de fer. Juste après André-Marie Ampère suggéra quant à lui que faire plusieurs boucles augmenterait l'efficacité magnétique de la boucle de François Arago. Il découvrit aussi que cet électroaimant influence de façon contraire l'aiguille d'une boussole si on change le sens du courant. L'électroaimant venait de naître. Faraday a inventé le premier système

permettant de créer un mouvement circulaire continu. En 1873, le physicien écossais James Clerk Maxwell a unifié l'électricité et le magnétisme en seulement quelques équations : "Équations de Maxwell".

Pour comprendre les phénomènes magnétiques au niveau microscopique, on s'intéresse à faire une étude sur l'énergie magnétique qui est due à une interaction entre le moment magnétique moyen des dipôles magnétiques avec le champ magnétique local ou externe. Weiss a introduit la notion de champ moléculaire pour rendre compte de l'ordre ferromagnétique. Ce champ supposé imprégner tout le solide est lui-même le résultat de l'alignement des moments dipolaires à l'intérieur du solide. C'est un champ qu'on appellerait de nos jours auto-cohérent ou self-consistent. Il s'avère que ce champ serait exagérément intense s'il existait réellement dans le solide. L'interaction dipolaire connue en physique classique est elle aussi incapable de donner un champ aussi intense. Il a fallu attendre la physique quantique pour expliquer les dessous de l'ordre magnétique dans les solides.

Bohr et van Leuven ont montré que la physique classique est incapable d'expliquer l'ordre magnétique. En effet, même sous l'influence d'un champ magnétique appliqué, une collection de particules libres chargées ne peut exhiber une aimantation non-nulle.

La mécanique quantique est venue pour non seulement résoudre l'énigme de la stabilité des atomes, mais aussi nous éclairer sur l'origine du magnétisme et les mécanismes de l'ordre magnétique. Le magnétisme y est intimement lié aux propriétés intrinsèques des particules élémentaires : électron, proton, neutron¹ ... En effet en plus des autres propriétés telles que la masse et la charge, ses particules possèdent une propriété intrinsèque appelée spin. Le mot spin voulant dire tourner en anglais, on associe le spin à un mouvement de rotation de la particule autour d'elle-même. Ceci n'est pas vraiment le cas, mais cette analogie entre les objets classiques tels les planètes tournant à la fois autour du soleil et autour d'elles-mêmes, est parfois utile pour illustrer des propriétés associées au mouvement de l'électron par exemple. On peut imaginer le mouvement de l'électron autour du proton dans l'atome d'hydrogène comme étant similaire à celui d'une planète autour du soleil. En effet de même que pour les planètes on associe à ce mouvement un moment cinétique dit orbital. Quant au moment cinétique de spin de l'électron, il est assimilé au moment cinétique de rotation d'une planète autour d'elle-même. On peut pousser un peu loin cette analogie, du moins pour ce qui est de l'électron : si on considère que l'électron possède une forme sphérique, et que sa charge électrique est répartie uniformément sur la surface, alors la rotation de l'électron autour de lui-même donne naissance à un courant électrique. Ce courant à son tour, et c'est la physique classique qui le prescrit, va donner naissance à un dipôle magnétique. C'est le moment magnétique de spin reconnu en mécanique quantique. Quant au mouvement orbital de l'électron et qui lui aussi donne naissance à une boucle de courant, on lui associe alors un moment magnétique orbital.

Il est à noter aussi que les autres particules constituant l'atome (proton et neutron qui forment le noyau) possèdent leur moments magnétiques associés. On parle de moment magnétique nucléaire. En

1. A noter que le proton et le neutron ne sont pas élémentaires au sens strict. Mais en physique des basses énergie on peut les considérer comme telles.

valeur absolue, ces moments sont bien inférieurs à celui de l'électron. Ceci est due à la présence de la masse de la particule au dénominateur du rapport gyromagnétique, et que la masse de l'électron est bien plus petite que celles du proton et du neutron. Cependant, et malgré leur faible magnitude, les moments nucléaires sont exploités dans plusieurs domaines, aussi bien fondamentaux (diffusion des neutrons) que pratique (Imagerie par Résonance Magnétique).

Dans la suite de ce manuscrit nous nous limiterons aux seules propriétés qui sont le fait des électrons : leurs spins et leurs mouvements orbitaux.

1.2 Domaines d'Applications du Magnétisme

1.2.1 Medecine

Dans la branche de l'imagerie en médecine, la résonance Magnétique est l'application la plus connue. L'IRM est une technique de visualisation non invasive basée sur la Résonance Magnétique Nucléaire. Elle n'est devenue possible que grâce aux progrès de l'électronique et de l'informatique, couplés au développement des matériaux supraconducteurs qui permettent de produire de champs magnétique élevés. Une technique similaire, c'est la Résonance de Spin Electronique, est couramment utilisée comme moyen d'analyse d'échantillons biologiques. L'autre champ d'application du magnétisme, en constant développement, est celui de l'utilisation des particules micro ou nano magnétiques dans le cadre thérapeutique [2].

1.2.2 Electronique et Electrotechnique

Parmi les premières applications basée sur la compréhension des phénomènes magnétique, on prend l'exemple d'un moteur électrique. Avec les alternateurs et les transformateurs, c'est un champ d'application très large des matériaux magnétiques doux. Ils font principalement appel à la loi de Laplace. Parmi leurs principaux domaines d'utilisation ont peut citer : les machines outils, les robots et appareillages industriels, le transport (trains, tramways, véhicules électriques, etc...), les divers appareillages automobiles (démarreur, essuie glace, lève vitre, ventilateur, pompe à carburant, etc...), l'électroménager, les jouets, l'horlogerie (montre à quartz à aiguilles)[2].

1.2.3 Informatique

Le stockage de l'information est un des grands domaines d'applications du magnétisme. L'information peut être inscrite en orientant localement l'aimantation dans deux directions possibles, en réalisant un stockage binaire, sur des couches magnétiques continues, dans quelque années on utilisera une assemblées de plots magnétiques de dimension nanométrique dont chacun portera un ou plusieurs bits d'information. En ce qui concerne la lecture de l'information, des matériaux magnéto-résistifs ont été élaborés. Ces derniers utilisent les propriétés associées aux moment magnétique élémentaire des spins des électrons. Ils permettent de réaliser des capteurs de champ magnétique ultrasensibles capables de

relire le champ magnétique régnant à la surface des disques durs et d'en déduire l'information qui y est écrite.

La réalisation de ces progrès fait suite à une compréhension approfondie de certains phénomènes magnétiques spécifiques, par exemple l'instabilité de l'aimantation liée aux fluctuations thermiques, l'évolution des propriétés magnétiques lorsque la dimension latérale du système devient comparable ou inférieure à certaines longueurs caractéristiques du magnétisme.

1.3 Moments magnétiques et interactions

1.3.1 Cas classique : Interaction dipolaire

À une boucle d'aire S parcourue par un courant électrique d'intensité I est associé en physique classique un moment dipolaire de $\mu = IS$.

Si nous avons deux dipôles $\boldsymbol{\mu}_1$ et $\boldsymbol{\mu}_2$ localisés aux points \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 respectivement, ils interagissent et leur énergie est donnée par :

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2}{r_{12}^3} - 3 \frac{(\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\boldsymbol{\mu}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})}{r_{12}^3} \right], \quad (1.1)$$

où $r_{12} = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$, et $\hat{\mathbf{r}}_{12} = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)/r_{12}$, et μ_0 est la perméabilité magnétique.

Il s'avère que cette interaction est bien trop faible pour rendre compte de l'ordre magnétique qui, dans certaines substances, a lieu à des températures de l'ordre de mille degrés Kelvins. Il est nécessaire d'explicitier à ce niveau le lien entre les interactions et la température, dite de transition, à laquelle le système s'ordonne magnétiquement. Si le maximum de l'énergie d'interaction entre deux dipôles voisins est de J , alors d'après la théorie du champ moyen (voir chapitre deux), la température de transition est de l'ordre de $T_C = zJ/k_B$, où k_B est la constante de Boltzmann, et z est le nombre de premiers voisins : $z = 4, 12, 8$ pour un réseau cubique simple, cubique à face centré, ou cubique centré, respectivement. Si on prend alors le cas de deux dipôles de un magnéton de Bohr μ_B , chacun² et distants de un Å, le maximum de leur interaction dipolaire est d'environ 10^{-23} J, ce qui est équivalent à une température de $1K$. [3]

Dans ce qui suit nous introduirons les concepts pour comprendre le magnétisme des solides à partir de leurs constituants : atomes et électrons.

1.3.2 Cas quantique : Échange

On prend le cas simple deux électrons libres dans une boîte cubique. L'hamiltonien est alors donné par

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} [\nabla_1^2 + \nabla_2^2] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|r_1 - r_2|}, \quad (1.2)$$

2. C'est la valeur du moment dipolaire associé au spin de l'électron. On peut dire que le μ_B est l'équivalent d'un moment magnétique élémentaire, au même titre que e est la charge élémentaire de l'électron.

où le premier terme est la somme des énergies cinétiques des deux électrons, et le deuxième terme est l'interaction coulombienne entre eux. Pour décrire l'état des deux électrons on peut supposer que le premier est dans une orbitale $\varphi_a(\mathbf{r})$ et que le deuxième est dans une orbitale $\varphi_b(\mathbf{r})$. Les électrons sont des fermions et par conséquent leur fonction d'onde totale doit être antisymétrique par rapport à l'échange de leurs coordonnées. Le produit $\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2)$, n'est en général ni symétrique ni antisymétrique. On peut cependant définir deux fonctions, une symétrique ($\Phi_{\text{sym.}}$) et une antisymétrique ($\Phi_{\text{antisym.}}$), comme ceci :

$$\begin{aligned}\Phi_{\text{sym.}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)] \\ \Phi_{\text{antisym.}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)]\end{aligned}\quad (1.3)$$

Pour nos deux électrons il faut, en plus de cette partie spatiale, tenir compte de leurs spins pour une description complète de leur état. La fonction d'onde de spin doit elle aussi être symétrique ou antisymétrique si on veut la combiner avec la partie orbitale pour donner une fonction d'onde totale ; qui elle doit être toujours antisymétrique. À partir des quatre états de spins possibles : $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, et $|\downarrow\downarrow\rangle$, on peut construire un état (singulet) :

$$\chi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (1.4)$$

antisymétrique, et trois états (un triplet) symétriques

$$\chi_T = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]/\sqrt{2} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (1.5)$$

Pour décrire l'état des deux électrons maintenant, on peut combiner une fonction d'onde orbitale et une fonction d'onde de spin de façon à avoir toujours une fonction d'onde totale antisymétrique. On leur donne le nom qui correspond à la partie spin : Ψ_S et Ψ_T pour l'état singulet et l'état triplet, respectivement. Ils ont pour définition

$$\begin{aligned}\Psi_S(1, 2) &= \Phi_{\text{sym.}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \otimes \chi_S \\ \Psi_T(1, 2) &= \Phi_{\text{antisym.}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \otimes \chi_T\end{aligned}\quad (1.6)$$

Les énergies correspondant à ces états sont

$$\begin{aligned}E_S &= \int \Psi_S^* \hat{\mathcal{H}} \Psi_S d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ E_T &= \int \Psi_T^* \hat{\mathcal{H}} \Psi_T d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\end{aligned}\quad (1.7)$$

En absence de l'interaction coulombienne, les deux états, $\Psi_S(1, 2)$ et $\Psi_T(1, 2)$ ont la même énergie : $E_S = E_T$. La présence de l'interaction coulombienne va lever cette dégénérescence. Il est en effet facile de voir que dans l'état triplet la fonction d'onde totale s'annule quand $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, c'est à dire quand

les deux électrons se trouvent au même endroit. Ceci n'est pas le cas pour l'état singulet. Comme l'interaction coulombienne est maximale (singulière) quand $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, on voit que sa contribution à E_S est plus importante que sa contribution à E_T . La différence entre les deux est donnée par

$$E_S - E_T = 2 \int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \hat{\mathcal{H}} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (1.8)$$

On voit que malgré le fait que l'hamiltonien des deux électrons est indépendant du spin, le résultat final que l'énergie du système des deux électrons dépend bien de leur état de spin. La différence $E_S - E_T$ est ce qu'on appelle l'énergie d'échange. Le nom échange vient du membre droit de l'équation où on voit \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 échanger de places.

On peut maintenant paramétriser l'énergie d'échange à l'aide du produit scalaire $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$. En effet on a

$$2 \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2 - (\mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2) = \mathbf{S}^2 - (\mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2).$$

L'état singulet correspond à un spin total ayant une valeur propre $S = 0$, et les états triplets correspondent à un spin total de valeur propre $S = 1$. Le module du spin au carré est tel que $\mathbf{s}_1^2 = \mathbf{s}_2^2 = s(s+1)\hbar^2 = 3\hbar^2/4$, pour les deux électrons. Pour le spin total on a $\mathbf{S}^2 = S(S+1)\hbar^2$ et a deux valeurs possibles : $\mathbf{S}^2 = 0$ pour l'état singulet et $\mathbf{S}^2 = 2\hbar^2$ pour les états triplet. Ceci donne deux valeurs possibles pour le produit scalaire $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$, à savoir $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = -3\hbar^2/4$ pour l'état singulet et $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = +\hbar^2/4$ pour les états triplet. Si on prend $\hbar = 1$, alors on peut écrire l'hamiltonien effectif des deux électrons comme

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff.} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T)\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2. \quad (1.9)$$

Le premier terme est une constante qu'on peut absorber dans les autres termes constants de l'énergie, et le deuxième terme dépend de l'état de spin des deux électrons. On peut donc réécrire l'hamiltonien effectif sous la forme

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff.} = -2J\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2, \quad (1.10)$$

où la constante (ou bien l'intégrale) d'échange est définie par

$$J = \frac{E_S - E_T}{2}. \quad (1.11)$$

Dans le cas général cette intégrale peut être positive ou négative.

Si $J > 0$, c'est à dire $E_S > E_T$ et c'est l'état triplet $S = 1$ qui est favorisé. Par contre si $J < 0$, c'est à dire $E_S < E_T$ et c'est l'état singulet $S = 0$ qui est favorisé. On fait alors l'analogie avec des moments classiques et on va dire que dans le premier cas $S = 1$, les deux électrons préfèrent avoir leurs spins parallèles l'un à l'autre. Dans le deuxième cas $S = 0$ les spins préfèrent être antiparallèles [3]. Dans le second chapitre, nous généraliseront cet hamiltonien pour un système de N ions magnétiques, ce qui donnera le modèle de Heisenberg.

1.4 Origine des moments sur les atomes

1.4.1 Cas d'un ion hydrogénoïde

On sait maintenant que la majorité des propriétés magnétiques des solides sont dues aux électrons qui le constituent. On commence ici par le cas d'un ion hydrogénoïde possédant un seul électron pour définir dans la simplicité les quantités que nous allons rencontrer plus loin. Les électrons ainsi que la plupart des particules élémentaires ont un moment intrinsèque, appelé spin. Le moment cinétique de spin de l'électron est un vecteur (\mathbf{s}) qui peut avoir deux valeurs uniquement lorsqu'il est projeté sur un axe de quantification : $m_s = \pm\hbar/2$. Au mouvement de l'électron dans un atome est associé également un moment cinétique \mathbf{l} . La projection de \mathbf{l} sur un axe de quantification peut prendre $2l + 1$ valeurs possibles : $m_l = \pm l, \pm(l - 1), \dots, 0$. A ce mouvement "circulaire" est associé un courant électrique, à cause de la charge de l'électron. Ce courant donne alors naissance à un moment magnétique orbital :

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{|e|\hbar}{2m}\mathbf{l} = -\mu_B\mathbf{l}, \quad (1.12)$$

où μ_B est le magnéton de Bohr. La valeur absolue du moment magnétique orbital est

$$|\boldsymbol{\mu}_l| = \mu_B\sqrt{l(l+1)},$$

et sa projection sur un axe de quantification z (généralement pris comme l'axe d'un champ magnétique externe) est

$$\mu_{lz} = -m_l\mu_B.$$

Le moment cinétique de spin est associé à son moment/dipôle magnétique. Les moments magnétiques orbitaux de spin sont à l'origine de la plupart des propriétés magnétiques macroscopiques des matériaux. Le moment magnétique de spin d'un électron est donné par :

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g_e\frac{|e|\hbar}{2m}\mathbf{s} = -g_e\mu_B\mathbf{s}, \quad (1.13)$$

où g_e est un facteur supplémentaire (absent dans le cas orbital) et a pour valeur $g_e = 2.0023 \approx 2$. La projection du moment de spin sur un axe de quantification z est

$$\mu_{sz} = \pm\mu_B.$$

Le moment magnétique total de l'atome ou de l'ion est bien sur la somme vectorielle des moments magnétiques orbital et de spin : $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s$. L'état fondamental est caractérisé par $n = 1$, et $l = 0$, et par conséquent il ne reste que le moment de spin. Des complications vont apparaître quand on a affaire à des atomes ou ions à plusieurs électrons, et c'est le sujet de ce qui suit.

1.4.2 Cas d'un ion ou atome à plusieurs électrons

Nous avons jusqu'à présent parlé uniquement du cas d'un atome ou ion possédant un seul électron. Le moment orbital étant nul dans l'état fondamental, le moment magnétique vient entièrement du moment de spin. Cependant la situation devient compliquée dès qu'on a affaire à plus d'un électron.

Pour le cas de plusieurs électrons. Les moments cinétiques orbitaux s'additionnent pour donner le moment résultant orbital, proportionnel au nombre quantique L . De même, les moments cinétiques de spin s'additionnent pour donner le moment résultant de spin, proportionnel au nombre quantique S . Le moment cinétique total résultant est alors donné par :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (1.14)$$

le moment magnétique total est donné par :

$$\mu_{Atom} = g_j \mu_B \sqrt{J(J+1)}. \quad (1.15)$$

Les moments cinétiques orbitaux et les moments de spins s'additionnent pour donner :

$$\begin{cases} \mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i \\ \mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i \end{cases} \quad (1.16)$$

Il y a plusieurs manières de combiner les \mathbf{l}_i et les \mathbf{s}_i pour obtenir \mathbf{L} et \mathbf{S} . On a vu plus haut que déjà dans le cas de deux électrons : $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ et \mathbf{S} peut prendre deux valeurs possibles : $\mathbf{S} = 0$ (singulet) et $\mathbf{S} = 1$ (triplet). On peut construire l'état fondamental d'un atome ou ion en plaçant un électron par état quantique à un électron, et par ordre croissant des énergies. Chaque état à un électron est caractérisé par la donnée des nombres quantiques : n, l, m_l, m_s . Le couple (n, l) détermine ce qu'on appelle une couche atomique. Chaque couche peut héberger $2(2l+1)$ électrons. Si une couche est pleine alors \mathbf{L} et \mathbf{S} correspondant s'annulent. On déduit alors que les couches pleines ne contribuent pas au magnétisme. Pour déterminer le moment magnétique associé à un atome ou un ion à l'état fondamental on'a qu'à déterminer la contribution des couches qui ne sont pas pleines. En générale les électrons occupent les orbitaux (état d'un seul électron $|n, l, m_l, m_s\rangle$) de sorte à minimiser leurs énergies d'interactions coulombiennes. On a vu plus haut comment cette interaction, et pour le cas de deux électrons, peut favoriser un état de spin (singulet ou triplet) par rapport à un autre. Dans un atome à plusieurs électrons on retrouve ces effets, mais leurs études est beaucoup plus complexe. Il existe cependant un ensemble de règles empiriques simples qui permettent de déterminer le L et le S de l'état fondamental (uniquement). On les appelle les règles de Hund :

- Pour une configuration électronique donnée, le terme de plus faible énergie est celui maximisant le spin total S .
- Pour un spin total donné, le terme de plus faible énergie est celui de plus grande valeur de L ,
- un atome ayant sa couche externe à moitié pleine ou moins, le niveau de plus faible énergie, est celui minimisant J . Dans un atome ayant sa couche externe plus qu'à moitié pleine, le niveau de plus faible énergie est celui de J plus élevé.

Il est à remarquer bien sûr que les règles de Hund ne sont pas toujours valides, surtout lorsque l'ion considéré se trouve dans un solide où le champ cristallin est fort. Au fait même dans les ions libres ayant une très forte interaction spin-orbite les règles de Hund ne sont pas valides. À présent nous avons quelques définitions de qualité.

L'aimantation et la susceptibilité magnétique :

L'aimantation est le moment par unité de volume

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_i \boldsymbol{\mu}_i, \quad (1.17)$$

la susceptibilité magnétique à H constant est définie par

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (1.18)$$

Energie interne et chaleur spécifique :

L'énergie libre F du système est donnée par :

$$F = E - TS \quad (1.19)$$

F est liée à l'énergie interne E et l'entropie S , la chaleur spécifique à H constant du système est donnée par :

$$C_H = \frac{\partial U}{\partial T}. \quad (1.20)$$

Pour un système à l'équilibre thermodynamique avec un réservoir de chaleur à la température T , l'énergie libre est minimale. On voit qu'à température nulle, $F = \langle E \rangle$, et l'équilibre est caractérisé par l'énergie interne $\langle E \rangle$. Cette configuration correspond en générale à un état fondamental unique, ce qui donne également $S = 0$ à $T = 0$. On dit alors que le système est ordonné. Quand la température est suffisamment élevée, le terme TS dans F l'emporte sur le terme $\langle E \rangle$, et le système choisit les configurations qui maximisent S . Ce maximum de S est appelé désordre. En général on a une compétition entre deux tendances : l'ordre qui est représenté par $\langle E \rangle$ et le désordre qui est représenté par TS .

2.1 Interactions d'échange et ordre magnétique

Nous avons vu dans le chapitre précédent qu'on peut décrire un système de deux électrons en interaction a un hamiltonien effectif :

$$\mathcal{H}_{eff.} = -J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (2.1)$$

Nous avons également vu qu'un certain nombre d'atomes et d'ions à l'état libre ou dans un solide présentent un moment magnétique non-nul à l'état fondamental. Dans les systèmes isolants le moment magnétique reste localisé sur l'atome magnétique. Dans le cas des conducteurs, le magnétisme est porté par les électrons de conduction qui sont délocalisés. On parle dans ce cas de magnétisme itinérant. Dans la suite de ce travail nous nous intéressons au cas des isolants. On peut alors généraliser l'hamiltonien effectif de deux électrons à celui de deux ions magnétique.

Au lieu de \mathbf{J} on utilise \mathbf{S} pour se référer au moment cinétique totale d'un ion magnétique. Ainsi l'interaction mutuelle entre les deux ions magnétiques 1 et 2 sera elle ainsi représentée par l'équation 2.1.

On adopte un langage classique et on dira que si $J > 0$, les deux moments sur les deux ions vont préférer être parallèles, et si au contraire $J < 0$, les deux moments vont préférer être antiparallèles.

Pour une collection de N ions magnétiques dans un solide, on généralise l'hamiltonien précédent pour donner :

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

Dans la suite de ce travail nous nous intéressons aux cas où les ions magnétiques occupent les sites d'un réseau cristallin : CS ou CC par exemple. Nous nous limiterons aussi au cas où l'interaction d'échange

J_{ij} ne dépend pas de la direction spatiale. On aura alors obtenu le hamiltonien de Heisenberg :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{heis.}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.3)$$

où $\langle ij \rangle$ veut dire que seuls les spins proches voisins sont inclus dans la somme.

Une précision s'impose à ce stade : il y a deux manières de regarder le modèle de Heisenberg. La plus simple est de considérer les \mathbf{S}_i comme des vecteurs classiques, et on l'appelle le modèle résultant "Heisenberg classique". L'autre consiste à considérer les \mathbf{S}_i comme des opérateurs quantiques qui ne commutent pas, c'est le modèle de Heisenberg quantique. C'est un modèle très difficile à étudier. Dans ce travail nous nous intéressons au modèle de Heisenberg classique ferromagnétique, $J > 0$ et isotrope.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.4)$$

2.1.1 Ordres magnétiques

Aux très basses températures ($T \approx 0K$), le système choisit la configuration qui minimise l'énergie interne. Il est facile de voir dans le cas du modèle de Heisenberg avec $J > 0$, que cette configuration correspond à un alignement parallèle de tous les moments magnétiques. C'est ce qu'on appelle ordre ferromagnétique. À $T = 0$ l'aimantation est maximale. À mesure que la température augmente, l'équilibre pour un système en situation canonique correspond au minimum de l'énergie libre : $F = \langle E \rangle - TS$. Le système aura donc à favoriser les configurations qui donnent une entropie élevée. Et à très hautes températures le terme TS devient beaucoup plus important devant $\langle E \rangle$. L'entropie est alors maximale est ceci correspond à une aimantation nulle, puisque chaque moment a autant de chance de s'orienter dans n'importe quelle direction de l'espace, ce qui donne une phase paramagnétique.

Pour le cas où $J > 0$, il y'a un passage d'une aimantation nulle à haute température (phase paramagnétique) à une aimantation maximale (phase ferromagnétique) à basse température. On parle donc de transition de phase magnétique. Le cas où $J < 0$ n'est pas aussi simple, mais si le réseau est (bipartite), alors chaque moment a tendance à s'orienter de manière antiparallèle à ses voisins.

Aux basses températures donc on obtient un ordre antiferromagnétique. Là aussi, à très hautes températures c'est la phase paramagnétique qui correspond à l'équilibre. De même que pour le cas ferromagnétique on aura ici une transition de phase : phase paramagnétique à haute température et phase anti-ferromagnétique à basse température.

Pour le cas où $J < 0$ et si le réseau n'est pas bipartite, on ne peut pas arranger les moments de façon à être antiparallèle chacun avec ses voisins. On obtient alors un système dit "frustré". Dans le cas du modèle de Heisenberg quantique et pour $J > 0$, l'état où tous les spins sont parallèles est l'état fondamental. Par contre dans le cas où $J < 0$, l'état où chaque spin est antiparallèle à ses voisins n'est même pas un état propre de l'hamiltonien. Il ne peut alors être l'état fondamental. On voit alors toute la difficulté qu'il y'a à étudier le modèle quantique.

2.2 Généralité sur les transitions de phase

L'étude des transitions de phase est un des domaines les plus importants en physique de la matière condensée. D'une manière générale il existe deux types de transitions cité ci-dessous :

1. au point de transition les deux phases sont en équilibre en présence de l'une et de l'autre. Par exemple la fusion et la vaporisation nécessitent une chaleur latente, ce qui se traduit par une variation discontinue de l'entropie lorsqu'on passe d'une phase à l'autre.
2. au point de transition, on passe continûment d'une phase à l'autre, sans que les deux phases ne soient jamais en équilibre, en présence de l'une et de l'autre [4]. Par exemple dans les transitions magnétiques on cite un exemple : transitions ordre-désordre dans les alliages.

2.2.1 Classifications des Transitions de Phases

2.2.1.1 Classifications d'Ehrenfest

La première classification est celle proposée par Ehrenfest en 1933, où il a traité les transitions de phase du second et premier ordre.

Transition de phase du premier ordre :

Une transition du premier ordre est caractérisée par l'existence d'une chaleur latente non nulle, et plus généralement par une discontinuité des grandeurs physiques, l'entropie par exemple, reliées à des dérivées premières du potentiel thermodynamique.

Transition de phase du second ordre :

Une transition du second ordre est caractérisée par une divergence des grandeurs physiques, (la chaleur spécifique par exemple), reliées à des dérivées secondes du potentiel thermodynamique.

En général si la discontinuité est observée dans une dérivée d'ordre supérieure au premier, la transition est dite continue.

Lors d'une transition de premier ordre, deux phases distinctes stables coexistent à la température de transition, le phénomène est accidentel ; on peut observer une hystérésis, c'est-à-dire un retard à la transition. Au contraire, lors d'une transition du second ordre, on observe une seule phase à la température critique : c'est la phase critique, qui est intrinsèquement stable mais à la limite de la stabilité [5] ; les deux phases ne coexistent jamais et il ne peut y avoir d'hystérésis.

Cette classification est vérifiée pour les transitions de premiers ordre, par contre celles de deuxième ordre, les transitions ne vérifient pas systématiquement la condition d'Ehrenfest relative au second ordre car la chaleur spécifique peut avoir, pour certains systèmes, des divergences et non des discontinuités.

2.2.2 Théorie de Landau

En 1937, Landau a proposé une autre classification des transitions de phase, particulièrement pour les transitions de deuxième ordre. Elle est basée sur le fait que ce type de transition s'accompagne d'un changement de symétrie du système. C'est le cas, par exemple, de la transition ferromagnétique-paramagnétique (la phase paramagnétique est isotrope). À ce changement de symétrie, il associa la notion de **paramètre d'ordre** m .

2.2.2.1 Définition du paramètre d'ordre

Un paramètre d'ordre est un coefficient proposé par Landau, qui est utilisé pour caractériser une phase d'un système physique quelconque. Pour chaque système, on peut définir un paramètre d'ordre qui est nul pour $T > T_c$ et non nul pour $T < T_c$.

La définition du paramètre d'ordre m se fait au cas par cas. Cette grandeur peut être de nature différente :

- un scalaire (dimension 1), comme la transition liquide-vapeur ($\rho_l - \rho_g$).
- un vecteur (dimension 3), comme l'aimantation \mathbf{M} pour la transition ferromagnétique-paramagnétique, différente de 0 au dessous de la température de Curie et nulle au-dessus.
- un champ scalaire complexe (dimension 2) dans le cas des transitions fluide-superfluide ou conducteur-supraconducteur ; cette fonction complexe de la position \mathbf{r} traduit l'amplitude de probabilité de trouver en \mathbf{r} une particule dans un condensat de Bose-Einstein, ou une paire de Cooper.

Dans cette théorie on décrit souvent une transition de phase de second ordre supposée initialement continue et caractérisée par un paramètre d'ordre m nul dans la phase symétrique de haute température, et non nul au dessous du point de transition dans la phase moins symétrique. À la température T , l'état d'équilibre stable correspond à une valeur de m qui minimise l'énergie libre $F(T, m)$.

Soit T_0 la température de transition, on doit avoir :

$$m = 0 \text{ si } T > T_0 \text{ et } m \neq 0 \text{ si } T < T_0 .$$

Le paramètre d'ordre étant supposé continu¹ à T_0 , on décrit un développement de la fonction $F(T, m)$ en puissances de m au voisinage de T_0

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

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 ci-dessous, on représente

1. Pour plus de détail voir [6] page 201 à 203 chapitre 11.

schématiquement l'évolution de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre pour différentes températures, dans le cas d'une transition de phase continue (second ordre).

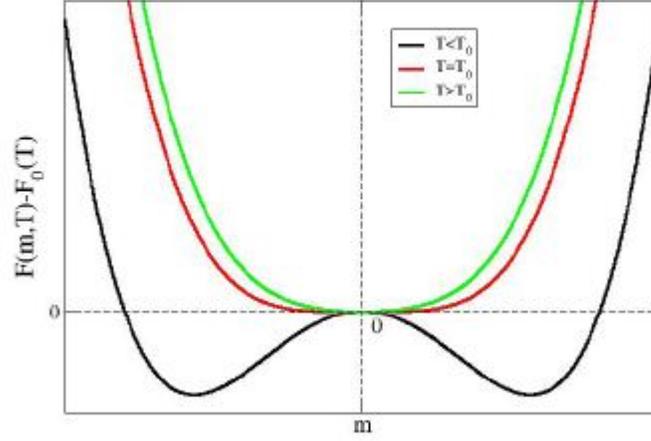


FIGURE 2.1: Variation de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre m dans le cas d'une transition continue de second ordre.

Pour $T > T_0$, l'énergie libre est minimale pour $m = 0$; aussi le développement précédent ne comporte pas de terme du premier degré en m (car il n'est pas invariant par tous les opérateurs de symétrie). En outre, $A(T)$ doit être positif.

En revanche, pour $T < T_0$, l'énergie libre est minimale pour une valeur de $m \neq 0$ et $A(T)$ doit être négatif, de plus elle représente la concavité de $F(m, T)$ en $m = 0$. Sachant qu'elle est positive pour $T > T_0$, négative pour $T < T_0$, elle doit être nulle au point de transition, par conséquent, $A(T_0) = 0$. La fonction $A(T)$ la plus simple qui satisfait toutes ces conditions est $A(T) = a(T - T_0)$, où la constante a est positive. C'est naturellement cette expression qui avait été initialement retenue par Landau².

Pour une transition de phase du deuxième ordre, le développement au voisinage de T_0 est de la forme suivante

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

où c est une constante positive. À une température donnée, l'état d'équilibre stable correspond à une valeur de m qui minimise l'énergie libre. Pour trouver m on résout l'équation suivante :

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 2a(T - T_0)m + 4cm^3 = 0, \quad (2.7)$$

- si $T > T_0$ on a une seule solution $m = 0$.
- si $T < T_0$ on a trois solutions $m = 0$, $m = \pm \sqrt{a(T_0/2c)}$.

2. voir[7] page 171 à 179.

Ces résultats apparaissent clairement sur la figure 2.1, à $T < T_0$ la solution $m = 0$ est à rejeter, car elle correspond à un maximum d'énergie donc à un état d'équilibre instable. Le résultat qui découle de cette approche est, qu'au voisinage de T_0 , le paramètre d'ordre se comporte comme $m \propto \sqrt{T_0 - T}$. Notons que les deux états ordonnés pour lesquels $m > 0$ et $m < 0$ sont de même énergie. Ils correspondent, par exemple, pour les ferromagnétiques à deux sens possibles de l'aimantation.

2.2.2.2 Comportement de la chaleur spécifique :

Par définition, la chaleur spécifique est donnée par la relation

$$C_P = T \left[\frac{dS}{dT} \right]_P,$$

ou par

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - am^2.$$

Dans la phase de haute symétrie, m est identiquement nul et, au voisinage de T_0 , la chaleur spécifique est donnée par

$$C_P = \left[-T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right]_{T=T_0}.$$

Dans la phase de basse symétrie, il faut tenir compte du terme en m^2 dans l'entropie et, au voisinage de T_0 , la chaleur spécifique est donnée par :

$$C_P = \left[-T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right]_{T=T_0} + a^2 \frac{T_0}{2c}. \quad (2.8)$$

À la température de transition T_0 , la chaleur spécifique est discontinue. Au voisinage de T_0 , sa valeur pour $T \lesssim T_0$ est supérieure à sa valeur pour $T \gtrsim T_0$.

2.2.3 Fonction de corrélation-longueur de corrélation

La fonction de corrélation³ est une quantité importante dans l'étude des transitions de phase, elle est définie par[9] :

$$G(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \quad (2.9)$$

$\langle \dots \rangle$ dénote la moyenne thermique, \mathbf{S}_0 signifie le spin choisi à l'origine, et $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ est le spin à la position \mathbf{r} . La fonction de corrélation est utilisée dans les systèmes magnétiques homogènes, dont elle dépend que du paramètre \mathbf{r} dans le cas d'un système isotrope. $G(\mathbf{r})$ est nul dans le cas d'une phase désordonnée (paramagnétique) où $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ et \mathbf{S}_0 sont indépendants (leurs fluctuations ne sont pas corrélées), et la température du système n'est pas au voisinage de la température de transition T_c , en outre la distance \mathbf{r} qui sépare les deux spins est grande. Par contre dès que le système s'approche de T_C de côté des hautes températures, les spins s'interagissent entre eux, par conséquent la fonction $G(\mathbf{r})$ pour les spins voisins devient non nul. On définit la longueur de corrélation " ξ " comme étant la distance

3. voir[8]page [76à 83]

au-delà de laquelle la fonction $G(\mathbf{r})$ est négligeable. Lorsque la distance entre deux spins est au dessous de " ξ ", les fluctuations sont corrélées et elle est engendrer par les spins intermédiaire ; c'est-à-dire de proche en proche. La relation qui décrit la dépendance de la fonction de corrélation avec la longueur de corrélation est définit par

$$G(r) = A \frac{\exp(-r/\xi)}{r^{(d-1)/2}}, \quad (2.10)$$

où d est une dimension spatial, A est une constante. Dans le cas des transitions de phase de second ordre, à la température critique la longueur de corrélation ξ diverge (tend vers l'infinie), c'est-à-dire que tous les spins sont corrélés (un spin est corrélé avec un autre spin à une grande distance (infinie)) ; par contre dans le cas des transitions de premier ordre la longueur de corrélation est finie.

2.2.4 Exposants critiques :

Des résultats expérimentaux très précis ont révélé le fréquent désaccord entre "la théorie de Landau" et les résultats expérimentaux, au voisinage immédiat du point de transition. Car en réalité, cette théorie de Landau permet de décrire les ruptures de symétrie qui peuvent s'opérer lors d'une transition de phase. Si on utilise l'hypothèse assez simple, que le terme $A(T)$ peut s'écrire sous la forme

$$A(T) = a(T - T_0), \quad (2.11)$$

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 suivante : $m \sim (T_0 - T)^\beta$ prend la valeur de $1/2$, ce qui n'est souvent pas obtenu expérimentalement au voisinage de T_0 .

Par exemple, de nombreuses substances magnétiques ont, au voisinage de la température T_0 , une chaleur spécifique qui diverge d'une manière logarithmique suivante : $\log |T_0 - T|$, une susceptibilité magnétique qui se comporte comme $|T_0 - T|^{-4/3}$ et une aimantation qui s'annule comme $|T_0 - T|^{1/3}$.

Afin d'étudier le comportement de ces grandeurs physiques singulières au voisinage immédiat d'un point de transition du second ordre, on peut les représenter par une puissance de $|T_0 - T|$. Chaque grandeur est ainsi caractérisée par un exposant appelé exposant critique :

$$\Delta C_P \sim |T_0 - T|^{-\alpha}$$

$$m \sim |T_0 - T|^\beta$$

$$\chi \sim |T_0 - T|^{-\gamma}$$

À partir de la relation de l'énergie libre décrit par la technique de groupe de normalisation, on obtient **les fonctions scaling** en fonction de la taille L du système, et elles sont réduites à des constantes à la température critique, elles sont définit comme suite :

$$C_v(L, T) \propto L^{\alpha/\nu} \quad (2.12)$$

$$M(L, T) \propto L^{-\beta/\nu} \quad (2.13)$$

$$\chi(L, T) \propto L^{-\gamma/\nu} \quad (2.14)$$

Nombreux sont les auteurs à avoir suggéré que ces exposants n'étaient pas indépendants :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

Qui semble être justifiée dans de nombreux cas [10].

2.3 Les Modèles Magnétiques

2.3.1 Modèle d'Heisenberg

En 1928 Heisenberg a formulé un modèle qui décrit les interactions entre les spins voisins \mathbf{S}_i et \mathbf{S}_j qui conduit à un ordre d'ordre ferromagnétique, et ses spins sont localisés aux sites \mathbf{r}_i et \mathbf{r}_j qui s'écrit sous la forme suivante

$$U = -J \cdot \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (2.15)$$

où i et j représentent la position des spins \mathbf{S} sur le plan ; J est l'intégrale d'échange qui représente l'interaction Coulombienne, et il dépend de la distance entre les spins. On considère le cas le plus simple où les interactions sont limitées entre les spins les plus proches et que ces dernières sont identiques, égales à J . Dans ce cas l'hamiltonien s'écrit [11]

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j. \quad (2.16)$$

Dans le modèle de Heisenberg le spin \mathbf{S}_i est traité comme un vecteur à trois dimensions. C'est important de distinguer entre les dimensions de plan de chaque site de spin et la dimension des spins eux même, (en général D est connu comme la dimension de paramètre d'ordre). Pour le modèle de Heisenberg $D = 3$ car les vecteurs des spins sont à trois dimensions [3].

À partir du modèle Heisenberg, les transitions de phase auront lieu qu'à trois dimensions.

2.3.2 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est beaucoup plus utilisé pour étudier les transitions des phases [3], il sert aussi à décrire l'orientation des spins dans le cas de forte anisotropie axiale, également pour modéliser quelque systèmes à deux états comme les alliages binaires, et il est probablement le modèle le plus étudié dans la physique statistique [11]. Dans ce modèle l'opérateur de spin $\hat{\mathbf{s}}$ est remplacé par un nombre, qui représente la composante z du spin et \mathbf{S} n'a que deux valeurs possibles $+1$ et -1 (*up* ou *down*). L'hamiltonien d'Ising est donné par [3] :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z, \quad (2.17)$$

J est une constante, elle représente l'énergie d'interaction entre les spins i et j . Fréquemment on somme sur les plus proches voisins. Dans le cas où $J > 0$, \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 modèle d'Ising la transition de phase se fait à température finie si $d > 1$; dans le cas bidimensionnel $d = 2$ il existe une solution exacte proposée par Onsager, à $d = 1$ il n'y a pas de transition de phase. Pour montrer qu'il existe un ordre spontané, il suffit juste de montrer que pour les températures finies la symétrie est brisée, les spins sont ordonnés (ils ont tendance à être dans l'état *up* que *down*) et le paramètre d'ordre $m = 0$, par contre dans les phases à haute température la symétrie est maintenue⁴. Ainsi 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 aura lieu.

Nous reporterons quelques résultats d'Onsager déterminer à $2D$ en champ nul et à la limite thermodynamique :

- 1) **La température de transition** : $T_c = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2.2691853...J$ ce résultat est obtenu pour $J = 1$
- 2) **La capacité calorifique** : $C_v \propto -\ln|T_c - T|$, Par conséquent l'exposant critique $\alpha = 0$
- 3) **L'aimantation** : Pour $T > T_c$ elle est nulle $M(T) = 0$. Pour $T \leq T_c$, $M(T) \propto |T_c - T|^{1/8}$ d'où l'exposant critique correspondant est donné par : $\beta = 1/8$.
- 4) **La susceptibilité magnétique dans la région critique est donnée par** : d'où l'exposant critique correspondant est donné par : $\gamma = 7/4$.

Pour le modèle d'Ising à trois dimensions il n'y a pas encore de solution exacte⁵.

2.3.3 Modèle XY :

Le modèle XY ou modèle planaire, décrit un système dont les degrés de liberté sont des vecteurs bidimensionnels \mathbf{S}_i . Ces vecteurs peuvent être représentés au moyen d'une variable angulaire sous la forme :

$$\mathbf{S}_i = (\cos \phi_i \sin \phi_i) \quad (2.18)$$

En termes des variables angulaires, le hamiltonien du modèle XY a une forme particulièrement simple

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j). \quad (2.19)$$

Dans le modèle XY à $3D$ il existe une transition de phase à basse température, où $\langle \mathbf{S}_i \rangle \neq 0$ avec une symétrie brisée, pour les hautes températures où $\langle \mathbf{S}_i \rangle = 0$, une phase apparaîtra avec une symétrie

4. voir ref [12] page 734,736.

5. voir [13]

globale rétablie.

$\langle \mathbf{S}_i \rangle$ est le paramètre d'ordre de cette transition de phase qui est de second ordre, la transition de phase de ce modèle décrit le point de Curie des systèmes ferromagnétiques avec anisotropie suivant le plan xy . Dans la cas bidimensionnel la situation est plus complexe car il est impossible de briser sa symétrie continue [14].

2.4 Approximation du champ Moléculaire de Weiss ou Champ Moyen

Cette approximation est présentée pour étudier les spins en interaction. Elle fournit la première analyse des propriétés magnétiques telles que l'existence de l'ordre magnétique à longue portée et le comportement de la susceptibilité en fonction de la température⁶. On peut illustrer cette approximation en l'appliquant au modèle d'Ising, dont le hamiltonien est donné par

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z \cdot S_j^z. \quad (2.20)$$

L'hypothèse de la théorie du champ moyen consiste à remplacer la valeur des spins des premiers voisins par leurs valeurs moyennes. L'hamiltonien se ressemble alors à celui de spins indépendants dans un champ magnétique extérieur, qui décrit un système de spins indépendant :

$$\mathcal{H} = -zJ \langle S^z \rangle \sum S_i^z, \quad (2.21)$$

z représente le nombre des premiers voisins.

la valeur moyen de S^z est donnée par :

$$\langle S^z \rangle = \frac{+1 \times e^{zJ \langle S \rangle / k_b T} - 1 \times e^{-zJ \langle S \rangle / k_b T}}{e^{zJ \langle S \rangle / k_b T} + e^{-zJ \langle S \rangle / k_b T}}, \quad (2.22)$$

$$\langle S^z \rangle = \tanh\left(\frac{zJ}{k_B T} \langle \mathbf{S} \rangle\right). \quad (2.23)$$

Les différentes solutions de cette équation sont détaillées sur la figure ci-dessous [2.2] :

2.4.1 Validité de la théorie du champ moyen

Cette approximation néglige les fluctuations instantanées des spins, puisque l'on remplace chaque spin par une valeur moyenne, uniforme dans tout le matériau. Ce qui engendre la surévaluation de la température de transition T_c . De plus cette approximation décrit les transitions à des températures non nulles pour toutes les dimensions d'espace. Par contre à basse dimensionalité on sait que les fluctuations sont très fortes, et elles peuvent détruire l'ordre magnétique.

6. voir [11] chapitre 9 page 128.

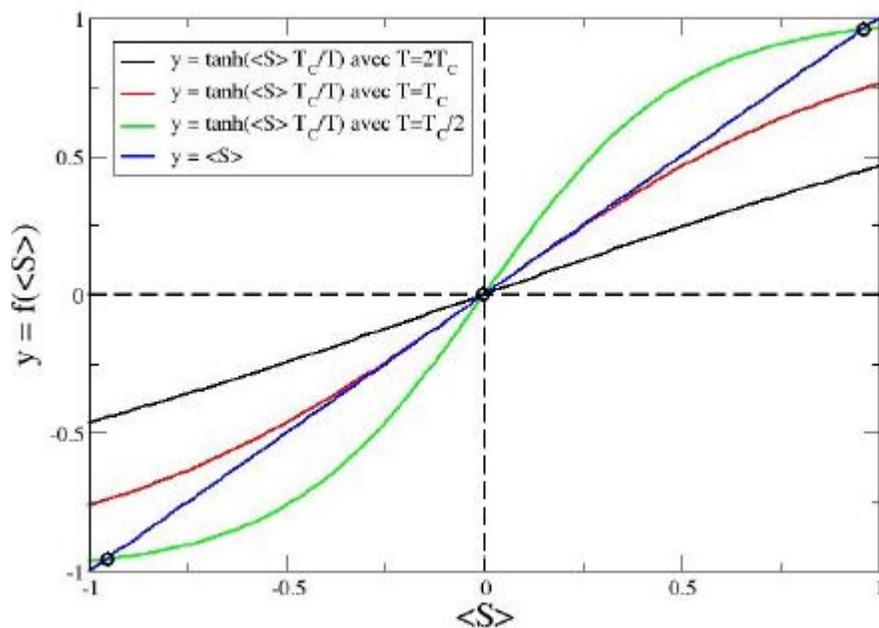


FIGURE 2.2: Solution graphique de l'équation transcendantale donnant la valeur moyenne du spin $\langle S \rangle$ dans la théorie du champ moyen appliquée au modèle d'Ising. Pour $T > T_c$ il y a une seule intersection à $\langle S \rangle = 0$ et on est dans la phase paramagnétique. Pour $T < T_c$ trois intersections sont visibles : à $\langle S \rangle = 0$ et à $\langle S \rangle = \pm S^* \neq 0$.

Simulation Monte Carlo

La simulation Monte Carlo est une méthode de calcul numérique qui permet de déterminer des quantités physiques, à partir de procédés aléatoires. Ces différentes méthodes de simulation s'appliquent généralement pour l'évaluation de l'intégrale multidimensionnelle, ou bien le tirage aléatoire à partir d'une distribution de probabilité. Dans le cas d'un tirage aléatoire uniforme on parle d'échantillonnage simple, et dans le cas de l'échantillonnage d'une distribution non uniforme, on parle d'échantillonnage par importance.

3.1 Echantillonnage Simple

Il consiste à générer un nombre N d'états microscopiques aléatoires. Dans le modèle d'Ising, on attribue aux spins du système une valeur de $+1$ ou -1 . On calcule la moyenne d'une observable $\langle A \rangle$ pour N configurations

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{c=1}^N A(c) \exp[-\beta E(c)]}{\sum_{c=1}^N \exp[-\beta E(c)]}, \quad (3.1)$$

où c désigne une configuration des spins. L'augmentation du nombre de configurations N engendre plus de précision sur la valeur moyenne de $\langle A \rangle$.

Cette méthode génère des configurations aléatoires avec une même probabilité pour toutes les températures considérées, ce qui engendre une énorme erreur sur la moyenne de A calculée. Donc, ce type d'échantillonnage est limité juste pour les hautes températures, où toutes les configurations aléatoire générées possèdent la même probabilité.

Un autre problème est dû au temps de calcul, car pour avoir une bonne statistique nécessite de trop longs temps de calcul. Pour résoudre ce problème une autre méthode est proposée et qui consiste à générer de préférence les configurations, qui ont des poids statistiques importants.

3.2 Echantillonnage par importance

Cette méthode consiste à choisir les états microscopiques c dont les probabilités sont les plus importantes à la température T , ce qui implique une importante valeur de $\Omega(c) \exp(-\beta E_c)$, où $\Omega(c)$ est le nombre de configurations d'énergie $E(c)$. Par conséquent la valeur moyenne devient :

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

N représente le nombre d'états tirés à la température T , et $A(c)$ est la valeur de A dans la configuration c .

Dans ce qui suit, on présente l'algorithme Metropolis, afin de mettre en pratique la technique d'échantillonnage par importance, dans le but d'étudier les modèles magnétiques qui nous intéressent.

3.3 Algorithme de Metropolis

Le principe de cette technique est de générer une série de N états de spins, qui s'appelle **chaîne de Markov**. Chaque état ne dépend explicitement que de l'état précédent et appartient à un ensemble fini d'états appelé *espace des états*, dont la configuration c_{i+1} s'obtient de la configuration précédente c_i avec une probabilité de transition appropriée $\omega(c_i \rightarrow c_{i+1})$ [11]. C'est à dire on visite un site l du réseau et on tente de flipper le spin qui s'y trouve ($S_l \rightarrow -S_l$). Cette transition est acceptée avec une probabilité de $\exp[(E_{c_{i+1}} - E_{c_i})/T]$.

Avant de passer à la description de cette méthode on définit d'abord quelques notions qu'on utilisera prochainement.

1. r : est une variable aléatoire uniforme dans l'intervalle $] 0 ; 1]$.
2. N : est le nombre de spins du réseau, et L est le nombre de spins suivant une direction spatiale, par conséquent $N = L^2$ à 2D, et L^3 à 3D.
3. Un cycle de Monte Carlo est une variable qui dépend de la taille du système ; de plus en une seule itération Monte Carlo tout les spins seront visités au moins une seule fois ; par conséquent un cycle Monte Carlo réfère à N tentatives de flip.

3.3.1 Les étapes de déroulement de l'algorithme Metropolis

1.Fixer les valeurs des paramètres du système : Pour le modèle d'Ising l'hamiltonien est donnée par l'équation 2.17, on fixe d'abord les paramètres de ce système, on prend $J = 1$ comme unité d'énergie, de plus la température T est une variable en unité J/k_B .

2.Générer l'état initial du système : consiste à initialiser le réseau à une configuration de départ aléatoire. C'est un avantage car ça nous permet d'utiliser moins de temps de calcul pour atteindre la

configuration d'équilibre avec le bain de chaleur associé.

Pour sélectionner une position sur le réseau, on procède à un tirage équiprobable du nombre aléatoire r sur un ensemble de nombres uniformément répartis sur l'intervalle $]0; 1]$. Si r appartient à $]0; \frac{1}{2}]$ on associe au spin la valeur $+1$. S'il appartient à $]\frac{1}{2}; 1]$ on l'associe la valeur -1 . Le premier cas correspond à (spin-up), le second à (spin-down). Ce processus est répété N fois de la même manière jusqu'à ce que on parcourt tous les spins du réseau.

3. Thermalisation :

3.1 Tirer un spin aléatoirement : consiste à tirer ou visiter un spin au hasard. Pour faire on génère une variable (nombre) aléatoire r qui appartient à l'intervalle $]0; 1]$. Les valeurs du produit de $r \times N$ se limitent dans l'intervalle $[0; N - 1]$, on prend seulement la partie entière qui correspond à un spin donné du réseau. D'autre part pour appeler ce spin on utilise les conditions aux limites périodiques ; par exemple on prend un spin qui a comme coordonnées (i, j) , et ceux de son voisin gauche $(i-1, j)$, ceux à droite $(i+1, j)$, ceux en haut $(i, j+1)$ et ceux en bas $(i, j-1)$.

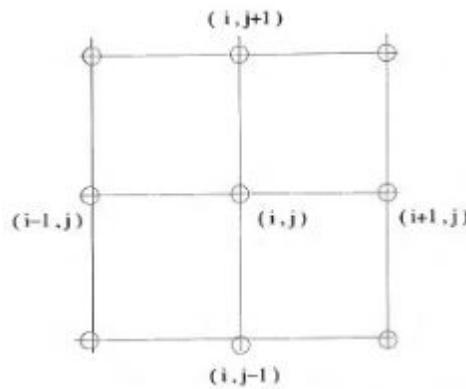


FIGURE 3.1: Les coordonnées d'un spin et ses premiers voisins dans un réseau carré

3.2 Calculer l'écart d'énergie en utilisant les conditions aux limites périodiques : Une fois on a tiré un spin aléatoirement, on calcul son énergie E_i qui correspond aux interactions d'échange de ce dernier avec ces plus proches voisins (dans le cas du modèle d'Ising, voir la figure ci-dessus). Puis on le flippe, si la différence d'énergie ΔE entre l'état initial E_i et celle après le flippe E_{i+1} est inférieure à zéro c'est-à-dire : $\Delta E = (E_{i+1} - E_i) < 0$ le changement est accepté ; ce qui est en accord avec le principe de minimisation d'énergie. Si la variation d'énergie est supérieure à zéro : $\Delta E = E_{i+1} - E_i > 0$, on génère un autre nombre aléatoire η qui est pesé contre le facteur de probabilité de Boltzmann, $\exp -[(E_{i+1} - E_i)/T]$. Si le nombre aléatoire $\eta < \exp -[(E_{i+1} - E_i)/T]$, le changement est accepté (Cela permet au spin d'être renversé à la suite de l'énergie absorbée à partir du bain de chaleur, comme il est en accord avec le principe de la maximisation de l'entropie). Sinon il est rejeté. Donc le changement est accepté seulement avec une probabilité $\exp -[(E_{i+1} - E_i)/T]$.

3.3 Prendre un autre spin et répéter les étapes (3.1) et (3.2) : On continue le tirage des spins.

On dit alors qu'on a effectué un balayage ou un cycle Monte Carlo[11].

3.4 Effectuer MCS cycles Monte Carlo afin de thermaliser le système : La configuration générée à l'état initial est arbitraire, donc on fait MCS cycle Monte Carlo pour mettre le système à l'équilibre à la température T . Les résultats obtenus au cours de cette période sont appelés transitoires, et ne sont pas d'intérêt car les résultats qui nous intéressent sont obtenus à l'équilibre (Le système prend une configuration d'équilibre après MCS cycles Monte Carlo).

4.calculer les moyennes statistiques des grandeurs physiques E, M, M^2 durant $Nmcs$ cycles Monte Carlo : On calcul la valeur moyenne des quantités physiques après thermalisation, par exemple

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Nmcs} \sum_{t=MCS+1}^{MCS+Nmcs} E(t), \quad (3.3)$$

on sauvegarde les résultats dans un fichier pour les représenter. La précision sur les valeurs moyennes augmente avec l'augmentation du nombre de cycles Monte Carlo.

Simulation du Modèle d'Ising

Dans ce chapitre nous nous proposons de mettre en œuvre les techniques et algorithmes, introduites dans le chapitre précédent, sous forme d'un code de calcul. Le code est écrit entièrement par nous-mêmes. Nous avons commencé par le cas du modèle d'Ising à deux et trois dimensions, et ce à cause de la relative simplicité inhérente à ce modèle, du point de vue implémentation.

Nous allons étudier un réseau carré ($2D$) et un réseau cubique simple à ($3D$). Les conditions aux limites périodiques seront imposées. La taille de système appelée L donne le nombre de maille élémentaires selon une direction de l'espace, ou bien le nombre de spin par moments suivant cette direction. Le nombre total de spins dans le système est alors L^2 à ($2D$) ou bien L^3 à ($3D$).

Nous allons considérer des différentes tailles des systèmes. Il va sans dire que plus L est grand, meilleurs seront les résultats comparativement à la limite thermodynamique d'un système infini ($L \rightarrow \text{inf}$).

Les observables d'intérêts que nous allons calculer et discuter sont : l'énergie interne et sa dérivée la capacité calorifique, l'aimantation et sa dérivée la susceptibilité, ainsi que les cumulants de Binder. Ces derniers sont nécessaires si on peut déterminer avec précision la position de la température critique. Une première approximation de cette dernière peut être obtenue à partir des courbes de la capacité calorifique, et de la susceptibilité magnétique.

Dans la suite nous prendrons constante d'échange J comme unité de mesure des énergies. De même pour la température, elle sera donnée en unité de J/K_B .

4.1 Détails de Calculs

Un seul calcul est effectué pour chaque taille du système. Nous commençons par la plus haute température ($T = 5J/K_B$) et nous diminuons la température à pas réguliers ($\Delta T = 0.0495$) jusqu'à la température la plus basse ($T = 0.05$). Ce choix est dicté par le fait que la configuration initiale des spins

est générée de manière aléatoire. Elle est donc plus proche des configurations caractérisant les hautes températures, que celles plus ordonnées des basses températures. Il est donc plus rapide d'atteindre l'équilibre à partir de cette configuration si la température est haute. Un nombre de cycles Monte Carlo sont réservés à cette thermalisation initiale, ce qui permet de ramener le système à la température voulue. Ce n'est qu'après cette phase de thermalisation que les vraies mesures commencèrent. À chaque nouvelle température on recommence l'étape de thermalisation en consacrant les 100000 premiers cycles Monte Carlo à cette étape. Une fois l'étape de thermalisation achevée, on commence les mesures : après chaque cycle Monte Carlo on cumule des grandeurs dont on veut calculer les moyennes à la fin. L'étape de mesure consiste en 100000 cycles Monte Carlo.

4.2 Résultats et Discussions du Modèle d'Ising Bidimensionnel

4.2.1 Courbes Energie et Aimantation Bidimensionnel

À $T = 0$ le système minimise son énergie interne en se mettant dans l'état fondamental où tous les spins sont alignés, suivant une seule direction. Soit tous les S_i prennent la valeur $+1$, auquel cas on parle d'aimantation positive. Soit ils prennent tous la valeur -1 , auquel cas l'aimantation est négative. Mais bien sûr le choix de négatif ou positif est arbitraire, et c'est pour cela que l'état fondamental est doublement dégénéré.

À $T = 0$ il est donc facile de calculer l'énergie interne du système : chaque spin est entouré de quatre voisins et lui sont tous parallèles.

L'énergie interne donne alors :

$$\langle E \rangle = \frac{-J}{2N} \sum_i (1 \cdot (1 + 1 + 1 + 1)) = -2J. \quad (4.1)$$

Ce résultat apparait clairement sur la figure 4.1.

Ce qui est remarquable sur la figure est que l'énergie interne reste relativement constante même quand T augmente, et ce jusqu'à $T \simeq 1$. Cette "stabilité" du système par rapport aux excitations extérieures est due à la présence d'un gap dans le spectre d'excitations du système. La dimensionnalité du système ($2D$) évidemment joue aussi un rôle, puisqu'à une dimension le système ne s'ordonne à aucune température T finie.

On voit donc qu'aux basses températures le système est dans la phase ferromagnétique. Ceci est aussi visible sur la courbe de l'aimantation 4.2 où celle-ci atteint la valeur maximale ($M = \pm 1$) pour des températures $T \lesssim 1$.

À mesure que T augmente au delà de $T \simeq 1$, l'énergie interne augmente de manière sensible. Le nombre de spins qui acquièrent suffisamment d'énergie thermique pour flipper augmente. Ceci est visible également sur la courbe de l'aimantation où celle-ci commence à diminuer de sa valeur à saturation à

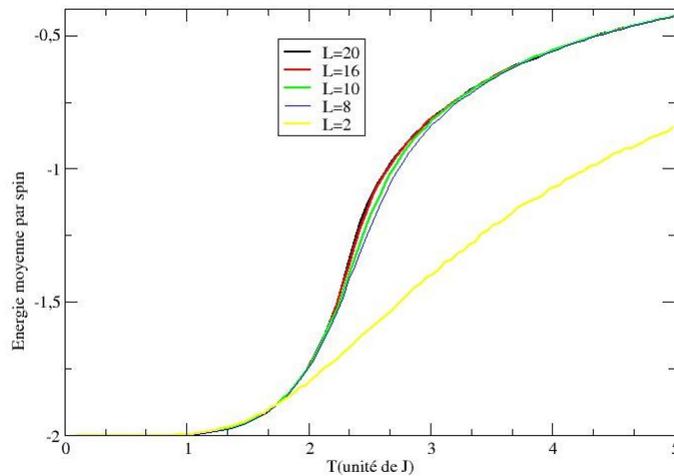


FIGURE 4.1: Energie moyenne du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

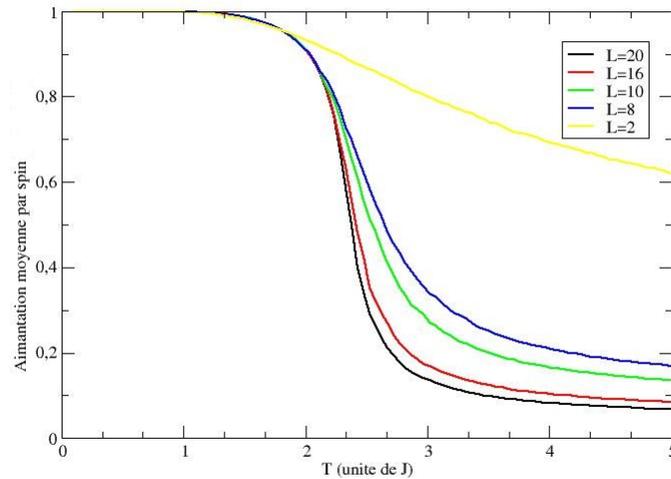


FIGURE 4.2: Aimantation moyenne du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

partir de $T \simeq 1$. La diminution de l'aimantation et l'augmentation de l'énergie interne vont de paire. Les pentes visibles sur les courbes correspondantes augmentent en valeur absolue et enregistrent leur maximum dans la région de températures $2 < T < 3$. C'est dans cette région de températures, aussi que les courbes correspondantes à différentes tailles commencent à se démarquer les unes des autres, aussi bien pour les courbes de l'énergie que pour celles de l'aimantation.

Cette région de température est en effet une région de transition entre la phase ordonnée ferromagnétique

à basse température et la phase désordonnée paramagnétique à hautes températures. Cette région est caractérisée par l'augmentation de la longueur de corrélation à mesure que l'on se rapproche de la température de transition $T_c \approx 2.26$.

Nous utilisons des systèmes finis pour simuler un système infini, et tant que la longueur de corrélation est inférieure à la taille L du système, cela reste valide. Ceci est attesté par le fait que les courbes correspondant à différentes tailles se superposent pour $T \lesssim 1.8$. Mais à mesure que T se rapproche de T_c , la longueur de corrélation ξ augmente et les courbes correspondant à différentes tailles se détachent, à commencer par les tailles les plus petites. C'est ce qu'on appelle effet de taille finie (en anglais "finite size effect"). Cet effet est exploité plus loin pour faire une analyse en taille finie ("finite size scaling") dans le but de déterminer les exposants critiques.

Aux hautes températures l'énergie interne augmente et l'aimantation diminue, pour tendre vers zéro dans les deux cas. Et encore une fois l'effet de la taille finie des systèmes considérés est visible sur les courbes, notamment celle de l'aimantation.

On s'attend à ce qu'aux hautes températures l'entropie l'emporte et le système devient désordonné, ce qui donne une aimantation moyenne nulle. En effet à haute température chaque spin a autant de chance d'être *up* que d'être *down* et ce indépendamment de l'orientation de ses voisins. Si on prend donc une moyenne sur un spin quelconque, on trouvera :

$$\begin{cases} \langle S_i \rangle = \frac{1}{2}(-1) + \frac{1}{2}(+1) = 0 \\ M = \sum_i \langle S_i \rangle = 0 \end{cases} \quad (4.2)$$

De même que pour l'énergie, si on considère le cas de deux spins voisins S_i et S_j . Les configurations (S_i, S_j) , (\uparrow, \uparrow) , (\uparrow, \downarrow) , (\downarrow, \uparrow) , (\downarrow, \downarrow) ont toutes la même probabilité.

Ce qui donne : $\langle \varepsilon_{ij} \rangle = -J((1/4)(1 \times 1) + (1/4)(1 \times (-1)) + (1/4)((-1) \times 1) + (1/4)((-1) \times (-1))) = 0$.

L'énergie totale est : $\langle E \rangle = (1/2N) \sum_i \sum_j \langle \varepsilon_{ij} \rangle = 0$.

Le fait que pour chaque spin $\langle S_i \rangle = 0$, on dit qu'on est dans la phase paramagnétique.

On a bien donc une transition de phase, de la phase paramagnétique à la phase ferromagnétique causée par la diminution de la température.

On constate que ces résultats sont cohérents avec ceux analytique¹.

4.2.2 Courbe de la Capacité Calorifique et la Susceptibilité Magnétique Bidimensionnel

La capacité calorifique et la susceptibilité magnétique sont représentées sous forme de pics. Aux basses températures les deux grandeurs prend des valeurs nulles pour toutes les tailles de système, on constate que dans cette région les courbes de ces différentes tailles se superposent ; car le système est à l'état fondamental (phase ferromagnétique) et les fluctuations d'énergie sont négligeable : Pour

1. voir[16]

la capacité calorifique ($\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \approx 0$), et pour la susceptibilité magnétique $\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \approx 0$. On voit donc qu'aux basses températures le système est dans la phase ferromagnétique. Ceci est visible sur la courbe de la susceptibilité magnétique 4.4, et de la capacité calorifique 4.3.

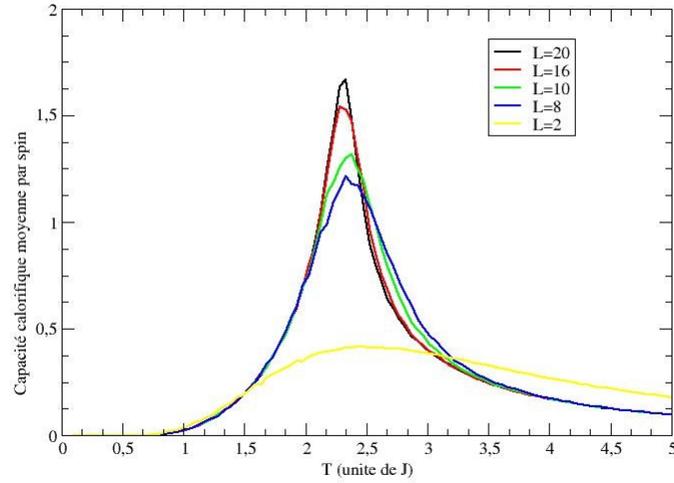


FIGURE 4.3: Chaleur spécifique du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

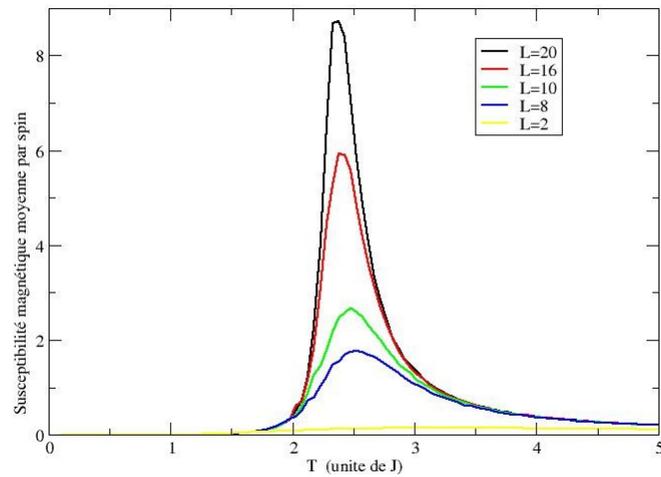


FIGURE 4.4: Susceptibilité magnétique du modèle d'Ising ferromagnétique sur un réseau carré pour différentes tailles L en fonction de la température.

À $T \gtrsim 1$ la chaleur spécifique commence à prendre des valeurs non nulle (de même cas pour la susceptibilité $T \gtrsim 2$). À mesure que T se rapproche de T_c , la longueur de corrélation augmente, les

pics correspondant à différentes tailles se détachent et convergent vers des valeurs finies, c'est dû à l'effet de taille finie. À mesure que T se rapproche de T_c , la longueur de corrélation augmente et les courbes correspondant à différentes tailles se détachent et convergent vers des valeurs finies, c'est dû à l'effet de taille finie.

$$\begin{cases} C_v \sim -\ln(T_c - T) \\ \chi = \frac{\partial M}{\partial T} = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \end{cases} \quad (4.3)$$

Avec l'augmentation de la température l'entropie augmente, ce qui mène à un désordre du système de spin (phase paramagnétique).

4.2.3 Méthodes pour déterminer la température de transition T_c

Pratiquement, si l'on trace le facteur de Binder en fonction de la température, les courbes $U(T, L)$ se coupent en une même abscisse, ce qui permet de déterminer la température critique T_c du système. D'après la figure 4.5 l'intersection est à $T = 2.26$.

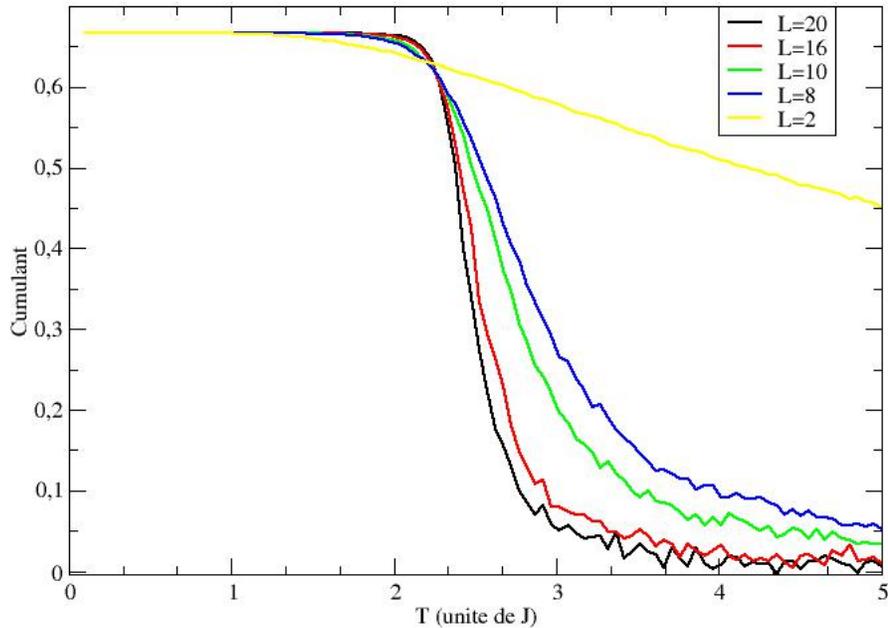


FIGURE 4.5: Cumulant de Binder du modèle d'Ising à $2d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

Théoriquement il est défini comme suit :

$$U(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{\langle 3M^2 \rangle^2}.$$

Avec $\langle M^2 \rangle$ et $\langle M^4 \rangle$ la moyenne du carré de l'aimantation et de l'aimantation à la puissance quatre respectivement. Dans le modèle d'Ising, le cumulante de Binder $U(T, L)$ se rapproche dans la limite thermodynamique d'une valeur de $2/3$ pour une température $T < T_c$. Il tend vers 0 pour $T > T_c$ pour les systèmes infini.

Une autre méthode beaucoup plus simple consiste à déterminer la valeur maximale du pic de la capacité calorifique $C_v(max)$, et par la suite la projeter sur l'axe des abscisses (T) pour déterminer la valeur de T_c .

4.2.4 Mesure des Exposants critiques de l'aimantation

On a déduit précédemment² que la température critique à deux dimensions vaut : $T_c \approx 2.2638$. Pour mesurer les exposants critiques, on doit déterminer les valeurs des différentes tailles de l'aimantation au voisinage de cette température critique (Les valeurs de la pente de l'aimantation à la température de transition $T_c \approx 2.2638$), et le plus important c'est que, la précision augmente avec l'augmentation de la taille du système.

Les résultats de l'analyse de la pente de l'aimantation à la température de transition pour différentes tailles du système sont donnés dans le tableau suivant :

taille	aimantation $M(T)$
20	0.698
16	0.7185
8	0.7830

Le rapport β/ν pour les tailles ($L = 16; L = 8$) montré dans le tableau précédent est donné par :

$$\frac{\beta}{\nu} = -\frac{\ln \frac{0.7185}{0.7850}}{\ln \frac{16}{8}} = 0.124 \quad (4.4)$$

Et pour les tailles ($L = 16; L = 20$) nous avons les résultats suivant :

$$\frac{\beta}{\nu} = -\frac{\ln \frac{0.698}{0.7185}}{\ln \frac{20}{16}} = 0.125 \quad (4.5)$$

Avec $\nu = 1$.

Les résultats de l'analyse des pics de la susceptibilité moyenne par spin sont donnés dans le tableau suivant :

taille	Pic de χ
20	3.991
16	5.901
10	13.435

2. voir chapitre 2.

Le rapport γ/ν pour les tailles ($L = 16; L = 10$) montrées dans le tableau précédent est donné par :

$$\frac{\gamma}{\nu} = -\frac{\ln \frac{5.901}{13.435}}{\ln \frac{16}{10}} = 1.750 \quad (4.6)$$

Et pour les tailles ($L = 16; L = 20$) nous avons les résultats suivant :

$$\frac{\gamma}{\nu} = -\frac{\ln \frac{3.991}{5.901}}{\ln \frac{20}{16}} = 1.751 \quad (4.7)$$

D'après les calculs exactes d'Onsager et les résultats du groupe de normalisation, $\beta = 0.124$ et $\gamma = 1.751$. Alors notre résultat de simulation est cohérent avec celui du calculs exacte, et celui trouvés par Kotze [15][9].

4.3 Résultats et Discussions du Modèle d'Ising Tridimensionnel

4.3.1 Courbes Energie et Aimantation Tridimensionnel

À trois dimensions chaque spin est entouré de six voisins. L'énergie interne donne alors :

$$\langle E \rangle = \frac{-J}{2N} \sum_i (1.(1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1)) = -3 \quad (4.8)$$

On constate, que le graphe de l'énergie et de l'aimantation moyenne à trois dimensions persiste pour un intervalle de température relativement large, par rapport à celui obtenue à deux dimensions. ce résultat apparait clairement sur les figures 4.6 et 4.7.

L'énergie interne et l'aimantation reste relativement constantes même quand T augmente, et ce jusqu'à $T \simeq 1.5$. Donc la dimensionnalité joue un rôle très important : la stabilité du système par rapport aux excitations augmente, ce qui induit un gap dans le spectre d'excitations du système plus large. Ainsi d'après l'approximation du champ moyen, tant qu'on la taille du système est grande tant qu'on se rapproche du résultat exacte (température critique).

On voit donc à basses températures le système est dans la phase paramagnétique.

À mesure que T augmente au delà de $T \simeq 1.5$, l'énergie interne augmente de manière sensible. Le nombre de spins qui acquièrent suffisamment d'énergie thermique pour flipper augmente. Les pentes visibles sur les courbes correspondantes augmentent en valeur absolue et enregistre leur maximum dans la région de températures $3 < T < 4$. Cette région de température est en effet une région de transition entre la phase ordonnée ferromagnétique à basses températures et la phase désordonnée paramagnétique à hautes températures. Ainsi dans cette région la longueur de corrélation augmente à mesure que l'on se rapproche de la température de transition $T_c \approx 4,5$. Il est important aussi de mentionner que l'aimantation est continue à la température critique.

Aux hautes températures $T \geq 5$: l'aimantation et l'énergie moyenne converge à des valeurs constantes

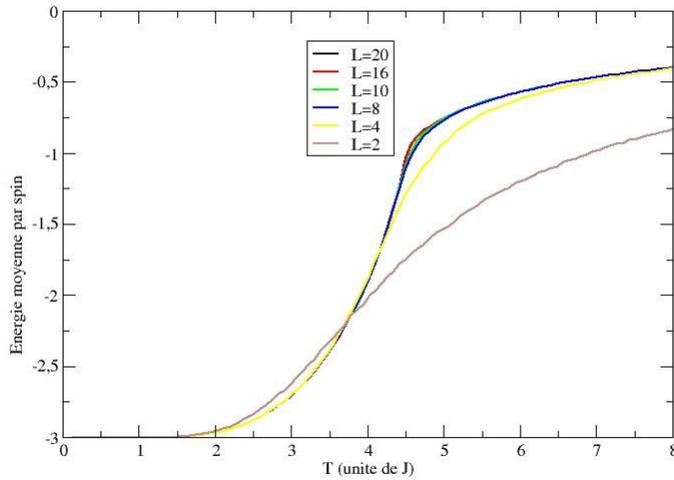


FIGURE 4.6: Energie moyenne par spins du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

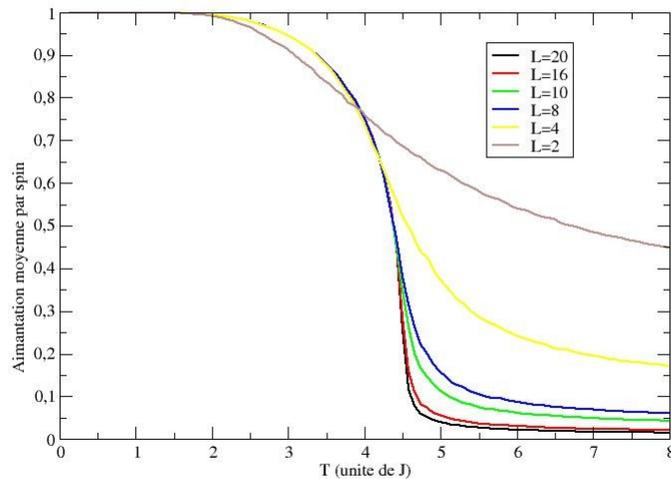


FIGURE 4.7: Aimantation par spin du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

proches de zéro. À ces températures le système de spins est désordonné, et il est en phase paramagnétique.

4.3.2 Courbe de la Susceptibilité Magnétique et la Capacité Calorifique

Dans les basses températures la capacité calorifique et la susceptibilité magnétique s'annulent. Avant de commenter ce résultat il est utile de rappeler que la capacité calorifique est définie comme ($C_v(T) =$

$\frac{\partial E}{\partial T} = 0$), et la susceptibilité magnétique est définie comme ($\chi(T) = \frac{\partial M}{\partial T} = 0$) : d'où l'énergie du système et l'aimantation moyenne sont minimisées à cette région (le système est à l'état fondamental). Ainsi les fluctuations sont négligeables. On voit donc aux basses températures le système est dans une phase ferromagnétique ceci est visible sur les courbes de la susceptibilité magnétique 4.9 et de la capacité calorifique 4.8.

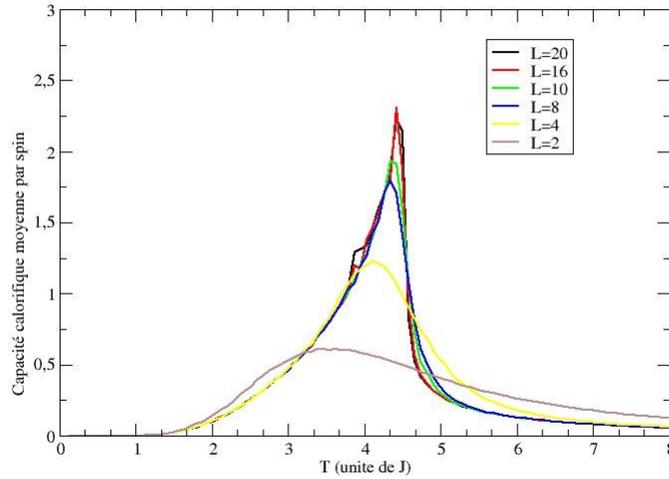


FIGURE 4.8: Chaleur spécifique du modèle d'Ising $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

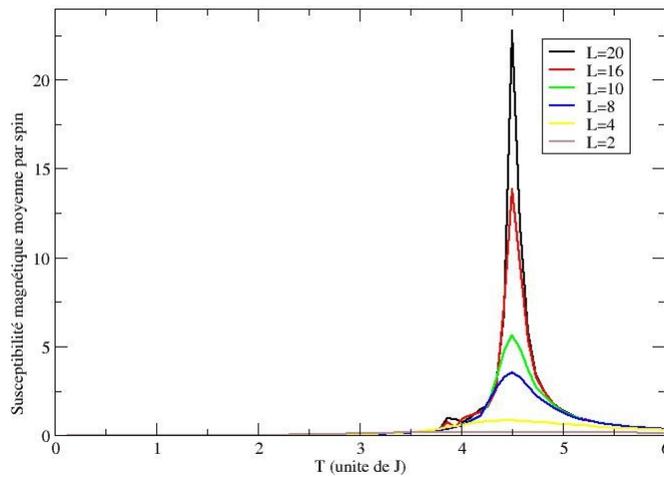


FIGURE 4.9: Susceptibilité magnétique du modèle d'Ising à $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

À $T \gtrsim 1$ la chaleur spécifique commence à prendre des valeurs non nulle (de même cas pour la susceptibilité $T \gtrsim 3$). À mesure que T se rapproche de T_c , la longueur de corrélation augmente et les pics correspondant à différentes tailles se détachent et convergent vers des valeurs finies, c'est dû à l'effet de taille finie.

À mesure que T se rapproche de T_c , la longueur de corrélation augmente et les courbes correspondant à différentes tailles se détachent et convergent vers des valeurs finies, C'est dû à l'effet de taille finie. Avec l'augmentation de la température l'entropie augmente, ce qui induit un désordre du système (phase paramagnétique).

4.3.3 Exposants Critiques

Calcul des cumulants : La figure 4.10 montre la variation des cumulants de Binder des différents réseaux ($L = 2, L = 4, L = 8, L = 10, L = 16, L = 20$) en fonction de la température. D'après

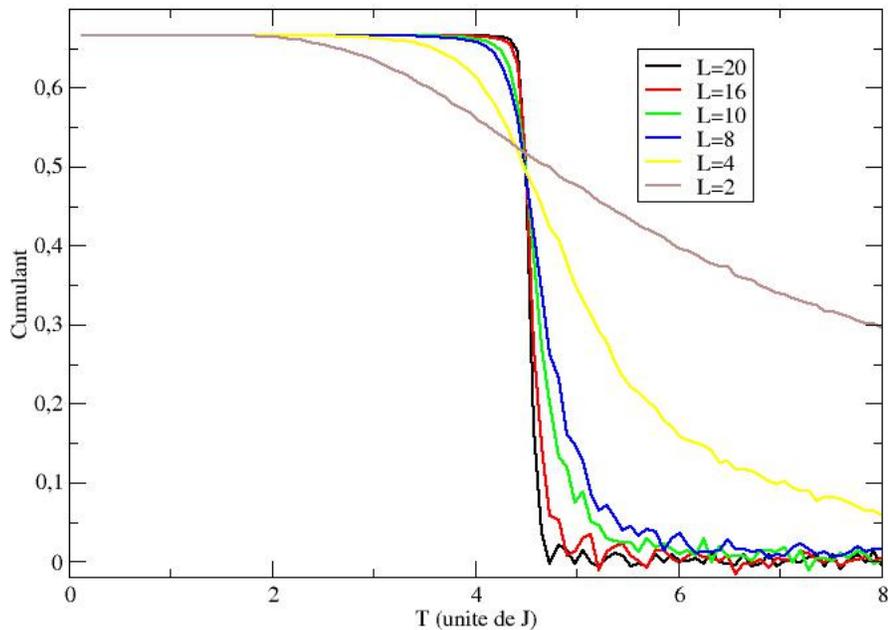


FIGURE 4.10: Cumulant de Binder du modèle d'Ising à $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes tailles L .

le point d'intersection des cumulants de Binder, on détermine la température de transition de phase $T_c = 4.50 \pm 0.002$. **Calcul des exposants critiques** Théoriquement, d'après la relation de scaling du pic de la chaleur spécifique en fonction de la taille L , le rapport théorique entre la taille du système des spins et la capacité calorifique est α/ν . Ce rapport est représenté dans le tableau ci-dessous à partir des résultats de la simulation :

taille	Capacité calorifique C_v
20	2.41
16	2.27
10	2.5

Le rapport entre les tailles $L = 20$ et $L = 16$ est donné par :

$$\frac{\alpha}{\nu} = -\frac{\ln \frac{2.41}{2.27}}{\ln \frac{20}{16}} = 0.26 \quad (4.9)$$

Le rapport théorique est : $\alpha/\nu = 0.174$.

Pour le cas de la susceptibilité, le rapport théorique entre la taille et la susceptibilité magnétique est $\gamma/\nu = 1.965$. Le tableau ci-dessous montre la variation du pic de la susceptibilité magnétique moyenne en fonction de la température.

taille	$Picde\chi$
20	22.02
16	14.01
10	5.50

Le rapport entre les tailles $L = 20$ et $L = 16$ est :

$$\frac{\gamma}{\nu} = -\frac{\ln \frac{22.02}{14.01}}{\ln \frac{20}{16}} = 2.02 \quad (4.10)$$

Le rapport théorique est : $\gamma/\nu = 1.96$. D'ou l'erreur sur les résultats trouvés par la simulation est de ± 0.06 .

Simulation du Modèle de Heisenberg Avec Anisotropie et Interactions Dipolaires

5.1 Introduction

Dans ce chapitre nous nous proposons d'étudier un modèle magnétique complet, à savoir le modèle de Heisenberg avec l'anisotropie et l'interaction dipolaire incluses. Nous allons nous intéresser à la compétition entre les différentes interactions en jeux, notamment entre l'anisotropie et l'interaction dipolaire dans le cas d'un film mince. L'intérêt de cette question du point de vue technologique est le fait que l'aimantation à la surface des matériaux utilisés pour le stockage de l'information doit de préférence être perpendiculaire à cette surface. Ceci est assuré par une forte anisotropie uniaxiale. Mais l'interaction dipolaire tend à réduire l'énergie magnétostatique en favorisant une aimantation dans le plan. Cette énergie est nulle pour un plan infini, mais pour un plan de taille finie l'interaction dipolaire fait tourner l'aimantation de sorte que des domaines magnétiques apparaissent pour des tailles de l'échantillon suffisamment grandes.[3] Nous commençons d'abord par le modèle de Heisenberg isotrope à trois dimensions.

5.2 Simulation du modèle de Heisenberg tridimensionnel

Le modèle de Heisenberg ferromagnétique possède la symétrie de rotation globale continue. C'est à dire que le hamiltonien est invariant par rapport à une rotation de tous les spins d'un même angle quelconque et autour d'une même direction quelconque elle aussi. A $T = 0$ et dans le cas tridimensionnel, le système se met dans un état fondamental où tous les spins sont parallèles. Parmi une infinité de directions le système en choisit une pour son aimantation qui est le paramètre d'ordre dans ce cas. Cet état fondamental et son paramètre d'ordre ne sont pas invariants par rapport à une rotation quelconque

dans l'espace. On dit que l'état fondamental brise de manière spontanée la symétrie de rotation globale de l'hamiltonien. Le théorème de Goldstone dit que s'il y a brisure de symétrie continue, alors il y a automatiquement la présence de modes collectifs d'excitation de basse énergie. Dans le cas du modèle de Heisenberg ces modes sont les ondes de spins, auxquelles est associée une quasi-particule appelée magnon. Le magnon possède une impulsion \mathbf{k} et une fréquence $\omega_{\mathbf{k}}$ correspondante. Dans le cas d'un réseau carré ou cubique la relation de dispersion des magnons est telle que $\omega_{\mathbf{k}} \propto k^2$ pour une valeur de \mathbf{k} faible. Ceci est comparable avec le cas de la brisure de la symétrie de translation continue lors du passage d'un état liquide à un état cristallin. Les modes de Goldstone dans ce cas sont les vibrations du réseau auxquelles est associé une quasi-particule, le phonon, et qui possède une dispersion similaire. Une caractéristique importante de ces excitations est que l'énergie qu'il faut pour en créer une tend vers zéro pour les grandes longueurs d'onde : $\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{\mathbf{k}} = 0$. C'est à dire que les excitations n'ont pas de gap d'énergie. Il est utile de rappeler ici que le modèle d'Ising est caractérisé par la présence d'un gap et une symétrie discrète. Contrairement au modèle de Heisenberg sa symétrie de "rotation" est continue.

Une des conséquences majeures de la présence des modes collectifs sans gap est en quelque sorte la fragilisation de l'état fondamental, au point qu'à deux dimensions ces modes empêchent carrément l'ordre magnétique de s'établir. Ceci est le cas du modèle de Heisenberg à deux dimensions qui ne possède pas de transition de phase désordre-ordre à température finie. C'est l'essence d'un autre théorème dû à Mermin et Wagner.[17] Ceci ne s'applique pas bien sûr au cas du modèle d'Ising, qui lui possède une symétrie discrète. Comme on l'a vu, le modèle d'Ising bidimensionnel possède bien une transition de phase à température finie. C'est le cas aussi du modèle de Heisenberg anisotrope comme on le verra plus bas ou nous allons trouver des transitions de phase dans le cas bidimensionnel aussi. Dans cette première partie nous étudions le modèle de Heisenberg isotrope tridimensionnel.

5.2.1 Détails de calculs

L'implémentation du modèle de Heisenberg isotrope est similaire à celle du modèle d'Ising, dans la mesure où on utilise le même réseau (cubique) et les mêmes conditions aux limites. La partie générique Monte Carlo elle aussi ne change pas, à ceci près que les spins sont maintenant des vecteurs tridimensionnels. Il nous faut donc trois nombre réels pour caractériser l'état d'un spin, alors qu'on avait qu'un seul nombre entier pour caractériser l'état d'un spin dans le modèle d'Ising. Un problème se pose alors quand on veut générer une orientation aléatoire pour un spin, que ce soit au départ de la simulation ou au moment de "flipper" un spin durant les simulations.

Dans le présent contexte "flipper" n'a pas le même sens que dans le contexte du modèle d'Ising. Il ne s'agit plus de changer \mathbf{S} en $-\mathbf{S}$, mais on change la direction du spin de manière aléatoire tout en gardant le module constant. On rappelle bien sur que le module de \mathbf{S} est fixé à l'unité dans ce qui suit. 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 \mathbf{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 pour la composante $S_{\text{nouv.}}^z$ a la distribution ¹

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

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 suit ² : 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 \mathbf{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.

5.2.2 Résultats et discussions

5.2.2.1 Courbes de l'énergie et de l'aimantation

La figure 5.1 montre l'évolution de l'énergie totale par spin en fonction de la température, et ce pour différentes tailles du système étudié. La figure 5.2 montre l'évolution de l'aimantation totale par spin en fonction de la température pour les mêmes systèmes. On constate qu'aux basses et hautes températures ($T \lesssim 1$ et $T \gtrsim 3$, respectivement) les courbes de l'énergie pour les différentes tailles se superposent, mise à part celle correspondant à $L = 2$. On sait qu'à $T = 0$ le système s'ordonne et devient donc homogène.

1. Voir Belorizky et Gorecki[18] pp. 11-13, et [19].

2. Voir ref. [20]

On peut dès lors spécifier l'état du système, en principe infini, par la donnée de l'état d'un seul des spins. Un système de taille $L = 2$ est largement suffisant pour rendre compte de l'état ordonné à $T = 0$. Ce qui est vrai également à l'autre extrême (très haute température) où les fluctuations thermiques sont telles que chaque spin devient effectivement indépendant des autres spins. On peut alors réduire l'étude

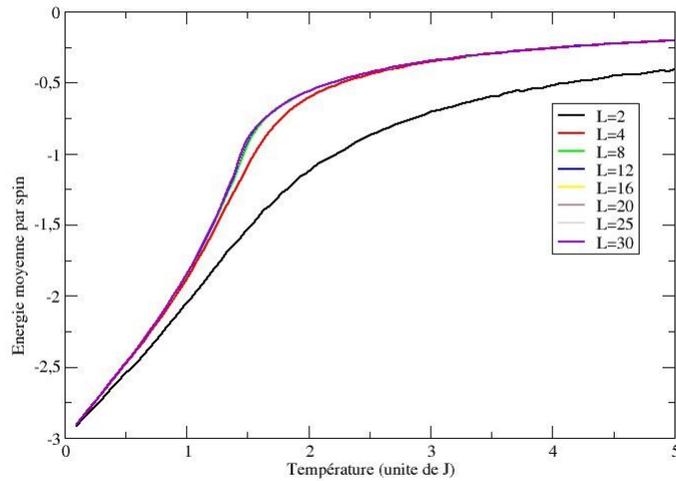


FIGURE 5.1: Energie interne moyenne par spin en fonction de la température du modèle ferromagnétique de Heisenberg sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L .

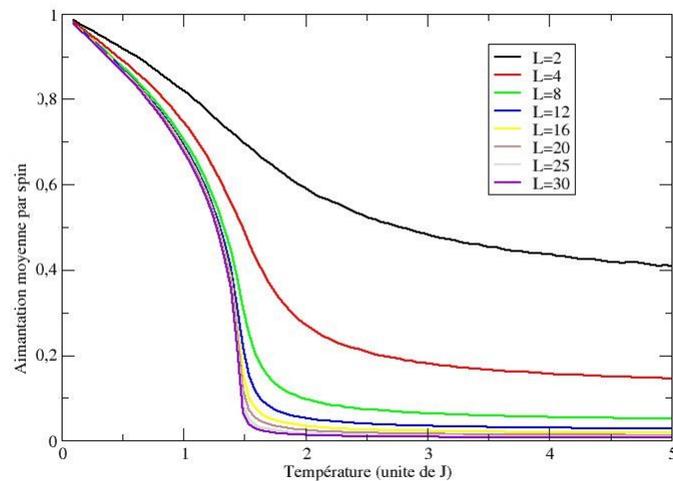


FIGURE 5.2: Aimantation par spin en fonction de la température du modèle ferromagnétique de Heisenberg sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L .

du système, en principe infini, à l'étude d'un seul spin ou à celle d'un système de taille finie. C'est la

phase paramagnétique. Quand la température diminue les spins deviennent de plus en plus corrélés. C'est à dire qu'un spin donné devient sensible à l'état de ses voisins, et ce jusqu'à une distance, dite de corrélation ξ . Cette distance augmente à mesure que la température diminue. Lorsque cette distance atteint la taille L de la boîte de simulation, celle-ci n'est plus valide pour simuler le système. On voit alors les courbes correspondant au différentes tailles se séparent les une des autres. Pour résumer, on a donc une phase ordonnée ferromagnétique à basse température et ceci est visible sur la courbe de l'aimantation (Fig. 5.2) où l'aimantation par spin $\langle M \rangle / N \rightarrow 1$ quand T tend vers zéro, et ce pour toutes les tailles L . Et on a une phase désordonnée paramagnétique à haute température qui est visible sur la courbe de l'aimantation (Fig. 5.2) où l'aimantation par spin $\langle M \rangle / N \rightarrow 0$ à très haute température. A ce stade, il faut rappeler que dans les simulations Monte Carlo, ce qu'on calcule c'est la valeur moyenne de la valeur absolue de l'aimantation, $\langle |M| \rangle$ au lieu de $\langle M \rangle$. C'est ce qui explique que les courbes de l'aimantation ne donnent pas zéro pour des températures supérieures à la température de transition, c'est à dire dans la phase qui est supposée être paramagnétique.

On voit que les pentes des courbes de l'énergie interne et de l'aimantation deviennent maximales dans la région de températures entre $T = 1$ et $T = 2$, et on peut déduire une première estimation déjà de la température de Curie, comme étant $T_C \approx 1.5$.

5.2.2.2 Chaleur spécifique et susceptibilité magnétique

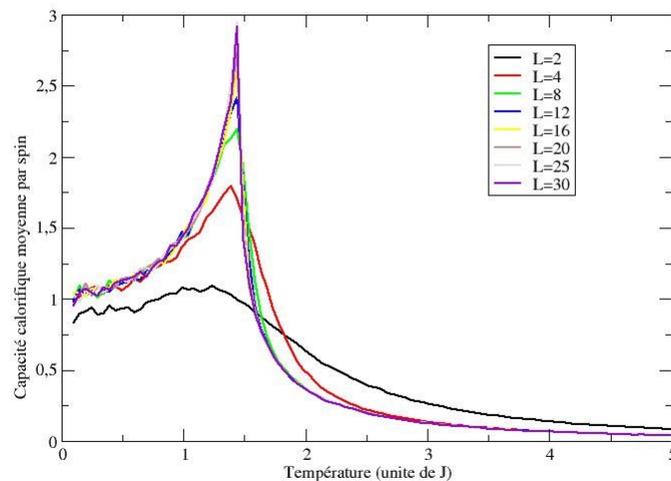


FIGURE 5.3: Chaleur spécifique en fonction de la température du modèle ferromagnétique de Heisenberg sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L .

La figure 5.3 montre la chaleur spécifique du modèle ferromagnétique de Heisenberg en fonction de la température et ce pour les différentes tailles du système étudié. La figure 5.4 montre les susceptibilités magnétique correspondante. La chaleur spécifique représente la dérivée de l'énergie interne par rapport à la température, et la susceptibilité représente la dérivée de l'aimantation par rapport à la variation

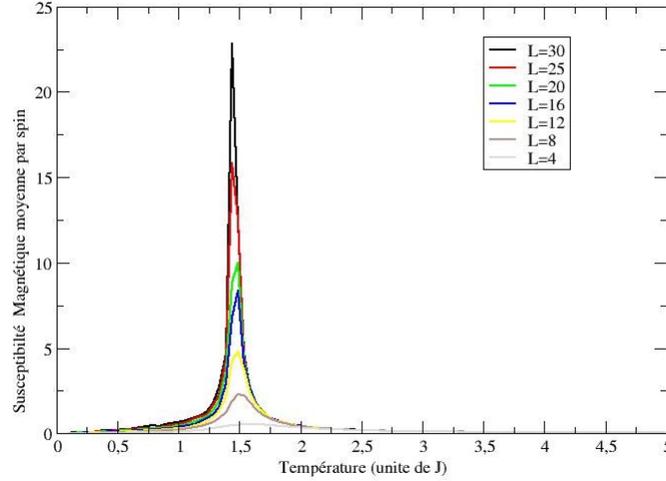


FIGURE 5.4: Susceptibilité magnétique en fonction de la température du modèle ferromagnétique de Heisenberg sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L .

d'un champ magnétique externe. Dans les simulations Monte Carlo on fait les calculs bien sûr à partir des fluctuations de ces grandeurs :

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}$$

pour la chaleur spécifique, et

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

pour la susceptibilité magnétique. Les deux manières de définir ces quantités sont bien sûr équivalentes, mais il se trouve que pour les simulations la deuxième définition donne de meilleurs résultats, car elle ne nécessite pas un calcul numérique de dérivé. Que l'on utilise l'une ou l'autre définition, on s'attend à ce que pour le système que nous étudions la chaleur spécifique et la susceptibilité s'annulent aussi bien à haute température qu'à très basse température. On voit que nos calculs suivent cette prédiction entièrement pour le cas de la susceptibilité. Pour le cas de la chaleur spécifique, on voit que les courbes des différentes tailles convergent toute vers une valeur finie, la même quelque soit la taille, lorsque la température se rapproche de zéro. Nous pensons que cet "anomalie" est due à la taille finie des systèmes, mais nous en avons trouvé aucune explication dans la littérature. Dans la ref[21] on trouve à la page 13, par exemple que "pour $T \rightarrow 0$ la chaleur spécifique est en accord avec la valeur limite correcte [$c(T = 0) = 1$]", sans donner d'indication quant à l'origine de cette limite considérée comme correcte. Or la théorie des ondes de spins, valide aux basses températures, pour le modèle ferromagnétique de Heisenberg prédit bien un comportement de $C \propto T^{3/2}$, qui donne donc $C(T = 0) = 0$.

La partie la plus importante des courbes est bien sur celle qui correspond aux pics dans les deux quantités. Ces pics en effet renseignent sur l'existence d'une transition de phase continue ou de second

ordre. Leurs positions donnent également une estimation de la température de Curie T_C qui est de $T_C \lesssim 1.5$. La position exacte de la température de Curie sera fournie par les cumulants de Binder.

5.2.2.3 Températures et exposants critiques

Le cumulant de Binder[22] est défini comme

$$U(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2},$$

Où $\langle M^2 \rangle$ et $\langle M^4 \rangle$ sont le second et le quatrième moment, respectivement, du paramètre d'ordre, qui est l'aimantation. Dans la limite thermodynamique où la taille du système $L \rightarrow \infty$, $U \rightarrow 0$ pour $T > T_C$, et $U \rightarrow 2/3$ pour $T < T_C$. Dans la limite thermodynamique donc la fonction $U(T, \infty)$ est discontinue à T_C . Une propriété importante du cumulant est que les courbes correspondant à deux tailles différentes se croisent en un point, et ce point ne dépend que faiblement des tailles L . Le cumulant est de ce fait un moyen très utile pour estimer de manière précise la valeur de la température critique.

Nous montrons dans la figure 5.5 les cumulants de Binder que nous avons calculé pour différentes taille du système. D'après le point d'intersection de ces cumulants de Binder associés à chaque taille L

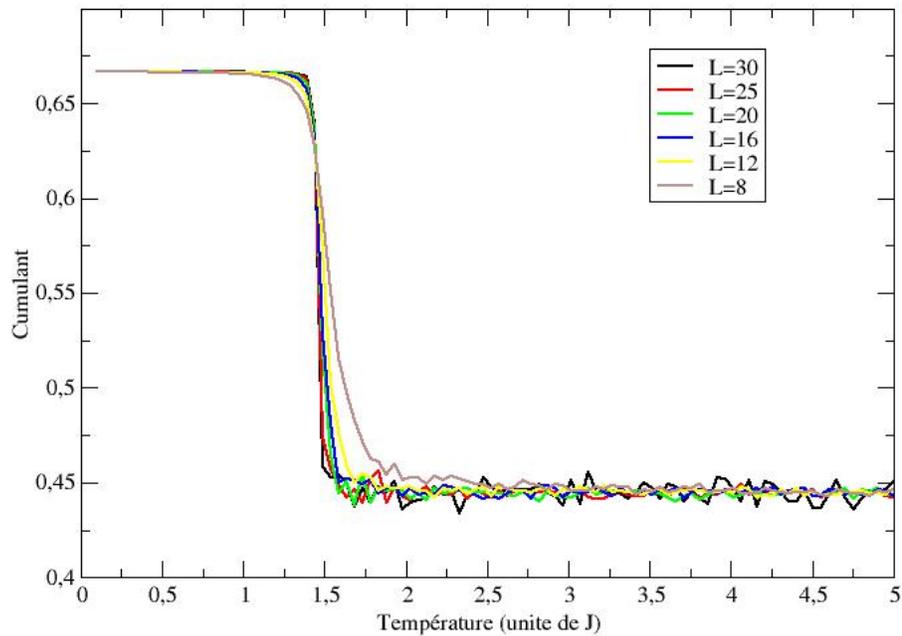


FIGURE 5.5: Cumulant de Binder du modèle ferromagnétique de Heisenberg sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L .

du réseau on peut tirer la valeur de la température de transition, que nous trouvons égale à $T_c = 1.449$. Cette valeur est en très bon accord avec celles rapportées dans la littérature.³

Le tableau suivant montre les valeurs de l'aimantation à la température critique pour les tailles $L = 30$, $L = 25$, et $L = 20$.

taille	aimantation $M(L, T_c)$
30	0.194
25	0.227
20	0.337

En utilisant l'expression de scaling de l'aimantation (définie dans la partie théorique) on retrouve : $\beta/\nu = 0.502$.

Cet exposant critique est en très bon accord à la valeur théorique. En effet, si on prend les deux valeurs théorique⁴ $\nu = 0.705$ et $\beta = 0.3644$, on trouve que $\frac{\beta_{th}}{\nu_{th}} = 0.5170$.

5.3 Anisotropie uniaxe et planaire

Nous considérons maintenant l'effet de la présence de l'anisotropie sur les propriétés du modèle de Heisenberg. Le but des simulations dans cette section est de mettre en évidence la compétition qui existe entre deux types particuliers d'anisotropies. Une compétition qui est responsable de l'apparition de différentes phases magnétiques en fonction de la température, mais aussi en fonction de l'importante relative des interactions en jeu. Cette étude est inspirée par le travail de la ref [24] auquel nous comparerons nos résultats.

5.3.1 Simulations du modèle de Heisenberg anisotrope

Le modèle de Heisenberg est isotrope car il est invariant par rapport à une rotation globale arbitraire des spins dans l'espace [11]. Cependant la présence d'autres interactions détruit cette isotropie dans les systèmes réels. On peut citer l'interaction spin-orbite, le champ cristallin et la présence de défauts... etc. Dans ce qui suit nous en étudions deux types :

- L'anisotropie de l'interaction d'échange J : l'interaction d'échange suivant l'axe z n'a pas la même valeur que celle suivant les directions normales à z . Cette interaction peut être le résultat d'un champ cristallin fort.
- L'anisotropie magnétique à un corps : pour un spin i elle vaut $D(S_i^z)^2$, où D est une constante positive qui caractérise l'importance de cette interaction, qui peut être le résultat de l'interaction spin-orbite. On voit que son effet est de favoriser une orientation normale à l'axe z , et agit individuellement sur chacun des spins.

³. voir le tableau qui montre les classes d'universalité (page 189) [9]. Voir aussi la ref[23] qui donne une valeur de $T_C = 1/0.6929 = 1.4432$.

⁴. voir [23]

Le modèle de Heisenberg anisotrope dans un champ cristallin est décrit par l'hamiltonien suivant [24] :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - A \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (5.1)$$

où le premier terme est l'interaction d'échange isotrope, le deuxième terme est l'anisotropie d'échange, et le troisième terme est l'anisotropie planaire. Les constantes J , A et D sont positives.

L'effet du premier terme, avec $J > 0$ est de favoriser une orientation parallèle de tous les spins. Ce terme à lui seul ne favorise aucune direction de l'espace. Le deuxième terme avec $A > 0$ favorise les configurations où tous les spins ont une composante maximale et suivant la même direction parallèlement à l'axe z . Au fait, le deuxième terme seul est identique à l'hamiltonien d'Ising. Ce terme donne un axe de facile aimantation qui est suivant z . Le troisième terme, avec $D > 0$, favorise les configurations où tous les spins sont entièrement dans le plan normal à l'axe z .

On voit que les deux termes supplémentaires favorisent des différentes orientations pour les spins, et vont donc rentrer en compétition, notamment aux basses températures. Aux basses températures le terme d'échange fait en sorte que les spins s'orientent tous parallèlement les uns aux autres, mais le choix de la direction globale de l'aimantation résultante est arbitraire. Le deuxième terme favorise alors une aimantation parallèle à l'axe z , et le troisième favorise une aimantation perpendiculaire à l'axe z . On peut donc prédire de manière qualitative que l'état fondamental et l'équilibre aux basses températures vont dépendre de l'importance relative des deux anisotropies en compétition, c'est à dire du rapport D/A . Pour $D \ll A$ le modèle décrit un système similaire à celui d'Ising. Pour $D \gg A$ le modèle décrit un système qui ressemble à celui du modèle XY . À une température suffisamment basse et une valeur de A fixe il y'aura donc un passage d'un comportement similaire à Ising vers un comportement similaire à XY à mesure que D augmente.

Dans la suite nous prenons $A = J = 1$ et J comme unité d'énergie, et nous varions la valeur de D . Nous utilisons la méthode Monte Carlo pour le modèle sur un réseau cubique simple. Nous avons fixé la taille latérale à $L = 14$. Le nombre de cycles Monte Carlo pour la thermalisation est fixé à 10000, et pour l'étape de mesure ce nombre est de 100000. Nous avons simulé le modèle sur la plage de températures $[0.001, 5]$ en commençant par la plus haute température. Nous réduisons en suite la température par un pas régulier de $\Delta T = 0.01$. Nous avons réduit ce pas à $\Delta T = 0.00349$ lorsque nous nous intéressons à la transition entre les deux régions principales à basse température : cas où $D \ll A$ et cas où $D \gg A$. Les observables que nous avons calculé sont l'aimantation, la susceptibilité, et la susceptibilité ou bien sa composante suivant l'axe z . La susceptibilité est calculée de la même manière que dans les chapitres précédents, à savoir :

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

Et la susceptibilité suivant l'axe z , comme

$$\chi_z = \frac{\langle M_z^2 \rangle - \langle M_z \rangle^2}{T}.$$

5.3.2 Résultats et discussions

5.3.2.1 La susceptibilité magnétique

La figure 5.6 montre la susceptibilité magnétique pour une taille de $L = 14$, en fonction de la température pour différentes valeurs de D .

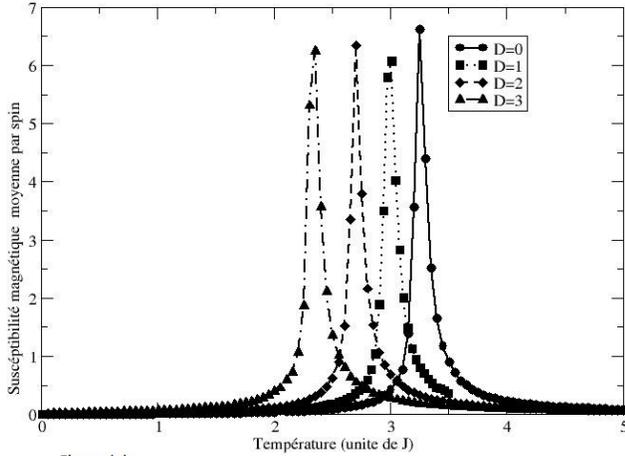


Figure (a)

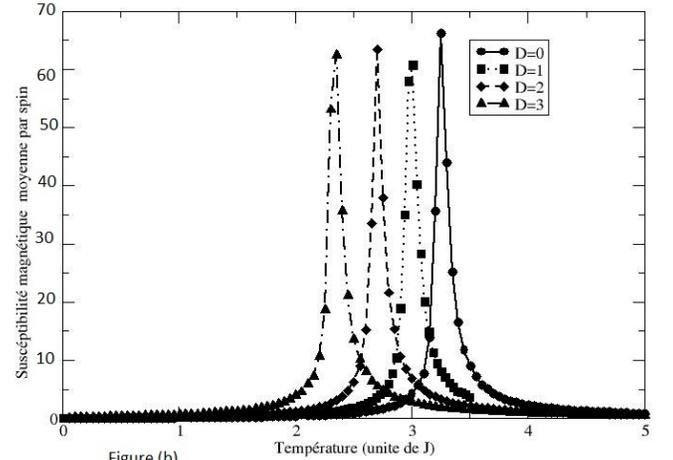


Figure (b)

FIGURE 5.6: Susceptibilité magnétique suivant l'axe z (**figure(a)**) et la susceptibilité du modèle de Heisenberg anisotrope (**figure (b)**) sur un réseau cubique simple de taille $L = 14$, en fonction de la température, et pour différentes valeur de D : $D = 0,1,2,3$.

On voit que la susceptibilité χ_z et de même que χ présente un pic qui renseigne sur une transition de phase, de la phase paramagnétique à haute température à la phase ferromagnétique à basse température. Le comportement de χ_z qui ressemble à celui de χ et renseigne que pour ces valeurs de D l'aimantation s'oriente suivant la direction z . On voit également que la position du pic se déplace vers les basses températures à mesure que D augmente. Au fait et comme montré sur la figure 5.7 le pic de χ_z disparaît pour les grandes valeurs de D .

Pour les valeurs intermédiaires de D ($3.5 \leq D \leq 4$) un deuxième pic apparaît dans la susceptibilité χ , comme montré sur la figure 5.8. Le deuxième pic apparaît à une température plus basse que celle du pic initial. Ce deuxième pic renseigne sur une autre transition de phase qui a lieu aux basses températures. Alors que la position du pic principal continue à se déplacer vers les basses températures, lorsque D augmente, la position du deuxième se déplace elle vers les hautes températures. A une valeur de $D \approx 4$, les deux pics fusionnent pour n'en donner qu'un seul. En examinant les courbes de l'aimantation et de l'énergie 5.9 on se rend compte que le pic initial correspond à une transition de phase du second ordre (continue), et que le deuxième pic correspond à une transition de phase du premier ordre (discontinue). En effet l'énergie et l'aimantation sont continues à la température qui correspond à la position du premier pic, alors que ces deux quantités enregistrent une discontinuité à la température correspondant

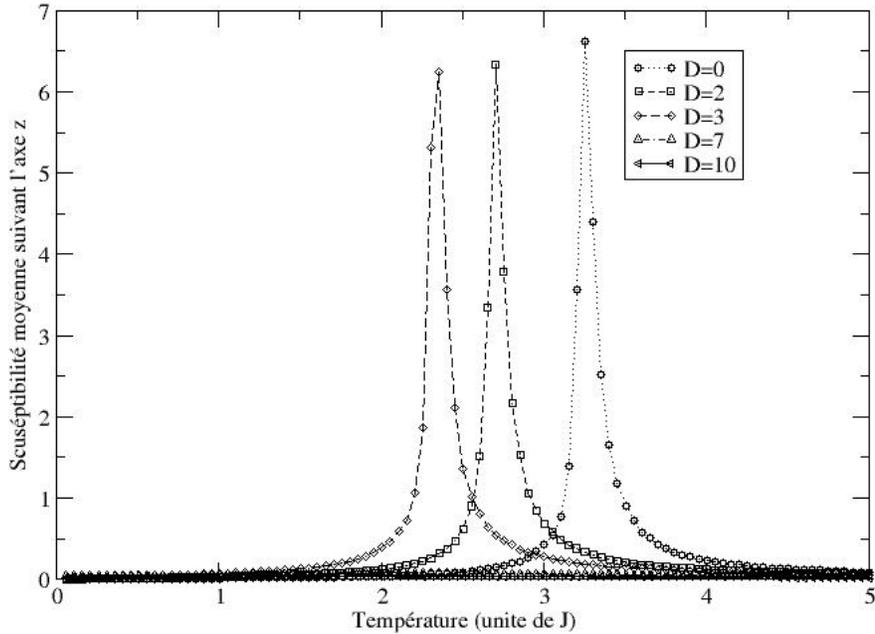


FIGURE 5.7: Susceptibilité magnétique suivant l'axe z , χ_z , du modèle de Heisenberg anisotrope sur un réseau cubique simple de taille $L = 14$, en fonction de la température, et pour différentes valeurs de D : $D = 0, 2, 3, 7, 10$.

à la position du deuxième pic. En repérant les positions des pics nous allons tracer un diagramme de phase du modèle étudié dans l'espace des paramètres T et D .

5.3.2.2 Diagramme de phase

Le diagramme de phase du modèle de Heisenberg anisotrope représenté par l'équation 5.1, dans l'espace (T, D) est montré dans la figure 5.10. Les lignes qui séparent les différentes phases sont obtenues à partir des positions des pics de la susceptibilité χ . La figure révèle une région dominée par un comportement proche du modèle d'Ising, séparée avec une région proche du modèle XY , par une ligne de transitions de premier ordre. Ces deux phases ordonnées sont séparées de la phase paramagnétique par une ligne de transition de second ordre. La ligne de transition de premier ordre s'étend de $D \approx 3.7$ à $D \approx 4$ où elle rencontre les lignes des transitions continues en un point bicritique.

5.3.2.3 Aimantation

La figure 5.11 montre la variation de l'aimantation suivant l'axe z et suivant le plan xy , en fonction de la température. L'aimantation est mesurée en variant la température dans les deux directions : des hautes vers les basses températures, et des basses vers les hautes températures. La taille du système

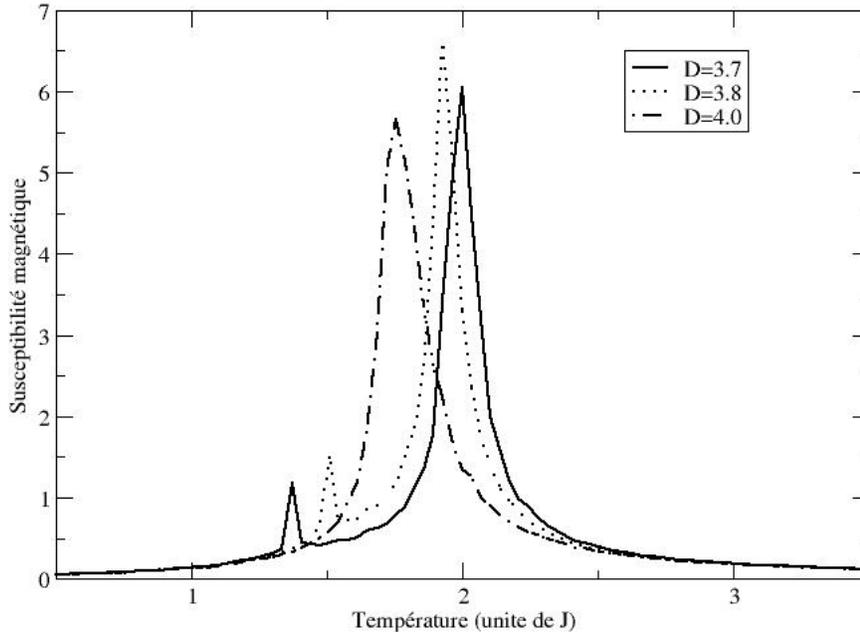


FIGURE 5.8: Susceptibilité magnétique moyenne du modèle de Heisenberg anisotrope eq 5.1 à $3d$ sur un réseau cubique simple de différentes valeur de D .

est $L = 14$, et pour les deux autres termes on a $A = 1$, et $D = 3.5$. La figure 5.11 montre les différents comportements de l'aimantation planaire et axiale dans l'intervalle des basses températures $0.95 < T < 1.2$. La figure montre clairement l'hystérésis dans le passage d'une aimantation suivant z (Ising) à une aimantation suivant le plan xy (XY). Ce comportement est le signe d'une coexistence des deux phases à la transition, et donc d'une transition de premier ordre entre les deux phases. En conclusion de cette étude nous remarquerons que nos résultats, du point de vue qualitatif, sont en très bon accord avec ceux de Friere, Plascak, et da Costa[24]. Néanmoins du point de vue quantitatif, nos résultats diffèrent légèrement.

5.4 Modèle de Heisenberg avec anisotropie et interactions dipolaires

Dans cette partie nous nous intéressons à l'étude de l'effet des interactions dipolaires sur les propriétés du modèle ferromagnétique de Heisenberg. On a vu (chapitre 2) que l'interaction dipolaire est très faible et ne peut expliquer l'ordre magnétique à haute température. Néanmoins, et à cause de sa très longue portée, en comparaison aux autres interactions (échange, anisotropie), elle rentre en compétition avec elles lorsque la taille du système augmente. Un des effets majeurs de cette interaction est l'ap-

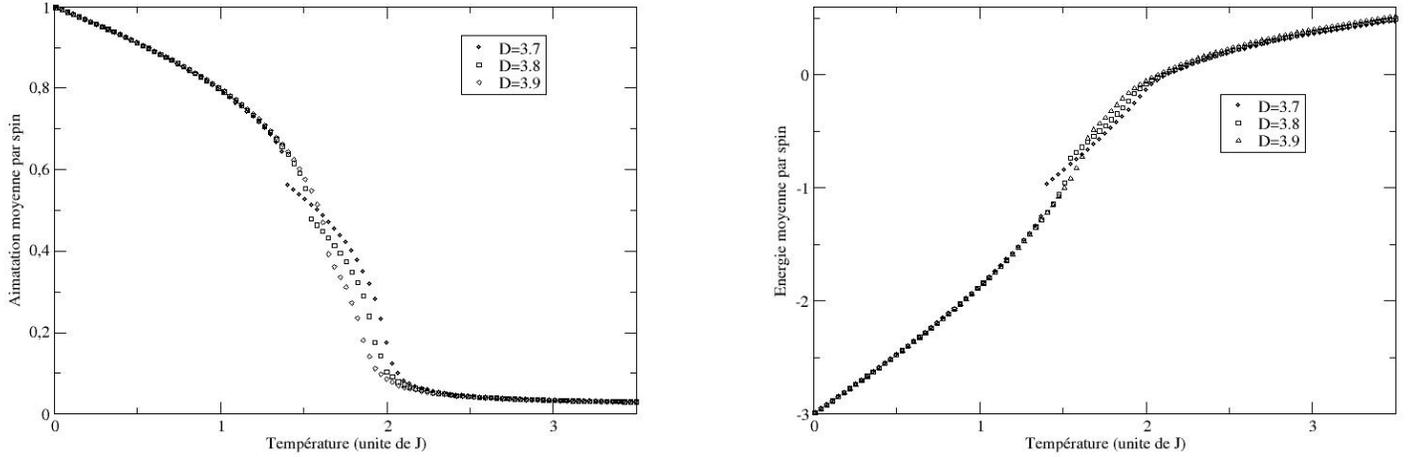


FIGURE 5.9: Aimantation et énergie moyenne sur un réseau cubique simple de taille $L = 14$, en fonction de la température, et pour différentes valeur de D .

partition de domaines magnétiques. Dans cette partie du travail nous nous limiterons à une situation bien plus simple, mais qui met en évidence et de manière claire les effets de l'interaction dipolaire sur l'orientation de l'aimantation. [25]

5.4.1 Le modèle

Le modèle est décrit par l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_{(ik)} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k}{r_{ik}^3} - 3 \frac{(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{u}_{ik})(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{u}_{ik})}{r_{ik}^3} \right] - A \sum_i (S_i^z)^2. \quad (5.2)$$

Le premier terme est l'interaction ferromagnétique isotrope. Le second terme est l'interaction dipolaire, et la sommation se fait sur toutes les paires de spin (j, k) , où r_k est la distance entre les deux spins, et \mathbf{u}_{ik} et le vecteur unitaire dirigé de la position du spin i vers la position du spin k . Le troisième terme décrit une anisotropie uniaxiale suivant l'axe z pour $A > 0$.

Nous avons étudié ce modèle sur un réseau carré, et nous avons fixé la valeur de J comme unité d'énergie et nous avons varié les valeurs de A et D . La taille du système est fixée à $L = 14$. Nous avons également introduit un rayon de coupure r_0 dans l'interaction dipolaire : c'est à dire que l'interaction dipolaire n'agit entre deux spins i et k que si leur distance $r_{i,k}$ est inférieure ou égale à r_0 . Nous avons pris $r_0 = 6$. Les études précédentes ont montré que les résultats dépendent de la valeur de r_0 , mais qu'il n'y a pas trop de changement qualitatif pour les valeurs de $r_0 \geq 6$. [25, 26]

Dans ce modèle on trouve également une compétition entre l'anisotropie uniaxiale (A), qui tend à orienter l'aimantation suivant l'axe z , et l'interaction dipolaire (D) qui favorise une aimantation dans le plan. Au fait l'interaction dipolaire tend à diminuer le champ démagnétisant, ou autrement dit à

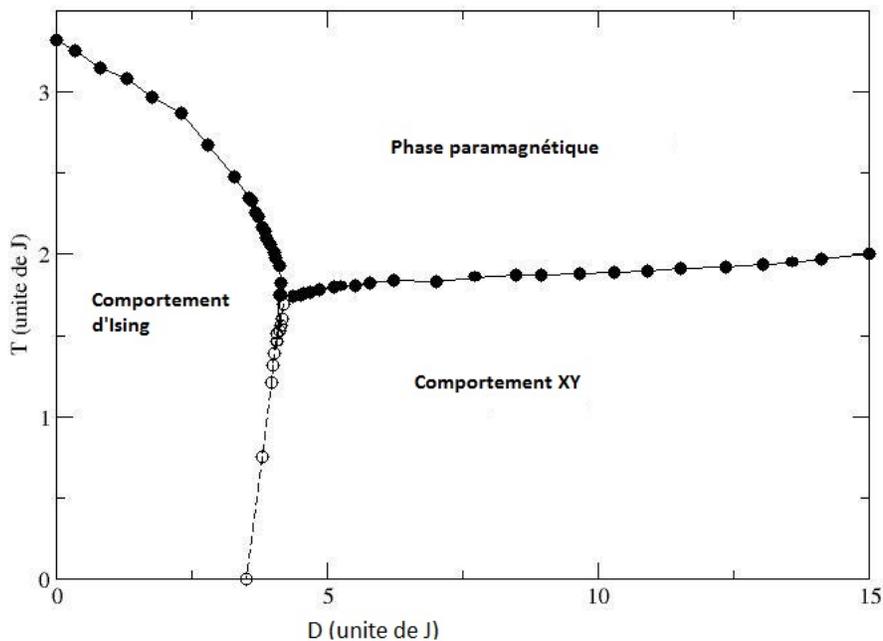


FIGURE 5.10: Diagramme de phase du modèle de Heisenberg anisotrope eq 5.1 dans l'espace (D, T) . Les cercles noirs représentent des transitions de second ordre, et les cercles vides représentent des transition de premier ordre. Les lignes séparant les phase se rencontrent en un point eutectique (bicritique).

supprimer les pôles magnétiques. Ce champ est le plus fort si l'aimantation est perpendiculaire au plan. Même lorsque l'aimantation est dans le plan l'interaction dipolaire tend à faire que les lignes de champ se referment sur elle-même : apparition de domaines.[26] Pour notre étude nous nous limiterons aux deux orientations possibles de l'aimantation : perpendiculaire ou bien dans le plan. On s'attend notamment à ce que le comportement de l'aimantation va dépendre du rapport (D/A) . Pour $D/A \ll 1$, l'aimantation est suivant l'axe z et le modèle ressemble fortement à celui d'Ising ($A > 0$). Pour $D/A \gg 1$ l'aimantation est dans le plan. On doit trouver des transitions entre ces deux types d'orientation à mesure que D varie et que A est fixe. Mais au préalable il est nécessaire de faire une étude à température nulle pour déterminer l'état fondamental correspondant à chaque couple de valeurs (D, A) .

Pour trouver l'état fondamental nous avons utilisé la méthode de la descente optimale. Cette méthode consiste à choisir une configuration de spins aléatoire, et à essayer de minimiser l'énergie totale en minimisant l'énergie de chaque spin. En effet pour un spin i quelconque on peut considérer sa contribution à l'énergie du système comme étant une interaction avec un champ local dû à ses voisins. Ainsi son énergie est donnée par :

$$E_i = -\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{h}_i, \quad (5.3)$$

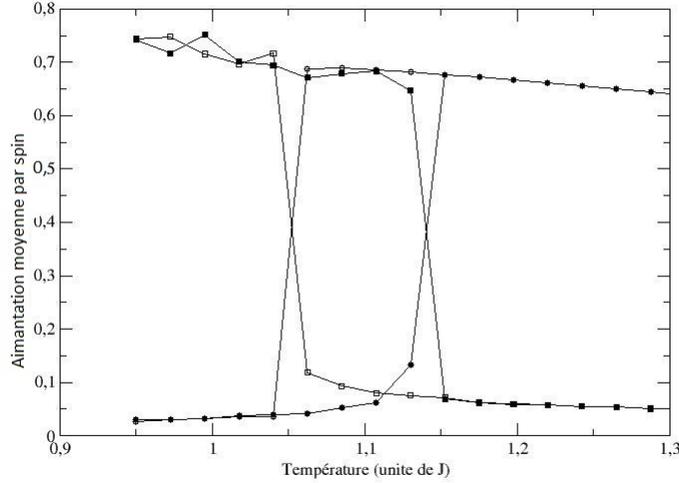


FIGURE 5.11: La variation de l'aimantation en fonction de la température. L'aimantation est mesurée dans deux directions : des hautes vers les basses, et des basses vers les hautes températures. La valeur de D est fixée à $D = 3.5$. Les carrés représente l'aimantation axiale (suivant z) et les cercles l'aimantation dans le plan xy .

Où

$$\mathbf{h}_i = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_j - D \left[\frac{\mathbf{S}_k}{r_{ik}^3} - 3 \frac{\mathbf{u}_{ik}(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{u}_{ik})}{r_{ik}^3} \right] + A.S_i^z \hat{\mathbf{e}}_z. \quad (5.4)$$

La méthode est itérative, et on considère que l'on a atteint la convergence lorsque la valeur du champ \mathbf{h}_i et la valeur de l'énergie totale ne varient plus entre deux itérations successives.

5.4.1.1 Aimantation

La figure 5.12 montre la variation de l'aimantation suivant l'axe z (axiale), et dans le plan xy en fonction de la température, pour une taille de $L = 14$. La valeur de A est $A = 2$, et celle de D est fixée à $D = 0.155$, juste au dessous de la valeur critique $(D/A)_c$ qui, correspond au passage de l'aimantation suivant l'axe z à l'aimantation dans le plan à $T = 0$.

L'état fondamental à $T = 0$ est caractérisé par une aimantation perpendiculaire au plan. Lorsque la température augmente à partir de zéro, l'aimantation perpendiculaire diminue et l'aimantation dans le plan augmente légèrement. Á une température $T \approx 0.3$ l'aimantation passe de manière abrupte d'une orientation perpendiculaire à une orientation plane. Il est à signaler que cette transition entre les deux orientations n'est observable que pour des valeurs de D/A légèrement inférieures à $(D/A)_c$.

La figure 5.13 montre l'aimantation en fonction de la température pour deux tailles différentes ($L = 30$, et $L = 50$) du système et pour les mêmes paramètres que ceux de la figure 5.12. Nos résultats sont en très bon accord avec ceux de la [25].

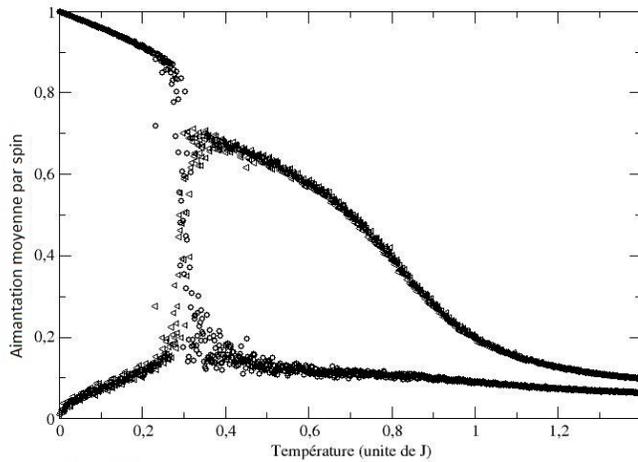


Figure (a)

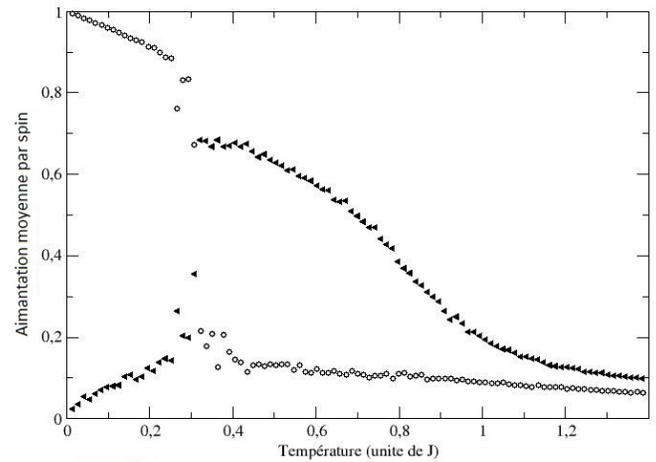


Figure (b)

FIGURE 5.12: La variation de l'aimantation en fonction de la température pour un réseau carré avec les paramètres $D = 0.155$, $A = 2$, pour deux différent pas ($\Delta T = 0.0139$ et $\Delta T = 0.00139$). L'aimantation suivant z est représentée par des triangles pleins, et l'aimantation dans le plan xy est représentée par des cercles vides.

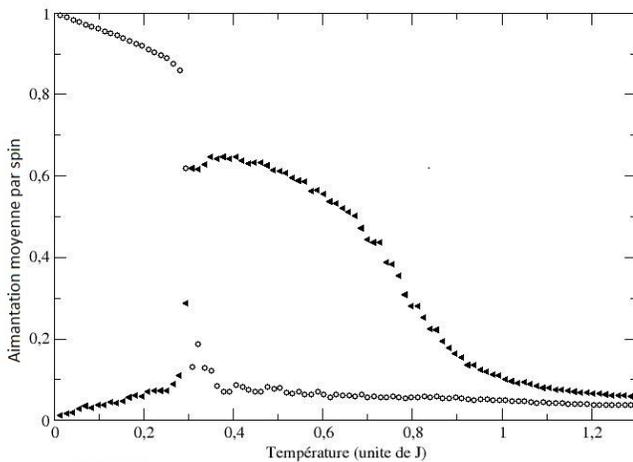


Figure (c)

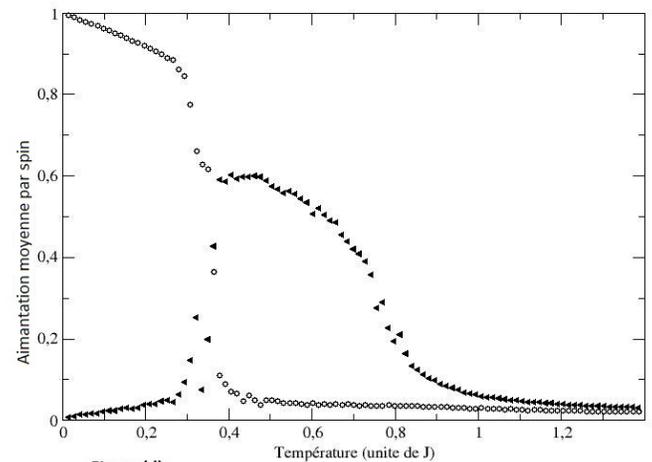


Figure (d)

FIGURE 5.13: La variation de l'aimantation en fonction de la température, pour des différentes tailles ; la figure (a) pour $L=30$, la figure (b) pour $L = 50$ avec les paramètres $D = 0.155$, $A = 2$, pour un pas $\Delta T = 0.0139$. L'aimantation suivant z est représentée par des triangles pleins, et l'aimantation dans le plan xy est représentée par des cercles vides.

Conclusion

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés de modèle magnétiques simples à l'équilibre thermodynamique. Pour ce faire nous avons fait appel à la méthode de simulation numérique Monte Carlo. Comme premier test, nous avons étudié le modèle d'Ising sur un réseau carré et sur un réseau cubique simple. Nous avons ainsi reproduit les propriétés connues du modèle, à savoir entre autre une transition de phase paramagnétique ferromagnétique à température finie. Ensuite nous avons étudié le modèle de Heisenberg ferromagnétique isotrope sur un réseau cubique simple. Nos calculs ont pu reproduire les propriétés de ce modèle. Suite à ce succès dans la simulation de modèles simples, nous nous sommes attaqués à un modèle plus réaliste, à savoir le modèle de Heisenberg anisotrope. Dans la première partie l'anisotropie y est incluse à travers deux termes supplémentaires, l'un décrit une anisotropie à un corps et l'autre une anisotropie d'échange. Dans la deuxième partie l'interaction dipolaire à longue portée est incluse. Celle-ci rentre en compétition avec les interactions d'échange et d'anisotropie lorsque la taille du système augmente. Dans cette partie nous avons pris en considération, et de manière claire les effets de l'interaction dipolaire sur l'orientation de l'aimantation. Nous avons mis en évidence l'existence d'une transition de phase de premier ordre dans l'espace des paramètres régulant les interactions. Nos résultats ont été validés par une comparaison à des travaux publiés dans la littérature.

Bibliographie

- [1] Hachi, B. (2012). Mémoire de Magister.
- [2] Gazeau, F. and Wilhelm, C. *UMR 7057 CNRS.Paris Université Paris Diderot* (2012).
- [3] Blundell, S. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press, (2001).
- [4] Nino, B. *La physique des transition de phase* **91**(31) (1970).
- [5] Tisza, L. In *Phase Transformations in Solids*, Smoluchowski, R., Mayer, J. E., and Weyl, W. A., editors, (1951).
- [6] Ngô, C. and Ngô, H. *Physique statistique Introduction*. Dunod, (1995).
- [7] Vauclair, S. *Eléments de Physique statistique Hasard,organisation,évolution*. InterEditions, (1993).
- [8] Itzykson, C. and Drouffe, J.-M. *Théorie statistique des champs 1*. Editions du CNRS, (1989).
- [9] Diep, H. T. *Physique Statistique : Cours, Exercices et Problèmes corrigés*. Ellipes, (2006).
- [10] Essam, J. W. and Fischer, M. E. *J.Chem and Phys* **842**, 39 (1963).
- [11] Diep, H. T. *Physique de la Matière Condensée*. Dunod, (2003).
- [12] Marder, M. P. *Condensed Matter Physics*. Wiley, (2010).
- [13] McCoy, B. *Scholarpedia* 5(7) :10313, (2010).
- [14] M. E. J. Newman, G. T. B. *Oxford University Press, Oxford* (1999).
- [15] Kotze, J. *arXiv :0803.0217v1 [cond-mat.stat-mech]* (2008).
- [16] Brezin, E. *Journal de Physique Colloques* , C7-1 – C7-15 (1975).
- [17] Mermin, N. D. and Wagner, H. *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133–1136 (1966).
- [18] Belorizky, E. and Gorecki, W. *Introduction à la Mécanique Statistique*. Office des Publications Universitaires, (1993).

- [19] Vesely, F. J. *Computational Physics : An Introduction*. Springer, 2 edition, (2001).
- [20] Weber, C., (2003). Thèse de Master.
- [21] Paauw, T. T. A., Compagner, A., and Bedeaux, D. *Physica* **79A**, 1–17 (1975).
- [22] Binder, K. *Z. Phys. B* **43**, 119–140 (1981).
- [23] Peczak, P., Ferrenberg, A. M., and Landau, D. P. *Phys. Rev. B* **43**, 6087–6093 (1991).
- [24] Friere, R. T. S., Plascak, J. A., and da Costa, B. V. *Braz. J. Phys.* **34**, 438–441 (2004).
- [25] Santamaria, C. and Diep, H. T. *J. Magn. Magn. Matter* **212**, 23–28 (1999).
- [26] Rapini, M., Dias, R. A., and Costa, B. V. *Phys. Rev. B* **75**, 014425–014431 (2007).