

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE Sciences

DEPARTEMENT Physique

N° :



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : PHYSIQUE THEORIQUE

OPTION : PHYSIQUE DES
PARTICULES A HAUTE ENERGIES

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Benkihoul Soumia

Intitulé

**MODELE DE TYPE-ISING FERROMAGNETIQUE
EN 2D : ETUDE PAR SIMULATIONS MONTE
CARLO**

Soutenu le 01 / 06 /2017 devant le jury composé de:

H. Latelli	Université de M'sila.	Président
A. Metatla	Université de M'sila.	Rapporteur
S. Nehaoua	Université de M'sila.	Examineur

Année universitaire : 2016/2017

Dédicaces

*Je tiens à dédier ce modeste travail à
Mon chère père et Mon paradis mère
qu'ALLAH me les garde.*

Mes frères et sœurs Hicham, Walid, IKram , Hala, Islam

Mon mari

Ma grande famille

Mes enseignants du département de physique .

Mes amies

REMERCIEMENTS

Au nom d'Allah ,le Tout Miséricordieux, le Très Miséricordieux

Je remercie tout d'abord ALLAH tout puissant pour m'avoir donné la santé, la patience et le courage pour mener à terme ce mémoire.

J'adresse mes vifs remerciements à Mr **A.Metatla** pour l'effort considérable qu'il a déployé pour moi , ainsi que pour le soutien moral qu'il m'a offert lors de la réalisation de cet humble travail.

Je remercie aussi les membres de jury d'avoir accepté de juger ce modeste travail.

Je remercie aussi tous mes enseignants qui se sont consacrés à leurs taches avec dévouement et patience et ceci tout au long de notre parcours universitaire.

J'exprime mes plus vifs remerciements à mon frère Dr. **Hicham**, mon Mari **Sofiane** a continué à me soutenir dans l'accomplissement de ce travail modeste.

Enfin , mes remerciement s'adressent à tous ceux et celles qui ont contribué de loin ou de près à l'aboutissement de ce travail.

Table des matières

Introduction	5
Chapitre 01 : Modèle d'Ising à une et deux dimensions	6
1-Définition	7
2-Modèle d'Ising à une dimension, cas général ($h \neq 0$ et $j \neq 0$) et solution exacte	7
2-1- Fonction de partition exacte	8
2-2-Energie libre	10
2-3-Aimantation	11
3- Modèle d'Ising en deux dimensions	12
3-1-Fonction de partition exacte	12
3-2- Energie libre	13
3-3-Aimantation	13
4- Approximation du champ moyen et solutions en d-dimensions	13
A- Fonction de partition	
B- Energie libre	15
C- Aimantation	15
Chapitre 02 : Modèle de type-Ising	16
1-Définition du modèle de type Ising	17
2- Modèle de type Ising	17
2-1-Fonction de partition	18
2-2-Aimantation	18
2-3- Fraction HS	19
Chapitre 03: Simulations Monte Carlo et Algorithme de Metropolis	20
1-Définition	21
2-Principe	21
3-Calcul des valeurs moyennes	21
4-Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps	22
4-1-Particules dans l'espace continue	22
4-2-Modèles sur réseau	23
5-Importance échantillonnage et bilan détaillé	24
6-Algorithme de Metropolis pour le modèle d'Ising	27
7-Mesure des observables physiques	27
Chapitre 04: Simulations du modèle de type-Ising Ferromagnétique	28
1-Caractéristiques des systèmes simulés	29
2- Résultats et discussion	29
Conclusion	33

Introduction

Le modèle d'Ising parfois aussi appelé modèle de Lenz-Ising [1], dénommé d'après le physicien Ernst Ising, est un modèle de physique statistique. Il a été utilisé pour modéliser différents phénomènes dans lesquels des effets collectifs sont produits par des interactions locales entre particules à deux états. Si à une dimension il n'existe pas une transition de phase, en 1944 Lars Onsager confirme l'existence de transition de phase en 2 dimensions.

Dans les années 1970 Wajnflasz et Pick [2] 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 de 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.

Parmi les techniques des simulations, la méthode de Monte Carlo 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.

Ce mémoire est organisé selon le plan suivant, le premier chapitre est consacré à l'approche théorique du modèle d'Ising (1D et 2D) dans le cadre de l'ensemble canonique, au deuxième chapitre nous allons voir le modèle de type Ising, le troisième chapitre est un rappel sur les techniques des simulations par la méthode Monte Carlo selon l'algorithme de métropolis. Dans le dernier chapitre, nous examinons par les simulations MC le modèle de type Ising ferromagnétique en deux dimensions. Nous terminerons ce mémoire par une conclusion.

Chapitre 01

MODELE D'ISING A UNE ET DEUX DIMENSIONS

Chapitre01

MODELE D'ISING A UNE ET DEUX DIMENSION

1-Définition

Le modèle d'Ising fut introduit en 1925 par le physicien Ernest Ising. Il est parmi les modèles de la physique statistique exactement solubles à une dimension (calcul élémentaire) et à deux dimension (solution de Lars Onsager)[] . A trois dimensions il n'existe que des solutions approchées. Il s'agit d'un modèle de N spins classiques disposés sur un réseau régulier dont les sites de spin sont numérotés d'une certaine façon et chaque site de spin (i) on le définit par une variable de spin σ_i qui ne peut prendre que deux valeurs ± 1 ,ces variables sont couplées à un champ magnétique extérieur h_i et entre eux avec une interaction J.

2-Modèle d'Ising à une dimension, cas général ($h \neq 0$ et $j \neq 0$) et solution exacte

À une dimension, le modèle d'Ising est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert Cette solution montre que l'énergie libre est analytique pour toute température, ce qui signifie que ce modèle ne possède pas de transition de phase. permet de montrer que tout modèle unidimensionnel avec des interactions à courte portée ne peut pas posséder de transition de phase [3]

On considère un réseau régulier (une chaîne) dont chaque site (i) est défini par une variable scalaire de spin $\sigma_i = \pm 1$

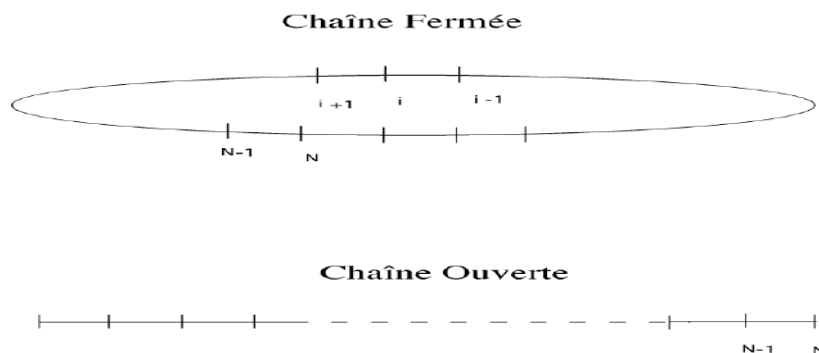


Figure 1-1: Chaîne Fermée et Chaîne Ouverte.

L'Hamiltonien d'une chaîne de N spins en présence d'un champ magnétique extérieur h s'écrit :

$$H(\{\sigma_i\}) = +J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

J : le couplage ferromagnétique entre spin sur les sites qui sont des plus proches voisins.

h : est le champ magnétique extérieur.

$\sum_i \sigma_i = M$: étant la magnétisation, c'est la somme sur tous les sites.

Pour le cas d'une chaîne fermée $\sigma_i = \sigma_{i+N}$, On observe que l'Hamiltonien du système va comporter deux termes:

Le premier terme qui représente l'interaction entre spins les plus proches voisins:

$$H_1 = J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (1.2)$$

Le deuxième terme :

$$H_2 = +h \sum_i \sigma_i \quad (1.3)$$

Représente l'interaction des spins avec le champ magnétique extérieur. On peut écrire ce dernier terme comme suit :

$$H_2 = +\frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.4)$$

Alors l'Hamiltonien devient :

$$H = +J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.5)$$

2-1-Fonction de partition exacte:

Calculons maintenant la fonction de partition pour un système linéaire d'Ising de N spin, N étant un très grand nombre, ceci afin de se placer dans la limite thermodynamique [3] avec les conditions périodiques de $\sigma_i = \sigma_{i+N} \quad \forall i$

Dans la fonction de partition pour N spin, chaque spin indicé ne peut par hypothèse prendre que deux valeurs, $+1$ et -1 . Le système comporte donc 2^N états différents.

Par définition, dans l'ensemble canonique, la fonction de partition est :

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{-\beta H} \quad (1.6)$$

tel que $\beta = 1/K_B T$, K_B est la constante de Boltzmann D'après l'expression de H donné par l'équation (1.5) la fonction de partition est:

$$Z = \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_N} e^{-\beta \left\{ j \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_i \sigma_i \right\}} \quad (1.7)$$

$$= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{-\beta \sum_i \left\{ j \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right\}} \quad (1.8)$$

$$= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \prod e^{-\beta \left\{ j \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right\}} \quad (1.9)$$

On a :

$$Z = \text{Tr}(T^N)$$

$$Z = \sum_{\sigma, \sigma', \dots, \sigma_N} T_{\sigma\sigma'} T_{\sigma'\sigma''} \dots T_{\sigma_N\sigma} = \text{Tr}(T^N) \quad (1.10)$$

La trace d'une matrice est invariante par changement de repère orthonormé . Donc on peut diagonaliser la matrice T (2×2)

$$T = \langle \sigma | T | \sigma' \rangle = e^{-\beta \left\{ j \sigma \sigma' + \frac{h}{2} (\sigma + \sigma') \right\}} \quad (1.11)$$

$$\begin{aligned} \langle 1 | T | 1 \rangle &= e^{-\beta(j+h)} \\ \langle -1 | T | -1 \rangle &= e^{\beta(h-j)} \\ \langle -1 | T | 1 \rangle &= \langle 1 | T | -1 \rangle = e^{\beta j} \end{aligned} \quad (1.12)$$

$$T = \begin{pmatrix} e^{-\beta(j+h)} & e^{\beta j} \\ e^{\beta j} & e^{\beta(h-j)} \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

La diagonalisation de T implique :

$$\det(T - \lambda I) = 0 \quad \text{et} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ou I est la matrice unité, on a :

$$T - \lambda I = \begin{pmatrix} e^{-\beta(j+h)} - \lambda & e^{\beta j} \\ e^{\beta j} & e^{\beta(h-j)} - \lambda \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

L'équation (1-14) aux valeurs propres est :

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta j} \cosh(\beta h) + 2\sinh(2\beta j) = 0 \quad (1.15)$$

Le discriminant réduit peut s'écrire

$$\Delta' = e^{-2\beta j} \sinh^2(\beta h) + e^{+2\beta j} \quad (1.16)$$

D'où

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= e^{-\beta j} \cosh(\beta h) + \sqrt{\Delta'} \\ \lambda_- &= e^{-\beta j} \cosh(\beta h) - \sqrt{\Delta'} \end{aligned} \quad (1.17)$$

On a alors

$$Z = \lambda_-^N + \lambda_+^N \quad (1.18)$$

Donc on obtient :

$$Z = e^{-N\beta j} \left\{ \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{+4\beta j}} \right]^N + \cosh(\beta h) - \sinh^2(\beta h) + e^{+4\beta jN} \right\} \quad (1.19)$$

2-2 –Energie libre :

L'énergie libre associée au modèle d'Ising appelée aussi potentiel thermodynamique dans l'ensemble canonique, est définie par :

$$F(T) = U - T(s) \quad (1.20)$$

Nous pouvons écrire:

$$F(T) = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (1.21)$$

Où

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(e^{-\beta H}) \\ Z &= \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left(1 + \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \end{aligned} \quad (1.22)$$

Mais dans la limite thermodynamique ($N \rightarrow +\infty$)

$$F = -K_B T \ln Z = -K_B T \ln e^{-N \beta j} \left\{ \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{4\beta j}} \right]^N \right\} \quad (1.23)$$

$$F = -N K_B T \left\{ -\beta j + \ln \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{4\beta j}} \right] \right\} \quad (1.24)$$

2-3 -L'aimantation:

A partir de l'énergie libre par site, on peut calculer l'aimantation moyenne par site:

$$m = \langle \sigma_i \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \quad (1.25)$$

$$m = k_B T \left[\frac{\beta \sinh(\beta h) + \frac{\beta \sinh(\beta h) \cosh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{4\beta j}}}}{\left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{4\beta j}} \right]} \right] \quad (1.26)$$

$$m = \frac{\sinh(\beta h) \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right]}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right]}$$

Donc

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{4\beta j}}} \quad (1.27)$$

Pour $\beta = 0$, il n'ya pas d'aimantation spontanée. Cela signifie qu'il n'ya pas de transition de phase à 1D.

3-Modèle d'Ising en deux dimensions:

La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel à été donné pour la première fois par le chimiste Américo-Norvégien Lars Onsager [4].

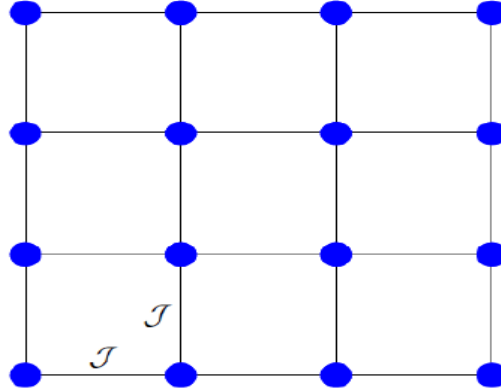


Figure 1.2 : Représentation du modèle d'Ising sur un réseau carré.

Considérons un réseau carré régulier (Figure 1.2), dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs $\sigma_i = \pm 1$, il est géré par l'Hamiltonien :

$$H\{\sigma_i\} = +J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (1.28)$$

Pour ce cas nous discutons la solution donnée par Onsager et l'approximation de champ moyen.

3-1-Fonction de partition exacte:

Onsager a démontré quand $h = 0$, que la fonction de partition d'Ising en deux dimensions est donnée par :

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{-\beta H} = \text{Tr}(\mathbf{T}^N) \quad (1.29)$$

Avec $\beta = \frac{1}{K_B T}$, et :

$$Z = [2 \cosh(2J\beta) e^I]^N \quad (1.30)$$

$$I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \ln \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + (1 - \chi^2 \sin^2 \varphi)^{\frac{1}{2}} \right] \right\} \quad (1.31)$$

Avec

$$\chi = \frac{2 \sinh\left(\frac{2J}{K_B T}\right)}{\cosh^2\left(\frac{2J}{K_B T}\right)}$$

χ est une fonction de T qui s'annule pour T=0 et T= ∞ . Pour J et T positives χ est aussi positive et continue, le paramètre χ présente un maximum à $T_c = T$ (il suffit de dériver χ en fonction de T pour observer $\text{sh}(T_c = 1)$ et donc $\chi(T_c = 1)$)

3-2 –Energie libre:

L'énergie libre exacte d'Onsager est donnée par :

$$F(T) = -N K_B T \ln[2 \cosh(2\beta j)] - \frac{N K_B T^\chi}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \chi^2 \sin^2 \varphi} \right) \right] \quad (1.32)$$

3-3 –Aimantation:

La magnétisation exacte du modèle d'Ising bidimensionnels est un paramètre d'ordre de la transition de phase, elle est donnée par :

$$m = \left[1 - (\sinh(2\beta j))^{-4} \right]^{\frac{1}{8}} \quad (1.33)$$

4-Approximation du champ moyen et solutions en d-dimensions

L'approximation du champ moyen permet de résoudre le modèle analytiquement, celle-ci consiste à remplacer chacun des voisins σ_j de spin σ_i par sa valeur moyenne $\langle \sigma \rangle$ qui est supposée la même pour tous premières voisins [5].

Pour que cette démarche soit valable, il est nécessaire que les fluctuations par rapport à la valeur moyenne $(\Delta\sigma_i, \Delta\sigma_j)$ soient petites.

$$\sigma_i \sigma_j = (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) + \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \sigma_j \langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (1.34)$$

$$\sigma_i \sigma_j = -m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j) + \underbrace{\Delta\sigma_i \Delta\sigma_j}_{\text{Négligé}} \quad (1.35)$$

Avec $\langle \sigma \rangle$ « l'aimantation » moyenne (également notée m) par site

$$m = \langle \sigma_{ii} \rangle$$

$$\Delta \sigma_{ii} = \sigma_{ii} - \langle \sigma_{ii} \rangle$$

Avec cette simplification , on peu et calculer l'énergie:

$$E_{CM} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j) \right] - h \sum_i \sigma_i \quad (1.36)$$

$$= Jm^2 \sum_{\langle i,j \rangle} 1 - mJ \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i + \sigma_j) - h \sum_i \sigma_i \quad (1.37)$$

$$E_{CM} = \frac{JqN}{2} m^2 - (mqJ + h) \sum_i \sigma_i \quad (1.38)$$

q est nombre de proche voisin d'un site ,c'est-à-dire le nombre de coordination du réseau .

a-Fonction de partition :

Dans le cadre de la statistique de l'ensemble Alors, la Fonction de partition vaut :

$$Z_{CM} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \left[\frac{jqN}{2} m^2 - (mqj+h) \sum_i \sigma_i \right]} \quad (1.39)$$

$$= e^{-\frac{\beta jqN}{2} m^2} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta(mqj+h) \sum_i \sigma_i} \quad (1.40)$$

$$= e^{-\frac{\beta jqN}{2} m^2} \underbrace{\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta(mqj+h)\sigma_i}}_{N \text{ blocs indépendents et similaires}} \quad (1.41)$$

$$= e^{-\frac{\beta jqN}{2} m^2} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta(mqj+h)\sigma_i} \quad (1.42)$$

$$Z_{CM} = e^{-\frac{\beta jqN}{2} m^2} \left[\sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta(mqj+h)\sigma_i} \right]^N \quad (1.43)$$

Enfin , on a :

$$Z_{CM} = e^{-\frac{\beta jqN}{2} m^2} \left[2 \cosh(\beta(mqj+h)) \right]^N \quad (1.44)$$

B-L'énergie libre:

L'énergie libre est donnée par:

$$F(T) = -K_B T \ln \left(e^{-\frac{\beta q j}{2} m^2} \left[2 \cosh(\beta(mqj + h)) \right]^N \right) \quad (1.45)$$

Par un calcul simple, on obtient:

$$F(T) = \frac{jqN}{2} m^2 - N K_B T \ln \left\{ 2 \cosh(\beta(mqj + h)) \right\} \quad (1.46)$$

C- Aimantation:

Maintenant, On cherche à une expression de m (l'aimantation moyenne), elle est obtenue avec le calcul de la moyenne thermique:

$$m = \langle \sigma_i \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \quad (1.47)$$

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} \left[\left\{ \frac{jqN}{2} m^2 \right\} - N K_B T \ln \left\{ 2 \cosh(\beta(mqj + h)) \right\} \right] \quad (1.48)$$

Chapitre 03

SIMULATIONS MONTE CARLO ET ALGORITHME DE METROPOLIS

Chapitre 03

SIMULATIONS MONTE CARLO ET ALGORITHM DE METROPOLIS

1-Définition :

La méthode de Monte Carlo (MC) inventé par Metropolis désigne une famille de méthodes algorithmique visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoire c'est-à-dire des techniques probabilistes. Les simulations de Monte Carlo sont une classe très importante de méthodes stochastiques pour calculer les propriétés thermiques, on s'intéresse ici à des simulations classiques (puisque il ya également des simulations MC quantiques). Les simulations MC sans doute ce sont les techniques numériques les plus importantes dans la physique statistique. Les méthodes de simulations de MC sont liées aux méthodes d'intégration élémentaires, mais, ils sont basés sur des plans d'échantillonnage non uniformes plus efficaces. En utilisant importance échantillonnage, la configuration (positions de particules, les directions de spin, etc.) d'un système à plusieurs corps et qui est fini, peut être généré selon la distribution de Boltzmann, de sorte que les valeurs moyennes thermiques sont obtenus entant que moyennes arithmétiques simples des fonctions "mesure" de la configuration. On présente ici cette méthode de simulation dans le cadre de la description canonique pour simplifier son illustration [7].

2-Principe:

Dans une simulation on veut calculer les valeurs moyennes des grandeurs physiques telles que l'énergie moyenne, l'aimantation. Si on considère ici l'exemple du modèle de spin d'Ising avec des interactions ferromagnétiques J entre premiers voisins, cette hypothèse ne fait pas perdre le caractère général de la méthode. 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 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 toutes 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.

3-Calcul des valeurs moyennes:

Comme une simple illustration des avantages de non-uniforme échantillonnage de Monte Carlo, prenons une intégrante similaire à une valeur moyenne thermique en physique statistique (la discussion ici peut être directement généralisée à des intégrales multidimensionnelles) :

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L P(x) A(x) dx \quad , \quad \int_{-L}^L P(x) dx = 1 \quad (3.2)$$

Où $P(x)$ est une distribution de probabilité quelconque. Par échantillonnage aléatoire de M points x_1, \dots, x_M dans l'intervalle, 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 certains $W(x)$ de distribution de probabilité, 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 (3.4) 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 le $W(x)$ optimale qui minimise les fluctuations, mais si $P(x)$ a beaucoup plus de variations que $A(x)$ 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 $e^{-E/K_B T}$ de l'énergie et A est typiquement une fonction polynomiale linéaire ou d'ordre inférieur des degrés de liberté du système. Les fluctuations se sont donc très importantes par rapport à ceux de A et dans l'échantillonnage en utilisant P 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 à long terme.

Dans notre travail, on s'intéresse à des simulations de Monte Carlo des modèles à plusieurs corps classiques, où les modèles avec des degrés de liberté discrets sur un réseau, et en particulier les modèles de spin (surtout le modèle d'Ising) sont des bons exemples à simuler.

4 - Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps

Nous examinons brièvement ici le formalisme mathématique utilisé pour évaluer les valeurs moyennes thermiques dans la physique classique à plusieurs corps dans le cas d'un système à plusieurs particules dans l'espace continu puis nous passons aux modèles de spin sur réseau aux quelles appartient les modèles d'Ising et de type Ising [8].

4-1-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

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

Où Z est la fonction de partition

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

H est l'Hamiltonien du système.

Si l'observable A est indépendante de la vitesse (i.e. une fonction que des positions x), les intégrales de moment annulent en (3.7), conduisant à

$$\langle A \rangle = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d A(\{\vec{x}_i\}) e^{H(\{\vec{x}_i\})/k_B T} \quad (3.8)$$

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

Souvent, la seule quantité dépendant de la vitesse considéré en équilibre mécanique statistique est l'énergie cinétique.

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 de la configuration $\{\vec{x}_i\}$.

4-2-Modèles sur réseaux

Dans un modèle sur réseau les degrés de liberté du système peuvent être continus ou discrets. Les modèles de spin ont des réalisations directes dans des cristaux d'atomes. Un des modèles les plus simple de ce genre est le modèle Ising (Figure 3.1), son Hamiltonien est :

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (3.9)$$

Où nous avons également inclus un champ magnétique externe.

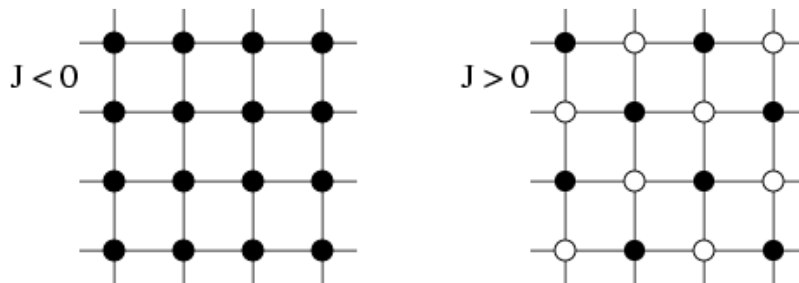


Figure 3.1: États-basse énergie du modèle d'Ising bidimensionnel ferromagnétique (à gauche) et antiferromagnétiques (à droite).

Considérant seulement les interactions entre plus proche voisin, en absence du champ, l'énergie est

$$E = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (3.10)$$

Où $\langle i, j \rangle$ désigne une paire de sites proches voisins i, j . En notant σ l'ensemble des configurations de spin $\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$, où N est le nombre total de rotations dans le système, la valeur moyenne thermique d'une fonction $A(\sigma)$ est

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} A(\sigma) e^{-E(\sigma)/T} \quad (3.11)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} \quad (3.12)$$

Pour les interactions ferromagnétiques ($J > 0$) lorsque $T \rightarrow 0$, il y a seulement deux configurations de spin qui contribuent; ceux avec tous les spins pointant vers le haut ou vers le bas.

Pour les interactions antiferromagnétiques ($J < 0$), et par exemple, sur un réseau carré bidimensionnel les configurations les plus bas de l'énergie sont en alternance de haut spin en bas spin dans un motif en damier.

En dimension $d > 1$, le modèle d'Ising présente une transition de phase entre un (paramagnétique) état désordonné à des températures élevées et une (ferromagnétique) état ordonné à basse température. Le paramètre d'ordre de cette transition de phase est l'aimantation.

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.13)$$

5- 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). Pour un système à la température T , une valeur moyenne est donnée par

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

Où nous travaillons en unités telles que $K_{\beta} = 1$, (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 distribuée selon P .

Nous utilisons un processus stochastique dans lequel une configuration $C_{i(k+1)}$ est obtenue à partir de configurations $C_{i(k)}$ précédentes 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).

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 noté $P(C_i \rightarrow C_j)$.

Le nombre de configurations C_i après la mise à jour des toutes les configurations est

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

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

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

Où, depuis $N_0(C_i) \propto P(C_i)$

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

Cette équation peut avoir de nombreuses solutions, et en général, il serait très difficile de trouver toutes les solutions. Ce pendant, 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 un état, appelé équilibre 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 est donnée par

$$P(C_i) = \frac{1}{Z} W(C_i) \quad , \quad W(C_i) = e^{-E(C_i)/T} \quad (3.20)$$

Où $W(C_i)$ est désigné comme étant le poids de la configuration, la fonction de partition disparaître dans le rapport sur le côté droit de ces équations. On peut aussi écrire

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (3.21)$$

C' est la condition de bilan détaillé.

La plupart des systèmes des simulations de Monte Carlo sont basés sur les principes de l'équilibre détaillée et l'ergodicité. Dans la pratique, on commence par une chaîne de Markov de quelque état arbitraire, qui peut être un état improbable de la distribution cible. Il sera ensuite prendre un certain temps avant que les configurations générées sont correctement distribués, mais avec bilan détaillé et ergodicité nous sommes assurés d'atteindre la distribution correcte après un certain temps.

Le temps nécessaire pour atteindre l'équilibre dépend du système à l'étude et devrait veiller à ce qu'un nombre suffisant de mises à jour sont effectuées avant que les configurations sont utilisées pour mesurer les observables.

En pratique, et pour un système d'Ising par exemple, à partir d'une configuration Ising avec N spins on peut considérer un spin choisi au hasard, dans auquel cas N nouvelles configurations peut être atteints. Pour un système de particules dans l'espace continu, on peut envisager de déplacer une particule choisie au hasard par un vecteur de déplacement $\vec{\delta}$, avec $\vec{\delta}$ choisi au hasard dans une sphère de rayon Δ

La probabilité de transition $P(C_i \rightarrow C_j)$ dans les exemples donnés ci-dessus peut être écrite comme un produit de deux probabilités; une pour tenter une certaine mise à jour (sélection du spin à être retourné, ou la particule d'être déplacé et le vecteur de déplacement $\vec{\delta}$) et l'autre pour exercer effectivement le changement (accepter). Nous écrivons donc

$$P(C_i \rightarrow C_j) = P^{attempt}(C_i \rightarrow C_j) P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) \quad (3.22)$$

Il est souvent que, $P^{attempt}(C_i \rightarrow C_j) = \text{constant}$, indépendante de i, j . Donc on se retrouve avec une condition bilan détaillé pour les probabilités d'acceptation

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

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

$$P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) = \min \left[\frac{W(C_j)}{W(C_i)}, 1 \right] \quad (3.24)$$

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 (3.23). Pour déterminer si ou non la mise à jour sera accepter lorsque $P^{accept}(C_j) < 1$, la probabilité d'acceptation peut être comparé avec un numéro (renom number) $r \in [0,1]$, si $r < P^{accept}(C_i \rightarrow C_j)$ la mise à jour est accepté, et sinon elle est rejetée. Si une mise à jour est rejetée, l'ancienne configuration C_i 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.

6- Algorithme de Métropolis pour le modèle d'ising

Dans le cas du modèle d'Ising, une mise à jour de configuration revient à sélectionner un spin au hasard et retournant avec une probabilité (3.24). Lors la mise à jour d'une configuration Ising $C \rightarrow C'$ en retournant un nombre de tours, le rapport de poids $W(C')/W(C)$ de la probabilité d'acceptation est donnée explicitement par :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[-\frac{J}{T} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma'_i \sigma'_j - \sigma_i \sigma_j) + \frac{h}{T} \sum_i (\sigma'_i - \sigma_i) \right] \quad (3.25)$$

Si on bascule un seul spin j , ce rapport devient :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[\frac{2J}{T} \sigma_j \left(\sum_{\delta[j]} \sigma_{\delta[j]} + \frac{h}{J} \right) \right] \quad (3.26)$$

Où $\delta[j]$ représente un voisin le plus proche de l'emplacement j (qui sont $2d$ sur un réseau cubique de dimension d). Depuis le critère acceptation / rejet on fait comparer le rapport ci-dessus avec un nombre aléatoire $0 \leq r < 1$, ces rapports peuvent être utilisés directement sans prendre le minimum de la probabilité effective (3.24). Afin d'éviter les évaluations fastidieuses répétées de fonctions exponentielles, les ratios de poids doivent être pré calculées et stockées dans une table.

Il convient de souligner qu'il n'est en fait pas nécessaire de sélectionner le spin d'être retournée au hasard; on peut aussi passer par tous les spins un par un. Dans ce cas, le bilan détaillé n'est pas remplie pour chaque étape, mais la distribution correcte est néanmoins obtenue. Il est probable, cependant, que la sélection de spin aléatoire rend la simulation moins sensible aux défauts dans le générateur de nombres aléatoires.

7- Mesure des observables physiques

Une quantité d'intérêt dans le cadre naturel du modèle Ising ferromagnétique est l'aimantation, qui est le paramètre d'ordre de la transition de phase se produisant à une température $T_C > 0$. On note M la magnétisation complète et par m la quantité normalisée :

$$M = \sum_i \sigma_i N_i, \quad m = M/N \quad (3.27)$$

Sur un réseau fini la symétrie spin-inversion ne se décompose pas dans une simulation en cours depuis longtemps et donc $\langle m \rangle = 0$. Lorsque $T < T_C$; dans la pratique il sera alors mesurer $\langle m \rangle \neq 0$. Il est mieux de mesurer $\langle |m| \rangle$ ou $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$, puisque, dans la limite thermodynamique elle égale $\langle m \rangle$ de symétrie brisée

Chapitre 02
MODELE DE TYPE ISING

Chapitre 02

MODELE DE TYPE ISING

1-Définition du modèle de type Ising:

Le modèle de type Ising est introduit pour l'étude des complexes à transition de spin, il se base donc sur l'effet que ces complexes présentent deux états différents Bas Spin (BS) et Haut Spin (HS) avec des énergies différentes. Le passage d'un état de spin vers l'autre état est possible par plusieurs excitateurs extérieurs : la température, le champ magnétique et électrique, la pression, la lumière, Historiquement le premier modèle de type Ising est développé Wajnflasz et Pick [6]

2-Modèle de type Ising :

L'Hamiltonien de type Ising standard est donné par :

$$H_{\text{type-Ising}} = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_i + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \quad (2.1)$$

Ici Δ est la différence en énergie entre les énergies minimales des deux configurations (HS) et (BS).

$\hat{\sigma}$ est 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 σ il existe $(2\sigma + 1)$ états, donc nous appelons g_{HS} et g_{BS} les dégénérescences des valeurs propres (-1) et $(+1)$ respectivement ($g_{BS} \prec g_{HS}$)

Il a été montré que ce modèle a deux niveaux dégénérés est exactement équivalent à un modèle d'Ising non dégénéré avec un champ dépendant de la température.

$\sum_i \rightarrow$ la somme sur les molécules du système, $\sum_{\langle i,j \rangle} \rightarrow$ la somme sur les paires de molécules.

J_{ij} est un paramètre d'interaction entre les molécules i et j .

Lorsque J est négatif, les interactions favorisent les paires HS-HS et BS-BS (analogue aux interaction ferromagnétique) et lorsque J est positif, les interactions favorisent les paires HS-BS (analogue aux interaction anti-ferromagnétique).

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

$$H_i = \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_i + J \hat{\sigma}_i \langle \hat{\sigma} \rangle \quad (2.2)$$

Et

$$H_{\text{type-Ising}} = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_i + \sum_i J \hat{\sigma}_i \langle \hat{\sigma} \rangle \quad (2.3)$$

Les énergies des états fondamentaux (BS) et (HS) sont :

$$\begin{cases} -\frac{\Delta}{2} - J \langle \hat{\sigma} \rangle \\ +\frac{\Delta}{2} + J \langle \hat{\sigma} \rangle \end{cases} \quad (2.4)$$

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

2-1-Fonction de partition :

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

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H_{\text{type-Ising}}} = \sum_l e^{-\beta E_l} = \prod_{i=1}^N Z_i \quad (2.5)$$

Où la somme est sur tous les états possibles du système.

$$Z_i = g_{BS} e^{-\beta \left(-\frac{\Delta}{2} - J \langle \hat{\sigma} \rangle \right)} + g_{HS} e^{-\beta \left(+\frac{\Delta}{2} + J \langle \hat{\sigma} \rangle \right)} \quad (2.6)$$

Avec Z_i la fonction de partition de la molécule i , ici ,on a considéré que le système contient N molécules identiques ,d'où :

$$Z = \prod_{i=1}^N Z_i = (Z_i)^N \quad (2.7)$$

2-2-L'aimantation :

La moyenne de spin fictifs $m = \langle \hat{\sigma} \rangle$ "l'aimantation" s'écrit:

$$m = \langle \hat{\sigma} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{\sigma}) = \text{Tr} \frac{\sum_l \sigma_l e^{-\beta E_l}}{Z} = \frac{\sum_l \sigma_l e^{-\beta E_l}}{Z} \quad (2.8)$$

Où $\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ est la matrice densité.

D'où

$$\langle \hat{\sigma} \rangle = \frac{\sum_l \sigma_l e^{-\beta E_l}}{Z} = \frac{\left[-g_{BS} e^{-\beta \left(-\frac{\Delta}{2} - J \langle \hat{\sigma} \rangle \right)} + g_{HS} e^{-\beta \left(+\frac{\Delta}{2} + J \langle \hat{\sigma} \rangle \right)} \right] (Z_i)^{N-1}}{(Z_i)^N} \quad (2.9)$$

$$= \frac{\left[-g_{BS} e^{-\beta \left(-\frac{\Delta}{2} - J \langle \hat{\sigma} \rangle \right)} + g_{HS} e^{-\beta \left(+\frac{\Delta}{2} + J \langle \hat{\sigma} \rangle \right)} \right] (Z_i)^{N-1}}{(Z_i)(Z_i)^{N-1}} \quad (2.10)$$

$$= \left[-1 + \frac{g_{HS} e^{-\beta\left(\frac{\Delta}{2} + J\langle\hat{\sigma}\rangle\right)}}{g_{BS} e^{-\beta\left(-\frac{\Delta}{2} - J\langle\hat{\sigma}\rangle\right)}} \right] / \left[1 + \frac{g_{HS} e^{-\beta\left(\frac{\Delta}{2} + J\langle\hat{\sigma}\rangle\right)}}{g_{BS} e^{-\beta\left(-\frac{\Delta}{2} - J\langle\hat{\sigma}\rangle\right)}} \right] \quad (2.11)$$

donc

$$\langle\hat{\sigma}\rangle = \frac{\left[-1 + \frac{g_{HS} e^{-\beta(\Delta + 2J\langle\hat{\sigma}\rangle)}}{g_{BS}} \right]}{\left[1 + \frac{g_{HS} e^{-\beta(\Delta + 2J\langle\hat{\sigma}\rangle)}}{g_{BS}} \right]} \quad (2.12)$$

2-3-Fraction Haut spin (HS) :

La fraction HS peut être déduit par la relation

$$n_{HS} = \frac{1+m}{2} = \frac{1+\langle\hat{\sigma}\rangle}{2} \quad (2.13)$$

Il est assez facile d'en déduire le température de transition, $\langle\hat{\sigma}(T_{\frac{1}{2}})\rangle = 0$, tel que :

$$T_{\frac{1}{2}} = \frac{\Delta}{k_B \ln\left(\frac{g_{HS}}{g_{BS}}\right)} \quad (2.14)$$

Chapitre 04

SIMULATIONS DU MODELE DE TYPE-ISING FERROMAGNETIQUE

Chapitre 04

SIMULATIONS DU MODELE DE TYPE-ISING FERROMAGNETIQUE

1- Caractéristiques des systèmes simulés

Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d=2$) de taille $L=16,32$ et 64 , avec des conditions périodiques aux bords, en trois phases initiales différentes : aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS), pour des valeurs de delta ' Δ ' suivantes : $\Delta=0$ "modèle d' Ising" et $\Delta = 8.1, 5$ " modèle de type Ising ferromagnétique", pour des valeurs de la température dans l'intervalle $[0.5,4]$ dans le cas du modèle d'Ising, et dans les intervalles $[0.5,7]$ et $[0.5,3]$ dans le cas du modèle de type Ising, la température est en unité de $[K_B/J]$.

2-Résultats et discussion

Aimantation du modèle d'Ising:

Dans le modèle d'Ising ferromagnétique on s'intéresse à la valeur absolue de l'aimantation $|m|$, nous remarquons qu'à basse température le système se trouve dans une phase ordonnée (BS ou HS) ; $|m|$ prend des valeurs proches de 1. A haute température le système passe de la phase ordonnée vers la phase paramagnétique ($|m| = 0$) (Figure 4-1).

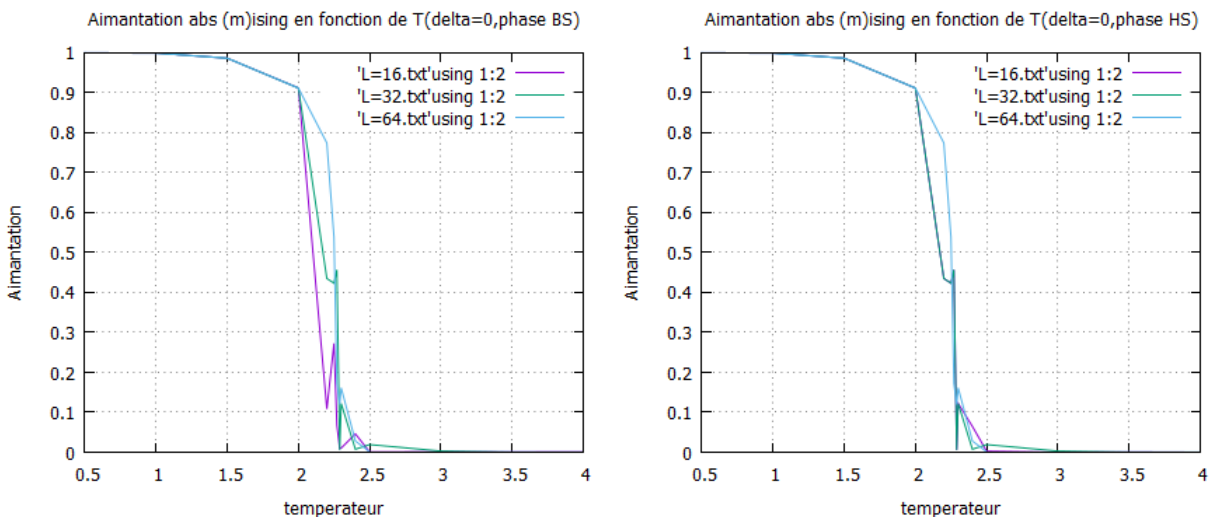


Figure 4-1 : L'aimantation en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16,32,64$ dans le modèle ,Ising ferromagnétique, ($\Delta=0$) la mesure est faite après 10^5 MCS.

Aimantation dans le modèle de type- Ising:

Le comportement de l'aimantation dans le modèle de type Ising dépend de l'intensité des interactions, c'est-à-dire de la constante J (dans les simulation nous mettons $J = 1$ et ne prendrons Δ en unité [Energie / J]. Nous remarquons que pour des interactions modérées ou faibles (pour des valeurs de Δ relativement grandes) l'aimantation indique que le système passe de la phase ordonnée BS à basse température vers l'autre phase ordonnée HS à haute température graduellement (ou abruptement avec réversibilité) (Figure 4-2 et 4-3).

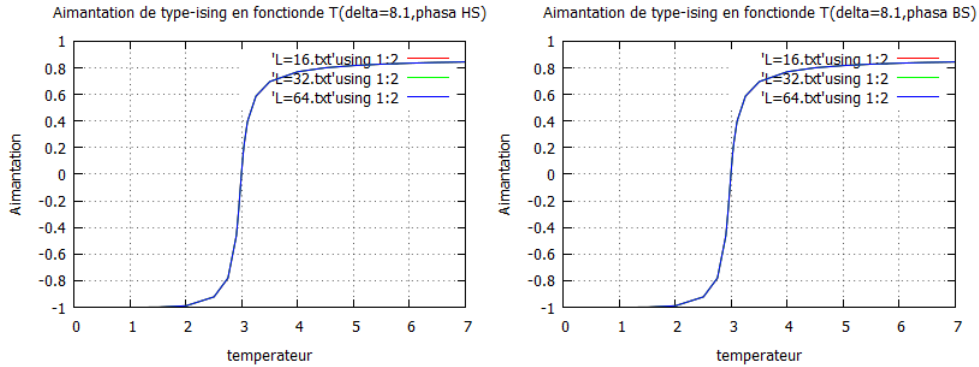


Figure 4-2 : L'aimantation en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16,32,64$ dans le modèle de type-Ising ferromagnétique, ($\Delta = 8.1$) la mesure est faite après 10^5 MCS.

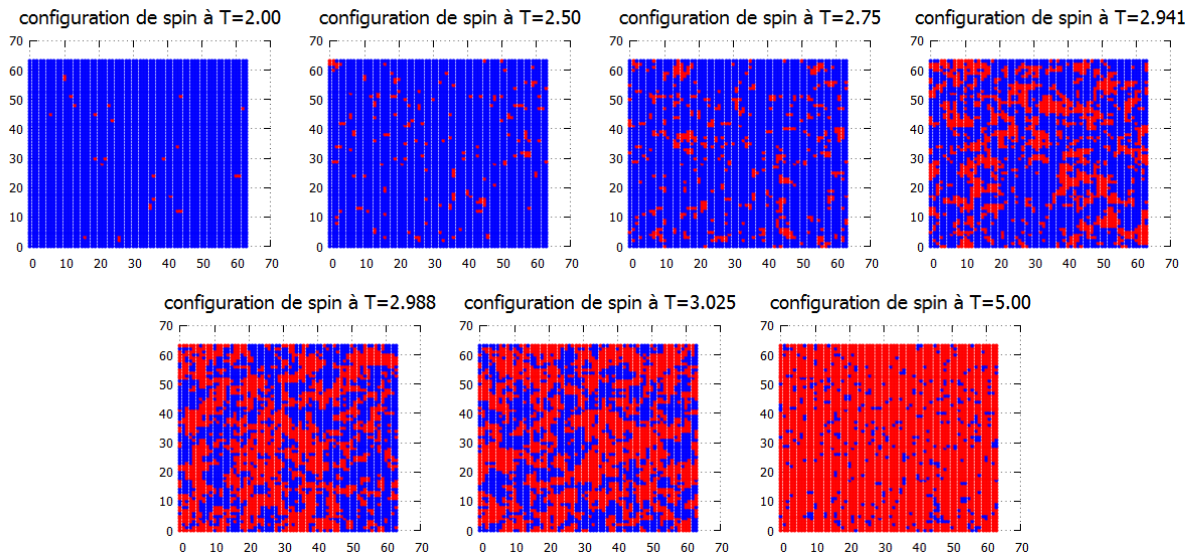


Figure 4-3: Configuration de spin pour un réseau carré de taille $L = 64$ initialement à la phase BS ($\Delta = 8.1$). La température est indiquée en haut de chaque figure. La configuration est obtenue après 10^5 MCS

Pour des interactions fortes (pour des valeurs de Δ relativement petites), l'aimantation indique que le passage du système de la phase ordonnée BS à basse température vers l'autre phase ordonnée HS à haute température est abrupte et non réversible (avec cycle d'hystérésis). (Figure 4-4, 4-5 et 4-6).

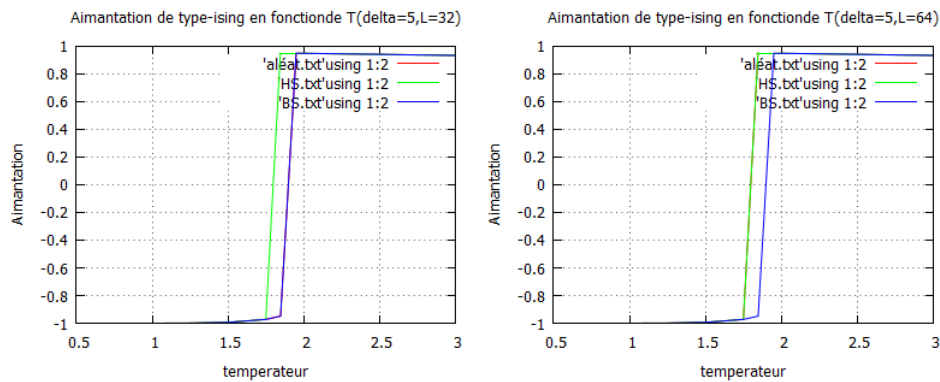


Figure 4-4 : Aimantation en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=32,64$ dans le modèle de type-Ising ferromagnétique, ($\Delta = 5$) la mesure est faite après 10^5 MCS.

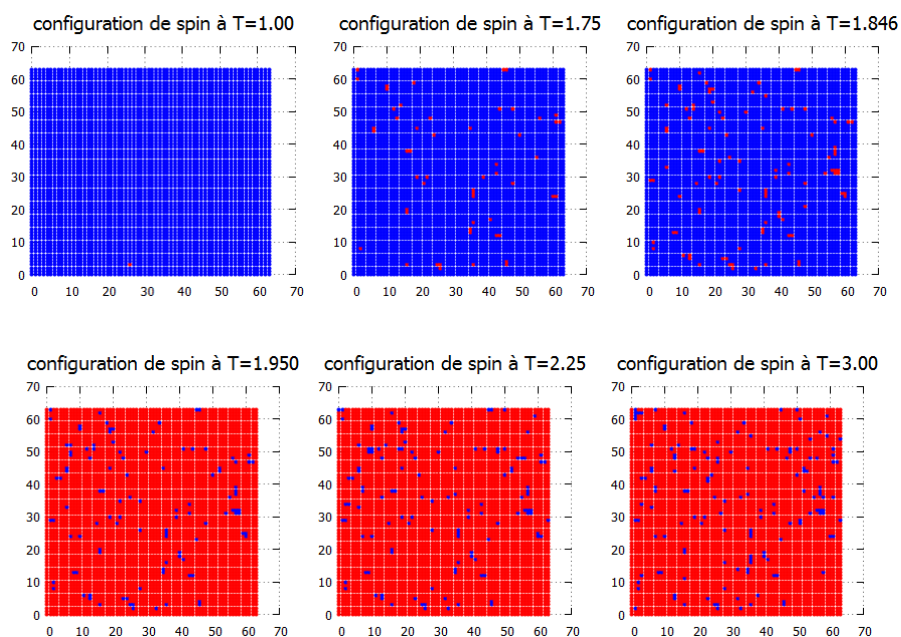


Figure 4-5 : Configuration de spin pour un réseau carré de taille $L = 64$ initialement à la phase BS ($\Delta = 5$). La température est indiquée en haut de chaque figure. La configuration est obtenue après 10^5 MCS

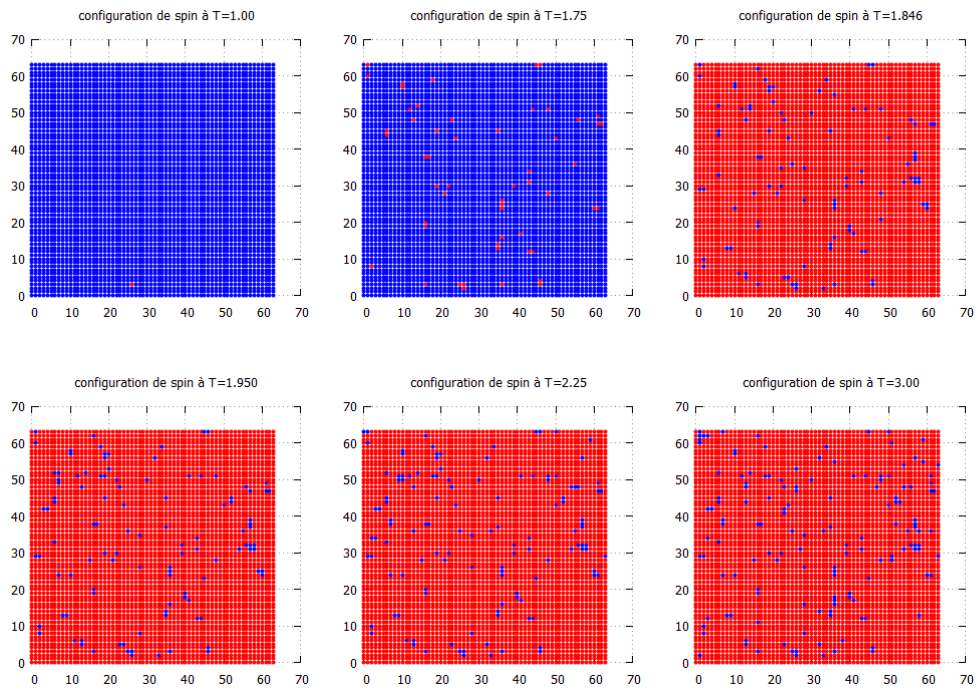


Figure 4-6 : Configuration de spin pour un réseau carré de taille $L=64$ initialement à la phase HS ($\delta=5$). La température est indiquée en haut de chaque figure. La configuration est obtenue après 10^5 MCS

CONCLUSION:

Nous avons étudié dans ce mémoire le modèle de type-Ising ferromagnétique par les simulations Monte Carlo.

Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d=2$) avec les conditions périodiques aux bords et pour trois phases initiales différentes pour les systèmes: (aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS)). L'algorithme utilisé dans les simulations MC est celui de Métropolis.

Nous avons mesuré l'aimantation du modèle et nous avons montré la configuration de spin du système pour des interactions modérées et pour celles fortes et ce en fonction de la température. Les courbes de l'aimantation et les configurations de spin montrent que le système passe de la phase ordonnée BS à basse température vers la phase ordonnée HS selon deux type de transition : transition réversible dans le cas des interactions faibles et avec hystérésis dans le cas de fortes interactions entre spins.

Référence:

- [1]-Y.velnik, le modèle d'ising .90 p.25 mai 2009.
- [2]-Nicolas.vadewalle et Stephan Dorbolo ,Introduction a la physique statistique (2006)
- [3]- Gabriel. Ch., Jérôme .P , Jean –Marcel. R .Fondements statistiques de la matière paris les presses de l'ensta, boulevard Victor .
- [4]-Ishita. ANumerical Analysis of 2-D Ising Model University of Bonn, Masters in Physics. , 17mars 2011.
- [5] -Ismail ZERGOUG, Modèle d'Ising dilué. Thèse pour l'obtention d'un Doctorat 3 cycle en Physique Option Physique Médicale, Oran, 129 p. 2005.
- [6]-A.METATLA. la conversion de spin dans les molécules bistables étude théorique Pour obtenir le diplôme de Doctorat en sciences en physique Option: Physique Théorique (2013).
- [7]-J.Wajnflasz. Phys. Stat. Sol 40, 537 (1970).
- [8] -Anders. W ;Sandvika, Computational Physics Monte Carlo simulation in classical statistical physics. Département of Physics, 2013. Boston University.

RESUME

Nous avons étudié le modèle de type Ising ferromagnétique que en deux dimensions par les simulations Monte Carlo, un système de type-Ising est un système de spins en interaction avec la présence d'un champ de ligand.

Mots Clé: simulation Monte Carlo, type –Ising , ferromagnétique

ملخص

لقد درسنا نموذج إيسينغ للفيرومغناطيسية ببعدين بواسطة محاكاة مونت كارلو ، نظام من نوع إيسينغ هو نظام لفائف مغزلية في تفاعل مع تواجد حقل ليجندري.

كلمات مفتاحيه : محاكاة مونت كارلو. نوع إيسينغ. فيرومغناطيسية