

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° :... Ph/TH/05/ 2021



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Hadjer BELALIA

Intitulé

**MODELE DE TYPE-ISING POUR LA
CONVERSION DE SPIN EN 2D: ETUDE PAR
LA DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE MONTE
CARLO**

Soutenu le 24 / 06 /2021 devant le jury composé de:

H'mida LATELLI (Prof.)	Université de M'sila	Président
Abboud METATLA (MC-A)	Université de M'sila	Rapporteur
Siham KALLI (MC-B)	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2020/2021

Dédicace

Je dédie ce travail à ma chère mère et à mon cher père et à mes frères, mes sœurs, à toute ma famille, mes connaissances et mes amis, en particulier les étudiants de deuxième année de master en physique théorique.

REMERCIEMENTS

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

Je remercie tout d'abord ALLAH tout puissant pour m'avoir donné la santé, la patience, et le courage pour mener à terminer ce mémoire. Je remercie mes parents qui me sont toujours le meilleur soutien que vous ma bénédiction, je transmets mes remerciements à mon encadreur estimé Dr. Abboud METATLA avec tout le respect et l'appréciation et je remercie vos efforts avec moi, et je remercié aussi les membres du jury de discussion, aussi je remercie ma famille et ma meilleur amie Donya d'être à ma coté, mes connaissances et mes amies et bravo à tous de près et de loin.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION.....	5
CHAPITRE 01: CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES.....	7
1- TYPES DE CONVERSION DE SPIN.....	7
1-1-TRANSITION GRADUELLE.....	7
1-2 TRANSITION ABRUPTE.....	7
1-3- TRANSITION AVEC HYSTERESIS.....	7
1-4- TRANSITION EN DEUX ETAPES.....	7
2- QUELQUE NOTION ET LOIS DE PHYSIQUE STATISTIQUE.....	8
2-1-ENTROPIE, VALEUR MOYENNE ET MATRICE DENSITE.....	8
2-2-ENSEMBLES STATISTIQUES.....	9
2-2-1-ENSEMBLE MICRO-CANONIQUE.....	9
2-2-2-ENSEMBLE CANONIQUE.....	9
2-2-3-ENSEMBLE GRAND CANONIQUE.....	10
CHAPITRE 02: MODELE D'ISING ET MODELE DE TYPE-ISING POUR LA CONVERSION DE SPIN.....	13
1-MODELE D'ISING.....	13
1-1- CHAINE D'ISING.....	13
1-2- THEORIE DE CHAMP MOYEN.....	14
1-3- SOLUTION EXACTE D'ONSAGER.....	16
2- MODELE DE TYPE ISING SIMPLE.....	16
3- APPROCHE PERCOLATIVE POUR LE MODELE DE TYPE ISING FERROMAGNETIQUE.....	18
CHAPITRE 03: TECHNIQUES MC, DYNAMIQUES DE METROPOLIS ET DES CLUSTERS.....	21
1- DEFINITION DE LA SIMULATION.....	21
2- PARTICULES DANS L'ESPACE CONTINU.....	22
3- IMPORTANCE ECHANTILLONNAGE ET BILAN DETAILLE.....	23
4- ALGORITHMES DES CLUSTERS.....	25
CHAPITRE 04: RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION.....	27
1- PROPRIETES PERCOLATIVES DU MODELE.....	27
2- COMPARAISON ENTRE SYSTEMES FORTEMENT ET FAIBLEMENT COOPERATIFS.....	28
CONCLUSION.....	31

INTRODUCTION

INTRODUCTION:

Le modèle d'Ising est certainement le plus célèbre modèle de Physique Statistique, il a été le sujet des milliers d'articles de recherche depuis son introduction en 1920. Sa simplicité et la richesse de son comportement ont rapidement fait de ce modèle un laboratoire pour tester l'exactitude des nouvelles idées et méthodes en Physique Statistique. En outre, de par ses nombreuses interprétations, il est utilisé pour décrire qualitativement, et parfois quantitativement, une grande variété de situations. Comme nous le verrons dans le deuxième chapitre, le modèle d'Ising est également l'un des modèles les plus simples présentant une transition de phase, c'est Lars Onsager en 1944, qui a donné une analyse détaillée du modèle d'Ising bidimensionnel en prouvant l'existence d'une transition de phase dans la limite thermodynamique.

Dans les années 1970 Wajnflasz et Pick font usage de ce modèle pour décrire le phénomène du passage des ions de transitions d'un état «Bas Spin» vers un état «Haut Spin » dans les molécules à conversion de spin, où ils ont introduit un terme qui représente le champ des ligands, et le modèle a été nommé «modèle de type-Ising», ce dernier n'est soluble exactement qu'à une dimension, d'où son étude en deux et trois dimensions se fait numériquement.

Il y a plusieurs techniques des simulations numériques, parmi lesquelles la Méthode de Monte Carlo (MC) est la plus utilisée, elle est conçue pour effectuer le calcul des grandeurs thermodynamiques des modèles physiques, en particulier, elle est très utilisée dans l'étude des phénomènes critiques et les transitions de phase afin de déterminer la température de transition et bien analyser les résultats obtenus, ces techniques MC sont utilisées sous plusieurs dynamiques, historiquement celle de Métropolis est la première à être utilisée. Dans ce mémoire nous utilisons les techniques MC via la dynamique des clusters, précisément celle de Swenden-Wang, pour effectuer l'étude du modèle de type-Ising pour les systèmes à transition de spin. Le mémoire contient quatre chapitres, en plus que l'introduction et la conclusion : dans le premier chapitre nous donnons une définition pour le phénomène de la conversion de spin et les différents types de ce phénomène en plus d'un rappel sur quelques lois de la physique statistique, dans le deuxième chapitre nous rappelons le modèle d'Ising, de type-Ising et quelques relations importantes de l'approche percolative pour les systèmes à conversion de spin ferromagnétique, le troisième chapitre est consacré aux techniques Monte Carlo, le dernier chapitre est consacré aux résultats de simulations MC et leurs discussions.

CHAPITRE 01

CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

1-Types de conversion de spin:

Dans l'étude du phénomène de la conversion de spin, on s'intéresse à la fraction de molécules dans l'état haut spin n_{HS} en fonction de la température, d'où on obtient des courbes de conversion de spin avec différentes allures, ces courbes nous permettent de distinguer les types de conversion de spin.

1-1-Transition graduelle:

Ce type de transition est le plus fréquent dans le cas des systèmes de faibles interactions coopératives, généralement, apparue avec les systèmes en solution.

1-2- Transition abrupte:

Ce type de transition concerne les systèmes avec des interactions coopératives fortes.

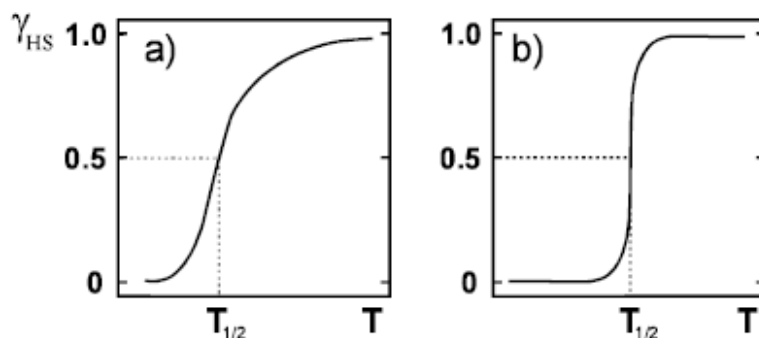


Figure 01: a)- Transition graduelle de spin, b)- Transition abrupte.

1-3- Transition avec hystérésis:

Ce type de transition est non réversible, et concerne les systèmes de très forte coopérativité, l'intervalle des températures où le cycle d'hystérésis apparaît peut être étroit ou large. Cette hystérésis confère au système une bistabilité sur toute une gamme de températures, donc on a un effet mémoire qui peut être mis à profit dans l'élaboration de dispositifs de stockage de l'information et de commutation moléculaire.

1-4- Transition en deux étapes:

Dans ce genre de transition, la courbe de conversion présente au voisinage de $n_{HS} = 0.5$ un palier presque horizontal, qui résulte de la formation préférentielle des paires en états (BS - HS).

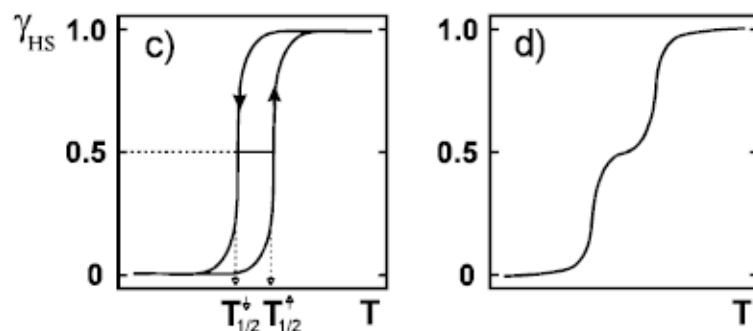


Figure 02: a)-Transition avec hystérésis, b)- Transition en deux étapes

2- Quelques notions et lois de physique statistique

Nous allons ici faire un rappel sur quelques notions et lois de physique statistique quantique et nous nous concentrons sur l'ensemble statistique canonique, le cadre dans lequel nous faisons la plupart des calculs de ce mémoire.

2-1- Entropie, valeur moyenne et matrice densité:

Soit Ω le nombre de configurations microscopiques (états microscopiques des particules qui conduisaient au même état macroscopique), par définition l'entropie s'écrit sous la forme:

$$S = k_B \log \Omega \quad (1.1)$$

Où k_B est la constante de Boltzmann; $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$.

La définition générale de S est donnée par l'expression :

$$S = -k_B \text{Tr}[\rho \log \rho] \quad (1.2)$$

Avec ρ est la matrice densité (ou l'opérateur densité) qui est définie à partir de la structure de la valeur moyenne.

Soit un système dans l'état $|\Psi\rangle$, la valeur moyenne de l'opérateur A dans cet état est donnée par :

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle \quad (1.3)$$

D'où on a la matrice densité :

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (1.4)$$

Et la valeur moyenne de A :

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) \quad (1.5)$$

La matrice densité a les propriétés suivantes :

$$\text{Tr}(\rho) = 1; \rho^2 = \rho; \rho^+ = \rho \quad (1.6)$$

Ici la définition de la trace est :

$$\text{Tr}(X) = \sum_n \langle n | X | n \rangle \quad (1.7)$$

Si les objets qui constituent le système sont tous dans le même état $|\Psi\rangle$, donc le système est dans un état pur, ou on a un ensemble pur.

Si un ensemble contient différents états, on l'appelle un système mixte. Supposons que l'état $|\Psi_1\rangle$ apparait avec la probabilité p_1, \dots , l'état $|\Psi_i\rangle$ apparait avec la probabilité p_i , etc ..., avec:

$$\sum p_i = 1 \quad (1.8)$$

La valeur moyenne de l'observable A dans ce cas est :

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i \langle \Psi_i | A | \Psi_i \rangle \quad (1.9)$$

Cette valeur moyenne peut s'exprimer en termes de la matrice densité:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A); \text{Tr} \rho = 1; \rho^2 \neq \rho; \text{Tr} \rho^2 < 1; \rho^+ = \rho \quad (1.10)$$

Dans une représentation diagonale de ρ , on a :

$$S = -k_B \text{Tr}[\rho \log \rho] = -k_B \sum_n p_n \log p_n \quad (1.11)$$

2-2-Ensembles statistiques:

2-2-1-Ensemble micro-canonique:

Considérons un système isolé, avec un nombre de particules et volume fixes, et soit H son hamiltonien, qui a comme valeurs propres et états propres E_n et $|n\rangle$ respectivement, en plus, supposons que toutes les valeurs E_n appartiennent à l'intervalle $[E, E + \delta E]$, où δE est petit. Un système avec ces propriétés est appelé un ensemble micro canonique, sa matrice densité est donnée par :

$$\rho_{mc} \sum_n p(E_n) |n\rangle \langle n| \quad (1.12)$$

Avec:

$$p(E_n) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E)} & ; E \leq E_n \leq E + \delta E \\ 0 & \text{dans tous les autres cas} \end{cases} \quad (1.13)$$

$p(E_n)$ est la probabilité que le système se trouve dans l'état $|n\rangle$ associé à l'énergie E_n , dans le cas d'un système isolé, tous les états sont également probables, $\Omega(E)$ est le nombre d'états accessibles du système, c'est-à-dire le nombre d'états du système dont l'énergie est comprise entre E et $E + \delta E$ (le nombre de configurations).

L'entropie S_{mc} pour un ensemble micro canonique est :

$$S_{mc} = -k_B \text{Tr}[\rho_{mc} \log \rho_{mc}] = -k_B \text{Tr} \left[\rho_{mc} \log \frac{1}{\Omega(E)} \right] = k_B \log \Omega(E) \quad (1.14)$$

Notons que $\text{Tr} \rho_{mc} = 1$.

2-2-2-Ensemble canonique:

On considère un système qui échange de l'énergie avec un autre système sans échange de particules, on suppose que ce dernier est beaucoup plus gros et on l'appelle le réservoir, et puisque l'effet du réservoir se limite à l'imposition de sa température sur le système, donc on s'intéresse à l'hamiltonien H qui gouverne ce système.

La matrice densité dans ce cas, un ensemble canonique, est donnée par :

$$\rho_c = \frac{e^{-\beta H}}{Z}; \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.15)$$

Avec

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) \quad (1.16)$$

Qui est la fonction de partition.

L'énergie libre du système est :

$$F = -k_B T \log Z \quad (1.17)$$

L'entropie est donnée par :

$$S_c = -k_B \text{Tr}(\rho \log \rho_c) = -k_B \log \rho_c = \frac{1}{T} (\bar{E} + k_B T \log Z) \quad (1.18)$$

Avec

$$\bar{E} = \langle H \rangle = \text{Tr}(\rho_c H) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z \quad (1.19)$$

d'où la fonction libre F s'écrit sous la forme :

$$F = \bar{E} - TS_c \quad (1.20)$$

Il est facile de montrer que l'entropie est additive. Si on a deux sous-systèmes avec $\rho_1 = \frac{e^{-\beta H_1}}{Z_1}$ et $\rho_2 = \frac{e^{-\beta H_2}}{Z_2}$ sont les matrices densités pour ces deux sous-systèmes, la matrice densité pour le système total est :

$$\rho = \rho_1 \cdot \rho_2 \quad (1.21)$$

D'où l'entropie du système total :

$$S = S_1 + S_2 \quad (1.22)$$

Qu'on peut le généraliser aisément pour un système formé de n sous-systèmes.

2-2-3-Ensemble grand canonique:

Supposons qu'un système qui échange l'énergie avec un réservoir, peut aussi échanger la matière (les particules) avec ce dernier. En plus, supposons que le système total formé du système et le réservoir est isolé. L'énergie totale, le nombre total de particules et le volume total de ce système sont respectivement :

$$E = E_1 + E_2; N = N_1 + N_2; V = V_1 + V_2 \quad (1.23)$$

Avec les indices (1) et (2) désigne le premier sous-système (le système) et le deuxième sous-système (le réservoir). Statistiquement, on a un ensemble grand canonique.

La matrice densité de l'ensemble grand canonique est donnée par :

$$\rho_g = \frac{e^{-\beta(H_1 - \mu N_1)}}{Z_g} \quad (1.24)$$

Avec H_1 , l'hamiltonien du système, μ est le potentiel chimique du réservoir, qui est définie par la relation :

$$\mu = -T \left(\frac{dS}{dN} \right)_{E,V} \quad (1.25)$$

Z_g est la grande fonction de partition :

$$Z_g = \text{Tr} \left[e^{-\beta(H_1 - \mu N_1)} \right] = \sum_{N_1} \text{Tr} e^{(-\beta H_1 + \beta \mu N_1)} = \sum_{N_1} Z(N_1) e^{\beta \mu N_1} \quad (1.26)$$

où la trace dans la première expression est différent que celle dans la deuxième.

L'entropie de l'ensemble grand canonique est donnée par :

$$S_g = -k_B \text{Tr}(\rho_g \log \rho_g) = -k_B \langle \log \rho_g \rangle = \frac{1}{T} (\bar{E} - \mu \bar{N}) + k_B \log Z_g \quad (1.27)$$

Où nous avons omis l'indice (1) ici, puisque la contribution du réservoir (le deuxième sous-système) se limite sur la température T et le potentiel chimique μ .

En analogie avec l'énergie libre F de l'ensemble canonique, le grand potentiel est définie par :

$$\Phi = -k_B T \log Z_g \quad (1.28)$$

Et d'après l'expression de l'entropie S_g , on obtient :

$$\Phi (T, \mu, V) = \bar{E} - T S_g - \mu \bar{N} \quad (1.29)$$

CHAPITRE 02

MODELE D'ISING ET MODELE DE TYPE- ISING POUR LA CONVERSION DE SPIN

MODELE D'ISING ET MODELE DE TYPE-ISING POUR LA CONVERSION DE SPIN

1- Modèle d'Ising:

1-1- Chaîne d'Ising (1D):

On peut calculer la solution exacte du modèle d'Ising le long d'une boucle fermée. Le problème à une seule dimension nous permettra d'obtenir quelques résultats. On peut calculer analytiquement la fonction de partition Z et l'énergie interne U pour une boucle fermée de N spins, on a :

$$U = -J \sum_{k=1}^N \sigma_k \sigma_{k+1} - H \sum_{k=1}^N \sigma_k \quad (2.1)$$

Avec $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ pour satisfaire aux conditions périodiques. On peut symétriser le terme du champ magnétique. On obtient une expression équivalente:

$$U = -J \sum_{k=1}^N \sigma_k \sigma_{k+1} - H \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k + \sigma_{k+1}}{2} \quad (2.2)$$

Pour extraire les grandeurs thermodynamiques, il faut écrire la fonction de partition canonique. Elle est donnée par les 2^N termes :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \exp \left[\beta \sum_{k=1}^N \left(J \sigma_k \sigma_{k+1} + \frac{1}{2} H (\sigma_k + \sigma_{k+1}) \right) \right] \quad (2.3)$$

On remarque que cette fonction de partition peut s'écrire sous la forme d'un produit de N matrices Γ :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | \Gamma | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \Gamma | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | \Gamma | \sigma_1 \rangle \quad (2.4)$$

La matrice de transfert Γ est donnée par:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \exp[\beta(J+H)] & \exp[-\beta J] \\ \exp[-\beta J] & \exp[\beta(J-H)] \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Dont chaque élément est un facteur de Boltzmann de l'énergie d'une paire de spins. Les 4 éléments correspondent aux 4 configurations possibles. Le calcul de la fonction de partition nécessite le calcul de la puissance Nième de Γ . Il suffit donc de considérer les deux valeurs propres de Γ :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | \Gamma^N | \sigma_1 \rangle = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (2.6)$$

Les deux valeurs propres de la matrice de transfert Γ sont données par

$$\lambda_{\pm} = \exp(\beta J) \left[\cosh(\beta H) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)} \right] \quad (2.7)$$

Comme $\lambda_+ > \lambda_-$, la fonction de partition est dominée par le terme λ_+^N . On remarque que pour un champ nul, la plus grande valeur propre se réduit à $2 \cosh(\beta J)$. Pour calculer la magnétisation par spin dans le système, on utilise la relation

$$m = \frac{M}{m} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right) = \frac{k_B T}{\lambda_+} \frac{\partial \lambda_+}{\partial H} \quad (2.8)$$

Soit une magnétisation par spin qui vaut

$$m = \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}} \quad (2.9)$$

Pour produire une magnétisation à température finie, il faut obligatoirement un champ H non nul. Cela signifie qu'il n'y a pas de transition de phase à une seule dimension. Il n'y a donc aucune singularité dans cette version du modèle.

1-2- Théorie de champ moyen :

Dans l'approximation de champ moyen, chaque spin pris individuellement voit un champ h_{σ_i} formé par les autres spins. La somme sur toutes les paires de spins voisins peut alors être approximée par:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = q \sum_i \sigma_i \langle \sigma \rangle = q \langle \sigma \rangle \sum_i \sigma_i \quad (2.10)$$

Où q est le nombre de coordination du réseau, c.-à-dire le nombre de voisins.

Pour un réseau carré par exemple, on a $q = 4$, pour un réseau triangulaire $q = 6$. L'approximation de champ moyen reste valable pour d'autres réseaux. On remarque que le champ moyen découple les spins. Notons que le champ moyen h_{σ_i} n'est rien d'autre que la magnétisation par spin m :

$$\langle \sigma \rangle = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-} = m \quad (2.11)$$

Si on s'intéresse à un spin particulier, la probabilité pour qu'il soit positif est donnée par :

$$p_+ = \frac{\exp(\beta J q m + \beta H)}{\exp(\beta J q m + \beta H) + \exp(-\beta J q m - \beta H)} \quad (2.12)$$

Et on a une probabilité $p_- = (1 - p_+)$ qu'il soit négatif. On obtient finalement une magnétisation :

$$m = p_+ - p_- = \tanh[\beta(Jqm + H)] \quad (2.13)$$

Que nous allons tout d'abord étudier sans champ magnétique ($H = 0$). Pour obtenir l'équation d'état magnétique des spins, il faut résoudre cette dernière relation pour m . Le plus simple est de la résoudre graphiquement en recherchant les intersections de la droite $y(m) = m$ et de la courbe $y(m) = \tanh(\beta J q m)$. Ces intersections possibles sont représentées ci-dessous.

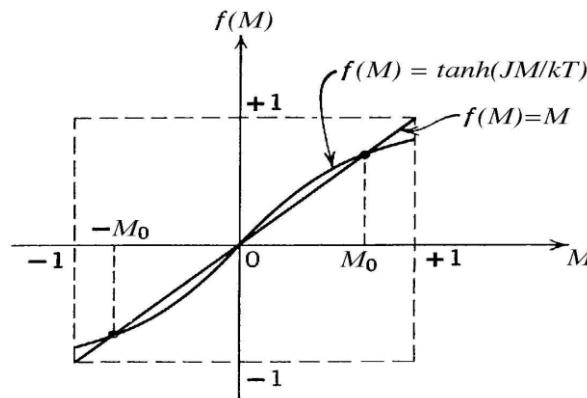


Figure 02: Etude graphique de la magnétisation dans l'approximation de champ moyen.

Il existe une seule intersection triviale $m = 0$ à haute température. C'est le cas du paramagnétisme. A basse température, on a 3 solutions $m = \{-m_0, 0, m_0\}$. Les deux solutions non-nulles sont stables et

correspondent à 2 états de magnétisation spontanée. On montre que l'on passe de 1 à 3 solutions au point critique:

$$T_c = \frac{Jq}{k_B} \quad (2.14)$$

c.-à-dire lorsque la tangente hyperbolique a une pente égale à 1 à l'origine des axes. Comme la magnétisation m_0 est faible lorsque la température s'approche du point critique par dessous, on peut développer la tangente hyperbolique en série de m_0 . Ce développement en série ($\tanh x = x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \dots$) conduit à:

$$m_0 = \beta J q m_0 - \frac{1}{3} (\beta J q)^3 m_0^3 + \dots \quad (2.15)$$

Et si on s'arrête au troisième ordre, on obtient:

$$m_0(T) = \pm \sqrt{3} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.16)$$

On a donc un comportement singulier de la magnétisation:

$$m_0(T) \approx (T_c - T)^{\frac{1}{2}} \quad (2.17)$$

Lorsque la température se rapproche de T_c par dessous.

On peut également calculer la susceptibilité magnétique dans cette approximation de champ moyen. La susceptibilité par spin est donnée par:

$$\chi(H, T) = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T \quad (2.18)$$

Qui conduit à:

$$\chi(0, T) = \frac{\beta \operatorname{sech}^2(\beta q m)}{1 - \beta q J \operatorname{sech}^2(\beta J q m)} = \frac{1}{k_B (T - T_c)} \quad (2.19)$$

Lorsque la température est abaissée vers T_c :

$$\chi(0, T) \approx \frac{1}{2k_B (T_c - T)} \quad (2.20)$$

Pour $T < T_c$, on obtient donc une divergence de la susceptibilité magnétique au point critique.

Notons que l'approximation de champ moyen néglige complètement la dimensionnalité du réseau considéré. Par exemple, un réseau triangulaire ($q = 6$) y est équivalent à un réseau cubique ($q = 6$). De plus, cette approximation prédit une transition pour une chaîne de spins ($q = 2$) ce qui est contraire à la solution exacte que nous avons obtenue via la méthode de la matrice de transfert. Il faut donc prendre cette approximation de champ moyen avec beaucoup de précautions.

1-3- Solution exacte d'Onsager:

En utilisant la méthode de la matrice de transfert T étendue au cas bidimensionnel, Onsager a obtenu la solution exacte à $d = 2$ lorsque le champ magnétique est nul ($H = 0$). Sur un réseau carré, le modèle d'Ising présente une transition de phase en:

$$T_c = \frac{2J}{k_B \ln(1+\sqrt{2})} \approx \frac{2.269J}{k_B} \quad (2.21)$$

Soit environ la moitié de la valeur critique prédite par la théorie de champ moyen. Au-delà de cette température critique exacte, la magnétisation s'annule brutalement. Lorsque $T < T_c$, la magnétisation par spin m varie comme:

$$m \approx (T_c - T)^\beta \quad (2.22)$$

Avec un exposant faible $\beta = 1/8$.

La susceptibilité magnétique χ diverge en T_c . On a :

$$\chi(0, T) \approx |T_c - T|^{-\gamma} \quad (2.23)$$

Avec cette fois-ci un exposant $\gamma = 7/4$ différent du cas $\gamma = 1$ obtenu dans la théorie de champ moyen. La chaleur spécifique a elle aussi un comportement bien différent, elle diverge de façon logarithmique en T_c . On a:

$$c_h \cong -\ln |T_c - T| \quad (2.24)$$

Mais l'énergie interne est continue en T_c ce qui signifie qu'il n'y a pas de chaleur latente. On assiste donc bien à une transition du second ordre.

2-Modèle de type Ising simple:

Pour un composé à conversion de spin mononucléaire, nous admettons que la molécule présente une configuration fondamentale caractérisée par :

-Un état de spin (BS) pour l'ion métallique, un rayon moyen r_{BS} associé aux positions moyennes des atomes qui constituent la molécule, et une fréquence de vibrations intramoléculaires ω_{BS} .

Une configuration excitée caractérisée par :

-Un état de spin (HS) pour l'ion métallique, un rayon moyen r_{HS} différent de r_{BS} associé aux nouvelles positions moyennes des atomes de la molécule, et une fréquence de vibrations ω_{HS} .

On appelle Δ la différence en énergie entre les énergies minimales des deux configurations, et on introduit un opérateur de spin fictif qui a deux valeurs : -1 associée à l'état (BS) et $+1$ associée à l'état (HS), et puisque pour un spin s il existe $(2s+1)$ états, donc nous appelons g_{BS} et g_{HS} les dégénérescences des valeurs propres (-1) et $(+1)$ respectivement ($g_{BS} < g_{HS}$), avec ces notations l'hamiltonien de la molécule (i) s'écrit :

$$H_{ij} = \frac{\Delta}{2} \sigma_i + \sum_{j(j \neq i)} j_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.25)$$

et l'hamiltonien total du système s'écrit :

$$H = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} \sigma_i + \sum_{\langle i,j \rangle} j_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.26)$$

Où $\sum_i \rightarrow$ indique la somme sur les molécules du système, $\sum_{\langle i,j \rangle} \rightarrow$ indique la somme sur les paires de molécules, et j_{ij} est un paramètre d'interaction entre les molécules i et j . H ici est un hamiltonien de type Ising.

Dans l'approximation de champ moyen, H_i s'écrit :

$$H_i = \frac{\Delta}{2} \sigma_i + J \sigma_i \langle \sigma \rangle \quad (2.27)$$

et

$$H = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} \sigma_i + \sum_i J \sigma_i \langle \sigma \rangle \quad (2.28)$$

H_i a comme valeurs propres :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\Delta}{2} - J \langle \sigma \rangle \\ +\frac{\Delta}{2} + J \langle \sigma \rangle \end{array} \right. \quad (2.29)$$

Ces deux valeurs propres sont dégénérées, leurs degrés de dégénérescences sont g_{BS} et g_{HS} respectivement.

Dans le cadre de la statistique de l'ensemble canonique, la fonction de partition du système est :

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_l e^{-\beta E_l} = \prod_{i=1}^N Z_i \quad (2.30)$$

Où (l) représente tous les états possibles du système. On a:

$$Z_i = g_{BS} e^{-\beta \left(\frac{\Delta}{2} - J \langle \sigma \rangle \right)} + g_{HS} e^{-\beta \left(\frac{\Delta}{2} + J \langle \sigma \rangle \right)} \quad (2.31)$$

Ici Z_i est la fonction de partition de la molécule i , puisque le système contient N molécules identiques, d'où :

$$Z = \prod_{i=1}^N Z_i = (Z_i)^N \quad (2.32)$$

La valeur moyenne $\langle \sigma \rangle$ "l'aimantation" est donnée par :

$$\langle \sigma \rangle = \text{Tr}(\rho \sigma) = \text{Tr} \frac{\sigma e^{-\beta H}}{Z} = \frac{\sum_i \sigma e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (2.33)$$

d'où

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left[-g_{BS} e^{-\beta \left(\frac{\Delta}{2} - J \langle \sigma \rangle \right)} + g_{HS} e^{-\beta \left(\frac{\Delta}{2} + J \langle \sigma \rangle \right)} \right] (Z_i)^{N-1}}{(Z_i)^N} \quad (2.34)$$

Donc

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left[-1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-\beta(\Delta + 2J \langle \sigma \rangle)} \right]}{\left[1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-\beta(\Delta + 2J \langle \sigma \rangle)} \right]} \quad (2.35)$$

Où la matrice densité est donnée par:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (2.36)$$

La fraction des molécules en état HS, n_{HS} est par définition :

$$n_{HS} = \frac{1}{2}(1 + \langle \sigma \rangle) \quad (2.37)$$

La température d'équilibre $T_{1/2}$ est définie par :

$$\langle \sigma(T_{1/2}) \rangle = 0 \quad (2.38)$$

D'où on obtient :

$$\Delta = k_B T_{1/2} \log \left(\frac{g_{HS}}{g_{BS}} \right) \quad (2.39)$$

C'est la formule qui donne la différence en énergie entre l'état (BS) et (HS) en fonction de la température d'équilibre.

3- Approche percolative pour le modèle de type Ising ferromagnétique:

Nous allons étendre ici le formalisme des clusters de Coniglio-Klein (C-K) pour les systèmes d'Ising ferromagnétiques aux systèmes de transition de spin ferromagnétiques via la méthode de spin "fantôme". L'hamiltonien de type-Ising ferromagnétique considéré est:

$$H = \sum_i \frac{\Delta_i}{2} \sigma_i - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j = \frac{\Delta}{2} \sum_i \sigma_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.40)$$

Où $\Delta > 0$, $J > 0$, sont respectivement le champ de ligand et la constante d'interaction, $\sigma_i = \pm 1$ est la variable de spin fictif.

Il est bien connu que le modèle dégénéré de type-Ising est équivalent à celui d'Ising habituel avec le champ effectif $\Delta_{eff}(T)$: $\Delta_{eff}(T) = \Delta - k_B T \ln(g_{HS} / g_{LS})$, où les dégénérescences sont absorbées dans le champ effectif dépendant de la température, g_{LS} et g_{HS} sont des dégénérescences des états Bas Spin (BS) et Haut Spin (HS) respectivement, donc l'hamiltonien ferromagnétique de type Ising peut être réécrit en utilisant le champ effectif:

$$H = \frac{\Delta_{eff}(T)}{2} \sum_i \sigma_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.41)$$

La fonction de partition percolative du système est donnée par :

$$Z = e^{\beta N J} e^{\beta N_s \frac{\pm \Delta_{eff}(T)}{2}} \sum_{C_s} p^{|C_s|} (1-p)^{|A_s|} 2^{N(C_s)-1} = \frac{1}{2} e^{\beta N J} e^{\beta N_s \frac{\pm \Delta_{eff}(T)}{2}} \sum_{C_s} p^{|C_s|} (1-p)^{|A_s|} 2^{N(C_s)} \quad (2.42)$$

Avec:

$$p = \begin{cases} 1 - \exp(-2\beta J); \text{lien } \langle i, j \rangle \in C_s \text{ est réel (entre spins réels)} \\ 1 - \exp(-\beta \Delta_{eff}(T)); T \leq T_{eq}; \\ \quad \text{lien } \langle i, j \rangle \in C_s \text{ est fantôme (entre spins et site fantôme)} \\ 1 - \exp(+\beta \Delta_{eff}(T)); T \geq T_{eq}; \end{cases} \quad (2.43)$$

N_s et N sont respectivement le nombre de sites et de liens réels. $|C_s|$, $|A_s|$ et $N(C_s)$ sont respectivement le nombre de liaisons actives (réelles et fantômes), le nombre de liaisons inactives et

le nombre total de clusters dans la configuration des liaisons C_s (y compris le cluster fantôme et les spins individuels) respectivement.

Les spins dans le cluster fantôme unique sont (BS) pour $T \leq T_c$ (température critique) et (HS) pour $T \geq T_c$.

La fonction de partition thermique canonique peut être réécrite comme suit:

$$\tilde{Z} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left(-\beta \left(-\sum_i h_{igh} (\sigma_{gh} \sigma_i - 1) - J \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i \sigma_j - 1) \right) \right) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta \tilde{H}) \quad (2.44)$$

Où \tilde{H} et H diffère par une constante additive et:

$$h_{igh} = \begin{cases} \frac{\Delta_{eff}(T)}{2}; \sigma_{gh} = -1; \text{for } T \leq T_{eq} \\ -\frac{\Delta_{eff}(T)}{2}; \sigma_{gh} = +1; \text{for } T \geq T_{eq} \end{cases} \quad (2.45)$$

Sa correspondante percolative est:

$$\tilde{Z}(G) = \frac{1}{2} \sum_{C_s} p^{|C_s|} (1-p)^{|A_s|} 2^{N(C_s)} \quad (2.46)$$

De cette fonction de partition, nous obtenons :

$$\langle \sigma_i \rangle = \begin{cases} -\langle \gamma_{igh} \rangle; \sigma_{gh} = -1; \text{for } T \leq T_{eq} \\ \langle \gamma_{igh} \rangle; \sigma_{gh} = +1; \text{for } T \geq T_{eq} \end{cases} \quad (2.47)$$

C'est la relation qui donne la quantité thermique moyenne "aimantation locale" par l'indicateur $\gamma_{igh} = 1$, si le spin appartient au cluster fantôme (relié au spin fantôme directement ou indirectement) et autrement $\gamma_{igh} = 0$.

La "magnétisation globale" est donnée par:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \langle \sigma_i \rangle \quad (2.48)$$

La fraction de sites en état HS,, est donnée par:

$$n_{HS} = \frac{1}{2} (1 + \langle \sigma \rangle) \quad (2.49)$$

Elle varie avec la température dans la plage d'intervalle [0,1].

CHAPITRE 03

TECHNIQUES MC, DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DES CLUSTERS

TECHNIQUES MC, DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DES CLUSTERS

Les techniques de Monte Carlo (MC) sont un ensemble d'algorithmes de calcul qui impliquent de répéter une expérience avec des valeurs primitives aléatoires. Ces techniques sont couramment utilisées dans les systèmes de simulation mathématiques et techniques. Les techniques MC comprennent cinq étapes:

- Déterminez la plage possible de valeurs d'entrée.
- Générer des valeurs aléatoires pour les valeurs d'entrée dans les limites connues.
- Appliquer les opérations mathématiques requises à ces valeurs.
- Accumuler les résultats actuels avec les résultats passés.
- Répétez le processus un nombre de fois spécifié (la précision des résultats augmente avec l'augmentation du nombre d'itérations)

Pour résoudre des problèmes physiques, la méthode MC est un facteur important dans la simulation de systèmes avec de nombreux degrés de liberté couplés, tels que des liquides, des matériaux irréguliers et des solides.

1- Définition de la simulation :

Pour un non spécialiste, les simulations ont plus de crédibilité que les modèles analytiques car elles sont « plus proches » du système réel et nécessitent, en principe, moins de simplifications. Mais à la différence des techniques analytiques, les observations de la simulation sont toujours entourées d'incertitude. Cette incertitude provient du fait que les résultats de la simulation ne sont qu'un échantillon d'un nombre potentiellement infini d'observations.

Dans une simulation d'un système physique, prenons comme exemple un système d'Ising avec des interactions ferromagnétiques entre premiers voisins, on veut calculer les valeurs moyennes des grandeurs physiques, telles que l'énergie moyenne, la capacité calorifique, l'aimantation, la susceptibilité magnétique.

La valeur moyenne d'une grandeur A est défini par :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(T)} \sum_s A(s) e^{-\beta E(s)} \quad (3.1)$$

Où $Z(T)$ est la fonction de partition à la température T , $E(s)$ et $A(s)$ sont l'énergie du système et la valeur de A dans l'état microscopique s . On principe on doit sommer sur tous les configurations de spins, dans le cas des spins d'Ising le nombre des configurations de spin est 2^N où N est le nombre total de spins.

Comme une simple illustration des avantages de non-uniforme échantillonnage de MC, prenons une intégrante similaire à une valeur moyenne thermique en physique statistique :

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L P(x) A(x) dx \quad (3.2)$$

Avec

$$\int_{-L}^L P(x) dx = 1$$

Où $P(x)$ est une distribution de probabilité quelconque. Par échantillonnage aléatoire de M points X_1, \dots, X_M dans l'intervalle choisit, la valeur moyenne est estimée à :

$$\langle A \rangle \approx \frac{2L}{M} \sum_{i=1}^M P(x_i) A(x_i) \quad (3.3)$$

Si $P(x)$ est fortement culminé dans une petite région, les fluctuations statistiques de cette estimation seront grandes que seule une petite fraction des points générés tombera dans la région dominante. Si nous prélevons la place des points selon certaine distribution de probabilité $W(x)$, à savoir la probabilité de choisir un point dans un intervalle infiniment petit $[x, x + dx]$, l'estimation de la valeur moyenne est :

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{P(x_i)}{W(x_i)} A(x_i) \quad (3.4)$$

Les fluctuations statistiques ici sont moins que l'estimation de l'échantillonnage uniforme si $W(x)$ est culminé dans la même région que $P(x)$ et si la fonction $A(x)$ est régulière.

Il est impossible dans la pratique pour trouver $W(x)$ optimale qui minimise les fluctuations, une très bonne solution est d'utiliser $W(x) = P(x)$. La valeur moyenne est alors juste simple moyenne arithmétique de $A(x)$ par rapport à la configuration échantillonné :

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i) \quad (3.5)$$

En physique statistique, P est une fonction exponentielle fortement culminé $e^{-\frac{E}{K_B T}}$ de l'énergie avec A est typiquement une fonction polynomiale linéaire ou d'ordre inférieur des degrés de liberté du système. Les fluctuations de P sont donc très importante par rapport à ceux de A et dans l'échantillonnage en utilisant A comme la distribution de probabilité est alors proche de l'optimum. Ceci est ce que l'on entend généralement par l'échantillonnage de l'importance.

Un des utilitaires principaux de la simulation MC est dans les études des transitions de phase et les phénomènes critiques.

Nous examinons brièvement ici le formalisme mathématique utilisé pour évaluer les valeurs moyennes thermiques dans la physique classique à plusieurs corps.

2- Particules dans l'espace continu

Pour un système de N particules, avec des coordonnées de position x_i et p_i impulsions dans un espace à d -dimensions, la valeur moyenne A d'une grandeur thermique à la température T est donnée par

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d A(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) e^{H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/K_B T} \quad (3.6)$$

Où Z est la fonction de partition :

$$Z = \int \prod_{i=1}^n dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d e^{H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/K_B T} \quad (3.7)$$

K_B est la constante de Boltzmann, et H est l'Hamiltonien. Pour les particules identiques de masse m dans un potentiel $U(\vec{x}_i)$ et une autre à deux particules interaction $V(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ l'Hamiltonien est :

$$H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j} V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \quad (3.8)$$

Si l'observable A est indépendante de la vitesse (une fonction que des positions x_i), les intégrales de moment s'annulent en (3.6), conduisant à

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d A(\{\vec{x}_i\}) e^{-H(\{\vec{x}_i\})/K_B T} \quad (3.9)$$

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d e^{-H(\{\vec{x}_i\})/K_B T}$$

C'est-à-dire seulement l'énergie potentielle

$$E_p(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) = \sum_{i=1}^N U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j}^N V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \quad (3.10)$$

Est pertinent pour les propriétés statiques du système. Souvent, la seule quantité dépendant de la vitesse considéré en équilibre mécanique statistique est l'énergie cinétique, qui, pour une seule particule est donnée par

$$K_i = \left\langle \frac{P_i^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d \frac{P_i^2}{2m} e^{-P_i^2/2mK_B T} \quad (3.11)$$

$$Z_p = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d e^{-P_i^2/2mK_B T} \quad (3.12)$$

Etant donné que toutes les intégrales sauf ceux sur \vec{P}_i sont nulle. Cela donne le théorème d'équipartition :

$$K_i = \frac{d}{2} K_B T \quad (3.13)$$

En général, il est impossible de calculer analytiquement les valeurs moyennes d'une fonction de moments de particules ou de positions, sauf dans une seule dimension. Dans une simulation de Monte Carlo, ces valeurs moyennes sont évaluées par échantillonnage d'importance d'un nombre n_i de la configuration $\{\vec{x}_i\}$. Nous allons ici examiner le cas le plus simple des modèles sur réseaux.

3- Importance échantillonnage et bilan détaillé

Nous allons ici considérer un espace discret de configurations $\{C\} = C_1, C_2, \dots, C_N$ (où N peut être fini ou infini), mais la discussion peut être directement généralisée à un continuum de configuration. Pour un système à la température T , une valeur moyenne est donnée par :

$$\langle A \rangle = \sum_{\sigma} P(C_i) A(C_i), \quad P(C_i) = \frac{1}{Z} e^{-E(C_i)/T} \quad (3.14)$$

Où nous travaillons en unités telles que $K_B = 1$ (i.e., nous mesurons les énergies en degrés Kelvin). Dans une simulation, nous commençons avec une configuration arbitraire $C_{i(0)}$ et de lui sera générée une séquence stochastique $C_{i(1)}, C_{i(2)}, \dots, C_{i(M)}$, que nous utilisons pour approcher diverses valeurs moyennes d'intérêt. Notre objectif est que la configuration sera distribué selon P . Nous utilisons un processus stochastique dans lequel une configuration $C_i(k+1)$ est obtenue à partir de configurations $C_i(k)$ précédents en faisant une sorte de changement aléatoire dans ce dernier. Nous considérons une séquence de configurations constituant une chaîne de Markov, à savoir, la probabilité de faire une transition de $C_{i(k)}$ à $C_{i(k+1)}$ ne dépend pas de la façon dont nous sommes arrivés à $C_{i(k)}$ (son histoire). Nous allons discuter des conditions sur les probabilités de transition $P(C_i \rightarrow C_j)$ pour la distribution désirée $P(C)$ à atteindre. Il convient de noter que P peut être une

distribution de probabilités, pas nécessairement la probabilité de Boltzmann qui nous intéresse ici. Au lieu de considérer une seule séquence de configurations, il est utile d'abord d'imaginer un ensemble d'un grand nombre de configurations. Si cet ensemble est distribué selon P , alors le nombre $N_{0(C_i)}$ de configurations C_i dans l'ensemble est proportionnel à $P(C_i)$. A un moment donné (étape), nous appliquons un certain régime pour changer (mise à jour) les configurations, avec la probabilité de changer C_i à C_j noter $P(C_i \rightarrow C_j)$. Le nombre de configurations C_i après mise à jour des toutes les configurations est :

$$N_1(C_i) = N_0(C_i) + \sum_{j \neq i} [N_0(C_j)P(C_j \rightarrow C_i) - N_0(C_i)P(C_i \rightarrow C_j)] \quad (3.15)$$

Où les deux termes pour chaque j de la somme correspond au nombre de configurations qui ont été modifiées dans et hors de C , respectivement. Ceci est appelé l'équation de maîtresse. Si nous voulons que l'ensemble reste réparti selon P , nous devons clairement avoir pour tout $i = 1, \dots, N$:

$$\sum_{j \neq i} [N_0(C_j)P(C_j \rightarrow C_i) - N_0(C_i)P(C_i \rightarrow C_j)] = 0 \quad (3.16)$$

Et puisque $N_0(C_i) \propto P(C_i)$:

$$\sum_{j \neq i} [P(C_j)P(C_j \rightarrow C_i) - P(C_i)P(C_i \rightarrow C_j)] = 0 \quad (3.17)$$

Cette équation peut avoir de nombreuses solutions, et en général, il serait très difficile de trouver toutes les solutions. Cependant, nous pouvons obtenir une solution notamment en satisfaisant à la condition ci-dessus terme à terme;

$$P(C_j)P(C_j \rightarrow C_i) - P(C_i)P(C_i \rightarrow C_j) = 0 \quad (3.18)$$

Ce qui donne une condition, appelé de balance détaillée, sur le rapport des probabilités de transition;

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{P(C_j)}{P(C_i)} \quad (3.19)$$

Dans la mécanique statistique la probabilité des configurations $P(C_i)$ est donnée par :

$$P(C_i) = \frac{1}{Z} W(C_i) \quad (3.20)$$

$$W(C_i) = e^{-E(C_i)/T} \quad (3.21)$$

Où $W(C_i)$ est désigné comme étant le poids de la configuration, on peut aussi écrire :

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (3.22)$$

La probabilité de transition $P(C_i \rightarrow C_j)$ dans les exemples donnés ci-dessus peut être écrit comme un produit de deux probabilités; une pour tenter une certaine mise à jour et l'autre pour exercer effectivement le changement (accepter). Nous écrivons donc :

$$P(C_i \rightarrow C_j) = P^{attempt}(C_i \rightarrow C_j)P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) \quad (3.23)$$

Il est souvent le cas, car il se trouve dans les exemples mentionnés ci-dessus, que la probabilité d'une tentative de chacune des mises à jour possibles trivialement est uniforme, à savoir $P(C_i \rightarrow C_j) = const.$, indépendante de i, j . Cette partie de la probabilité de transition tombe alors sur la condition de bilan détaillé (3.28) et on se retrouve avec une condition bilan détaillé pour les probabilités d'acceptation :

$$\frac{P^{accept}(C_i \rightarrow C_j)}{P^{accept}(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (3.24)$$

Cette condition peut être remplie dans un certain nombre de façons, parmi lesquels le plus couramment utilisé est la probabilité d'acceptation de Metropolis :

$$P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) = \min\left[\frac{W(C_j)}{W(C_i)}, 1\right] \quad (3.25)$$

En d'autres termes, si la nouvelle configuration de poids est plus élevée (ce qui correspond à la réduction de l'énergie du système) on admet toujours la mise à jour, alors que si elle est inférieure on admet avec une probabilité égale au rapport des nouveaux et anciens poids. Il peut être vérifié que cette probabilité d'acceptation de Metropolis satisfait la condition de bilan détaillé (3.30). Pour déterminer si ou non la mise à jour sera acceptée lorsque $P(C) < 1$, la probabilité d'acceptation peut être comparé avec un pseudo-nombre (random number) $r \in [0, 1]$, si $r < P^{accept}(C_i \rightarrow C_j)$ la mise à jour est acceptée, et sinon elle est rejetée. Si une mise à jour est rejetée, l'ancienne C_i configuration devrait être considérée comme la configuration suivante dans la séquence. L'ensemble de la procédure de tenter des mises à jour et d'accepter ou de les rejeter en utilisant le schéma ci-dessus prend le nom de l'algorithme de Metropolis.

Une autre probabilité d'acceptation souvent utilisé avec l'algorithme de Metropolis est :

$$P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) = \frac{W(C_j)}{W(C_i) + W(C_j)} \quad (3.26)$$

Qui est un cas particulier d'une probabilité de bain de chaleur impliquant une sélection parmi un nombre m de choix :

$$P^{accept}(C_{j(k)}) = \frac{W(C_{j(k)})}{\sum_{i=1}^m W(C_{j(i)})} \quad (3.27)$$

La configuration actuelle est $C_i = C_j(l)$ pour certains $l \in \{1, \dots, m\}$ et il n'y a pas explicitement un rejet de mise à jour, à savoir, l'une des options $l \in 1, \dots, m$ est toujours choisi, selon les probabilités ci-dessus.

4- Algorithmes des clusters:

Parmi les inconvénients de la dynamique de Métropolis, le ralentissement lorsqu'on s'approche des points critiques, où le temps d'autocorrélation peut être long dans beaucoup de systèmes. Ces problèmes peuvent être significativement réduits, voire complètement éliminés, en utilisant les algorithmes des clusters, ou un grand nombre de spins peut être retourné simultanément pour obtenir une évolution plus rapide des configurations. Dans un algorithme de cluster, on construit des spins de telle sorte que tout le cluster peut être retourné avec une probabilité élevée ($1/2$ ou 1 selon la formulation). Dans nos simulations du modèle des clusters de type-Ising nous utilisons la dynamique des clusters de Swendse-wang (S-W) qui est la première dynamique des clusters développée.

CHAPITRE 04

RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

Les systèmes de type-Ising (standards) que nous avons simulés sont des réseaux carrés de taille $L \times L$ ($d = 2$), avec des interactions entre plus proche voisins (ppv) (nombre de ppv= $2d$) de type ferromagnétique et des conditions périodiques aux bords. La dynamique des clusters utilisée dans les simulations est celui dite de Swendsen-Wang (SW).

1-Propriétés percolatives du modèle

Nous avons fait les simulations en premier lieu sur des systèmes avec des interactions coopératives faibles (on peut les considérées aussi comme modérées, ceux d'une transition réversible Figure 01). Les résultats dans ce type de systèmes, montrent que plus on s'approche de la température d'équilibre T_{eq} ($\Delta_{eff}(T_{eq}) = \Delta - k_B T_{eq} \ln(g_{HS} / g_{LS}) = 0$) on a moins de liens entre les sites (spins réels) et le spin "fantôme", c'est-à-dire moins de spins qui appartiennent au cluster "fantôme", précisément pour les valeurs de la température très proches de T_{eq} , pratiquement, on a plus de liens entre les spins et le spin "fantôme", par d'autres mots, le cluster "fantôme" ne contient que le spin "fantôme", ce qui est en bon accord avec la relation $\langle \sigma_i \rangle = \langle \gamma_{igh} \rangle \approx 0$ at $T \cong T_{eq}$ (Figure 02).

Notons que nous avons fait des calculs sur des réseaux de taille $L = 1, 32, 4, 128$, les résultats montrent que plus le système est large plus l'accord avec la relation de l'aimantation précédente est satisfaisant.

Concernant le nombre de liens entre sites réels, le calcul montre qu'ils sont très denses à basse et haute température, c'est-à-dire lorsque le système se trouve totalement en phase "BS" où "HS", et plus la température augmente ou diminue plus les liens se raréfier, aux alentours de T_{eq} , le nombre de ces liens tend vers zéro. (Figure 02)

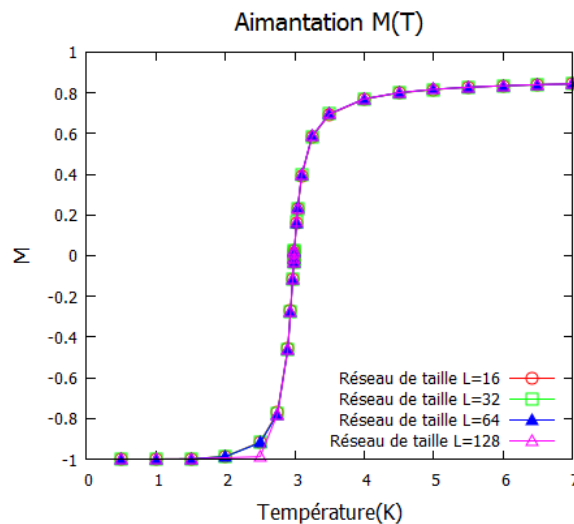


Figure 01 : -L'Aimantation en fonction de la température pour des réseaux carrés de tailles $L = 16, 32, 4, 128$ dans le cas d'un système faiblement coopératif : $\Delta = 8.1$, $g_{HS} = 15$, $g_{BS} = 1$. les résultats de mesure sont obtenus par la dynamique des clusters de Swendsen-Wang.

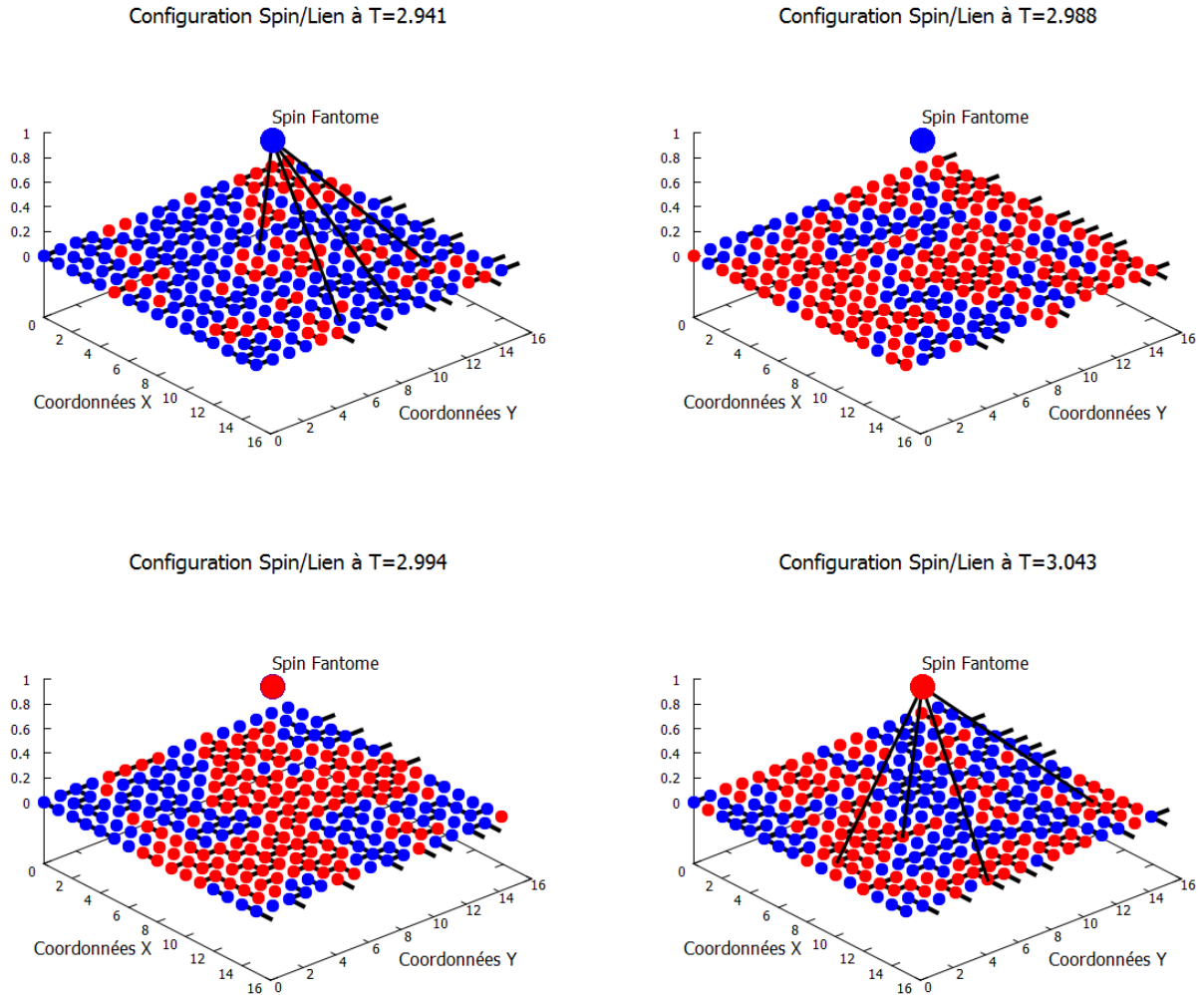


Figure 02 : -Configurations site/lien et spin "fantôme"/lien "fantôme" pour un réseau carré de taille 16×16 . Les spins en "BS" et en "HS" sont, respectivement en bleu et en rouge. Les valeurs des températures auxquelles se trouve le système, qui sont très proches de T_{eq} sont indiquées en haute de chaque figure de configuration (système faiblement coopératif : $\Delta = 8.1, g_{HS} = 15, g_{BS} = 1$).

Les simulations sur les systèmes de fortes interactions coopératives, où la transition est avec hystérésis, indiquent qu'il y a des particularités concernant le nombre de liens réels aux alentours de T_{eq} , les résultats montrent que ce type de systèmes passent de la phase "BS", avec un cluster qui contient la majorité des spins (spanning cluster) vers la phase "HS" avec aussi un cluster qui contient la majorité des spins qui sont en "HS" (Figure 03).

2- Comparaison entre systèmes fortement et faiblement coopératifs

On a constaté une différence importante entre systèmes faiblement et fortement coopératifs en ce qui concerne le nombre de liens réels, avant la température d'équilibre T_{eq} et après cette température, puisque pour les systèmes faiblement coopératifs le nombre de ce type de liens est négligeable aux alentours de cette température, en revanche dans les systèmes fortement coopératifs, le nombre de ces liens très importants avant la température d'équilibre et même juste après que le système passe ce seuil de température (Figures 02 et 03).

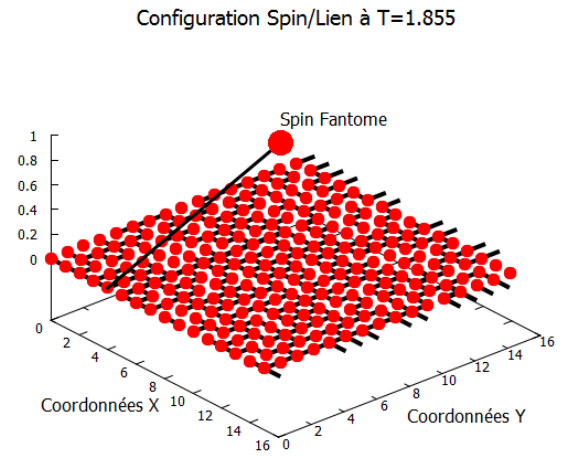
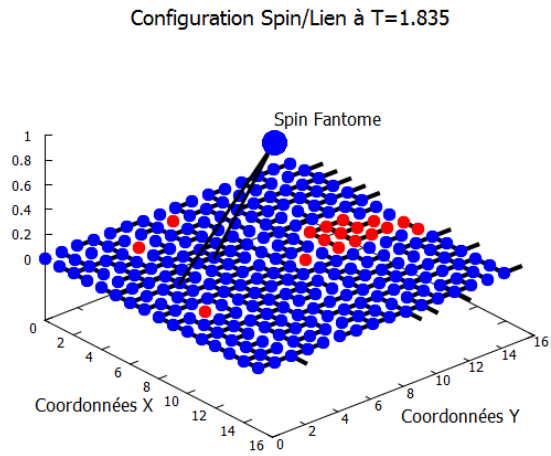


Figure 03 : -Configurations site/lien et spin "fantôme"/lien "fantôme" pour un réseau carré de taille 16×16 . Les spins en "BS" et en "HS" sont, respectivement en bleu et en rouge. Les valeurs des températures auxquelles se trouve le système, qui sont très proches de T_{eq} sont indiqués en haute de chaque figure de configuration (système fortement coopératif : $\Delta = 5.0$, $g_{HS} = 15$, $g_{BS} = 1$).

CONCLUSION

CONCLUSION

Dans ce mémoire, après un rappel sur le modèle d'Ising et de type-Ising pour les systèmes à conversion de spin, nous avons utilisés les techniques de simulations Monte Carlo via la dynamique des clusters de Swendsen-Wang pour obtenir quelques propriétés des systèmes à transition de spin à travers une approche des clusters de type-Ising ferromagnétique.

Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d = 2$) avec les conditions périodiques aux bords et pour trois phases initiales différentes: aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS), la phase initiale dans le processus de simulations n'a pas un effet remarquable sur les résultats de simulations.

Les résultats des simulations montrent une différence importante entre systèmes faiblement et fortement coopératifs en ce qui concerne le nombre de liens réels entre spins, notamment aux alentours de la température d'équilibre T_{eq} . Dans les systèmes faiblement coopératifs le nombre de ce type de liens est négligeable aux alentours de cette température, en revanche dans les systèmes fortement coopératifs, le nombre de ces liens est très importants avant la température d'équilibre et même juste après que le système passe ce seuil de température.

REFERENCES

- [1] *A. Metatla, Thèse de doctorat en sciences, Université de Batna (2013).*
- [2] *N. Vandewalle et S. Dorbolo , Introduction à la physique statistique (2006).*
- [3] *A. Metatla and H. Latelli, CNTEA1-2020, Université Med Boudiaf M'sila, 8-9 Mars 2020.*
- [4] *A. W. Sandvik, Monte Carlo simulations in classical statistical physics (2013).*
- [5] *I. Mechiki, Mémoire de Master (2018).*
- [6] *Ishita Agarwal: Numerical Analysis of 2-D Ising Model (2011).*

ملخص:

في هذه المذكرة قمنا بدراسة الجمل المتحولة السبين من خلال نموذج من نوع ايزينج في بعدين بواسطة محاكاة مونت كارلو باستعمال ديناميك الكلاستار لSwendsen-Wang ، قمنا بمقارنة نتائج القياس المتحصل عليها من أجل الجمل ذات التفاعلات الضعيفة و التفاعلات القوية.

Résume :

Dans ce mémoire, nous avons étudié les systèmes à transition de spin à travers une approche des clusters de type-Ising ferromagnétique en 2-D par la dynamique des clusters de Swendsen-Wang de Monte Carlo, et nous avons fait une comparaison entre les résultats des simulations sur les systèmes faiblement et fortement coopératifs.