

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

FACULTE DES SCIENCE.
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE.
N° :



DOMAINE : SCIENCE DE LA MATIERE
FILIERE : PHYSIQUE .
OPTION : PHYSIQUE DES
PARTICULES A HAUTE ENERGIES

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Titi Mohamed Lamine

Intitulé

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

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

H. Latteli	Université de M'sila.	Président
A. Metatla	Université de M'sila.	Rapporteur
k.Bouferach	Université de M'sila.	Examineur

Année universitaire : 2016/2017

remerciements

Je remercie d'abord et avant tout, Dieu le tout puissant pour m'avoir donné toute cette force et ce courage pour faire aboutir ce travail et grand merci à ma mère et mon père ceux qui se tenait à côté de moi tout au long de mes études

Je remercie particulièrement mon encadreur

Mr: Aboud METATLA pour ses conseils et ses orientations, son encouragement qui m'ont aidé à réaliser ce travail et j'avais l'honneur de travailler sous son assistance et je lui suis également reconnaissant pour la confiance qu'il m'a accordée..

Mes remerciements vont aussi à tous les enseignant du département de physique de l'université de M'sila et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin, à notre formation scientifique ,et mes collègues de promotion Physique Master (2) de l'année 2016/2017.

En fin je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin au bon déroulement de ce travail.

Dédicaces

*Je tiens à dédier ce humble travail à ma famille
à l' incomparable ma mère, mon per et les garçons*

:Salah-Ahmed -Rida-Omar Ayoub .

Qu'Allah me les garde.

Mes frères, et sœur et ma famille

Mes enseignants du département de physique

Mes collègues.

Table des matières

Introduction	5
Chapitre 01 : Modèle d'Ising à une et deux dimensions	
1-Définition du modèle d'Ising	6
2-Modèle d'Ising à une dimension, cas général ($h \neq 0$ et $j \neq 0$) et solution exacte	6
2-1- Fonction de partition exacte	7
2-2-Energie libre	9
2-3- Aimantation	9
2-4-Energie moyenne	10
3- Modèle d'Ising en deux dimensions	10
3-1-Fonction de partition exacte	11
3-2-Energie libre	12
3-3-Aimantation	12
3-4-Energie moyenne	12
4- Approximation du champ moyen et solutions à d-dimensions	13
4-1-Fonction de partition	13
4-2-Energie libre	13
4-3-Aimantation	14
4-4-Solution graphique de l'équation auto cohérente	14
Chapitre 02 : Modèle de type Ising	
1-Définition de modèle de type Ising	16
2-Modèle de type Ising	16
2-1-fonction de partition	17
2-2-Aimantation	17
2-3- La fraction HS	18

Chapitre 03: Simulations Monte Carlo et algorithme de metropolis

1-Simulations	
1-1-Définition de la simulation	19
2- Simulations par Méthode de Monte Carlo	19
2-1-Définition	
2-2-Principes de la simulation Monte Carlo	19
a-L'échantillon important	19
3-Calcul des valeurs moyennes	20
4-Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps	21
4-1-Particules dans l'espace continue	21
4-2-Modèles sur réseau	21
5-Importance échantillonnage	21
b- Bilan détaillé	23
c-Taux d'acceptation	24
6-Algorithmme de Metropolis pour le modèle d'Ising	25
7- Mesure des observables physiques	26

Chapitre 04: Simulations du modele de type-Ising antiferromagnetique.

1-Caractéristiques des systèmes simulés	27
2-Résultats et discussion	27
2-1- Aimantation du modèle d' Ising	27
2-2- L'Aimantation du modèle de type - Ising	28
Conclusion	32
Références	33

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 le laboratoire de prédilection pour tester les nouvelles idées et méthodes en Physique Statistique. En outre, de par ses nombreuses interprétations, en Physique et dans beaucoup d'autres domaines, il est utilisé de décrire qualitativement, et parfois quantitativement, une grande variété de situations.[1]

Comme nous le verrons plus loin, le modèle d'Ising est également l'un des modèles les plus simples présentant une transition de phase. Durant les premières décennies du XX^{ème} siècle, il était loin d'être universellement admis que la Physique Statistique, une théorie encore jeune à l'époque, puisse expliquer les transitions de phase. Cette question fut réglée par Lars Onsager en 1944, grâce à son analyse détaillée du modèle d'Ising bidimensionnel prouvant l'existence d'une transition de phase dans la limite thermodynamique.[1]

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 est la plus utilisée, elle est conçu pour effectuer le calcul des grandeurs thermodynamiques des modèle 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 de Modèle de type Ising antiferromagnétique en deux dimensions. Nous terminerons ce mémoire par une conclusion.

chapitre 01

Modèle d'Ising à une et deux dimensions

1-1-Définition du model d'Ising

Le modèle d'Ising considère généralement un réseau carré sur lequel sont disposés N spins. Un spin σ_i représente l'état microscopique du site i du réseau.

Deux états sont possibles : $\sigma_i = \pm 1$. Ils correspondent par exemple à un moment magnétique qui pointe soit vers le nord soit vers le sud. Les spins sont soumis à un champ extérieur h . Ils auront tendance à s'orienter selon ce champ. De plus, les spins ne sont pas indépendants, chaque spin interagit uniquement avec ses plus proches voisins. Le Hamiltonien de système pour une distribution de spins $\{\sigma_i\}$ s'écrit

$$H(\{\sigma_i\}) = J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

Où l'énergie de couplage définie entre les paires de spins voisins $\langle i, j \rangle$ est J et le champ extérieur est h . Ce système de spins est mis en contact avec un thermostat à température T , Le nombre de spins étant conservé on travaillera dans l'ensemble canonique. Pour éviter des effets de bord le long des cotés du réseau carré, on considère des conditions périodiques. Le réseau est en quelque sorte replié sur lui-même pour former un tore. Ainsi, tous les spins ont bien 4 plus proches voisins. [2]

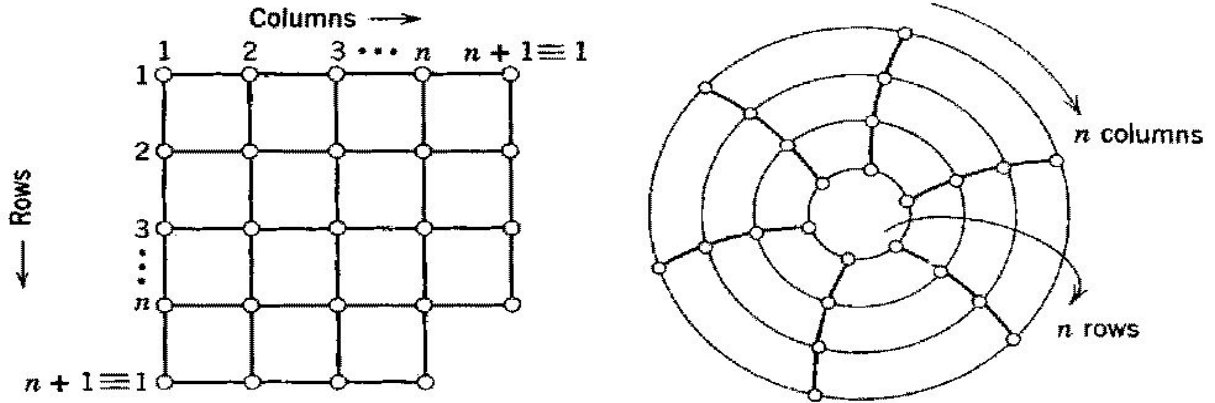


Figure 1.1: Le réseau carré est replié sur lui-même pour former un tore sur lequel chaque site a exactement 4 voisins.

1-2-Modèle d'Ising à une dimension, cas général ($h \neq 0$ et $j \neq 0$) et solution exacte

À une dimension, c'est le cas le plus simple du modèle, la résolution du système d'Ising, où la fonction de partition qui décrit les propriétés thermodynamiques de ce système, est calculée avec exactitude par la méthode de la matrice de transfert.[3]

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

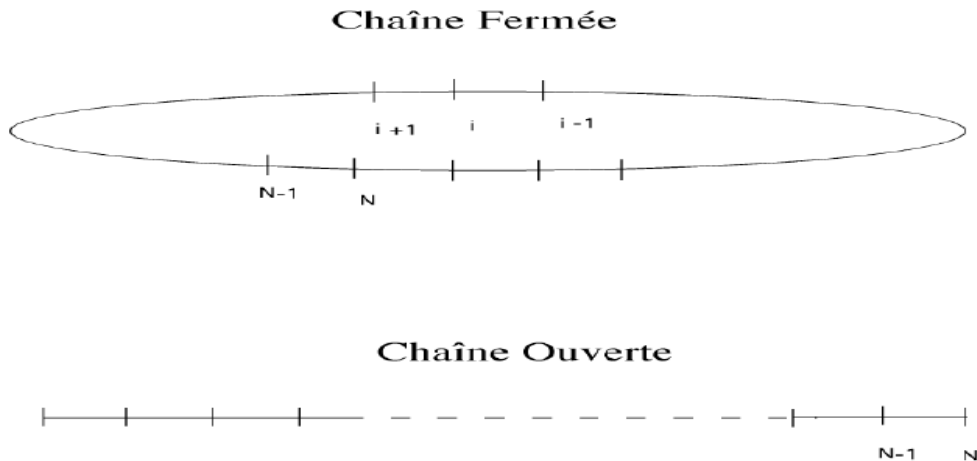


Figure 1.2: chaîne fermée et chaîne ouverte

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

$$H(\{\sigma_i\}) = J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

Où J est l'interaction entre les spins de sites plus proches voisins. Et 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 $\sigma_{N+i} = \sigma_i$ (conditions périodiques aux limites).

A une dimension, le modèle d'Ising est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert. Historiquement cette solution remonte à la thèse d'Ising(1925) sous la direction de Wilhelm Lenz. Cette solution montre que l'énergie libre est analytique pour toute température ce que signifie que ce modèle ne possède pas de transition de phase. Un argument physique très général, permet de montrer que tout modèle unidimensionnel avec des interactions à courte portée n'a pas de transition de phase.

2-1-Fonction de partition exact :

Calculons maintenant la fonction de partition pour un système linéaire d'Ising de N spins, N étant un très grand nombre, ceci afin de se placer dans la limite thermodynamique[4]

avec les conditions périodiques **Figure 1.2:** $\sigma_{N+i} = \sigma_i \forall i$

Dans la fonction de partition pour N spins, i ne peut, par hypothèse, prendre que deux valeurs, $+1$ et -1 . Le système comporte donc 2^N états différents. A une dimension, le calcul de la fonction de partition n'est pas beaucoup plus difficile dans le cas où le système est soumis à un champ magnétique extérieur. Nous allons calculer la fonction de partition dans ce cas. Comme précédemment, le Hamiltonien du système va comporter deux termes:

Le premier terme :

$$H_1 = h \sum_i \sigma_i \quad (1-2)$$

Qui représente l'interaction des spins avec le champ magnétique, le deuxième terme

$$H_2 = J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (1-3)$$

représente l'interaction entre spins les plus proches voisins.

Réécrivons le premier terme de façon équivalente :

$$H_1 = (h/2) \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1-4)$$

La division par 2 évite le double comptage dans cette somme. Le système comporte 2^N états différents.

Donc

$$H = j \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_{i+1} + (h/2) \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1-5)$$

On a : la fonction de partition devient

$$Z = \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} e^{-\beta H} \quad (1-6)$$

Tel que $\beta = 1/k_B T$ $k_B =$ est constante de Boltzmann

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left(-\beta \sum_{i=1}^N \{ j \sigma_i \sigma_{i+1} + h(\sigma_i + \sigma_{i+1}) / 2 \} \right)$$

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left(-\beta \{ j \sigma_i \sigma_{i+1} + h(\sigma_i + \sigma_{i+1}) / 2 \} \right)$$

On ecire Z en fonction de produit de matrice:

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (1-7)$$

La matrice T est donné par:

$$T(\sigma_1, \sigma_2) = \exp \left(-\beta [j \sigma_1 \sigma_2 + h(\sigma_1 + \sigma_2) / 2] \right) \quad (1-8)$$

on a :

$$\langle 1 | T | 1 \rangle = e^{-\beta(j+h)}$$

$$\langle -1 | T | -1 \rangle = e^{\beta(h-j)}$$

$$\langle -1 | T | 1 \rangle = \langle 1 | T | -1 \rangle = e^{\beta(j)}$$

T appelée la matrice de transfert de dimension 2×2 ,elle s écrit comme suit :

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

La matrice T est diagonalisable et les valeurs propres λ_+ et λ_- sont les racines du déterminant suivant :

$$\det(T - \lambda I) = 0 \quad (1.9)$$

où I est la matrice unité et

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

On compare l'équation (1.7) avec la définition de la trace suivante

$$tr(AB) = \sum_{i=1}^n (AB)_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_{ij} B_{ji} = \sum_{j=1}^m (BA)_{jj} = tr(BA) \quad (1-10)$$

et après la diagonalisation de T la fonction Z devient :

$$Z = Tr(\mathbf{T}^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.11)$$

La solution de l'équation de diagonalisation (1.9) donne :

$$\lambda_{\pm} = e^{-\beta j} \left[\cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{4\beta j}} \right] \quad (1.12)$$

On obtient:

$$Z = e^{-N\beta j} \left\{ \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{4\beta j}} \right]^N + \left[\cosh(\beta h) - \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{4\beta j}} \right]^N \right\} \quad (1.13)$$

2-2- Energie libre

L'énergie libre associée au modèle d'Ising appelée aussi potentiel thermodynamique dans l'ensemble canonique.[3]

L'énergie libre de Hamiltonien est définie par :

$$F(T) = -K_B T \ln z \quad (1.14)$$

Avec
$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right)$$

On note que , $\lambda_+^N > \lambda_-^N$ à la limite thermodynamique pour ($N \rightarrow \infty$) on a

$$Z \approx \lambda_+^N \quad (1.15)$$

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \rightarrow 0$$

$$F = -NK_B T \left\{ -\beta j + \ln \left[\cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{4\beta j}} \right] \right\} \quad (1.16)$$

2-3 -Aimantation

L'aimantation est donnée par :

$$m = \langle \sigma \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h}$$

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{(\sinh^2(\beta h) + e^{4\beta j})^{1/2}} \quad (1.17)$$

pour un $h=0$ il n'y a pas d'aimantation spontanée, cela signifie qu'il n'y a pas de transition de phase à 1D [3]

2-4 -Energie moyenne

L'énergie moyenne est définie de la façon suivante :

$$E = \sum_s E_s P_s = \sum \frac{E_s e^{-\beta E_s}}{Z} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.18)$$

Où P_s étant la probabilité canonique de l'état microscopique s .

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

3- Modèle d'Ising en deux dimensions

A la différence d'une chaîne linéaire de spin, le système d'Ising à deux dimensions (**figure 1-3**) présente bien une transition de phase. Le calcul exact de fonction de partition à deux dimensions représente un tour de force réalisé par Lars Onsager en 1944. Il n'existe pas aujourd'hui de démonstration simple du calcul d'Onsager de la fonction de partition [4]

Nous allons étudier le modèle d'Ising sur le réseau carré. Deux cas importants seront discutés :

- (i) solution exacte – a été donnée 1^{er} fois par Lars Onsager
- (ii) approximation de champ moyen

L'Hamiltonien est donné par [1]

$$H(\{\sigma_i\}) = J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

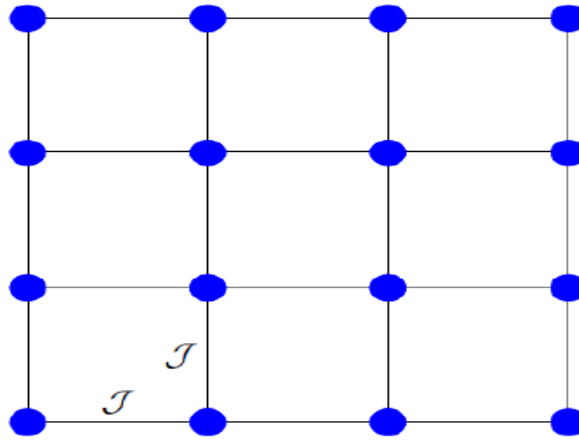


FIGURE 1.3 Représentation du modèle d'Ising sur un réseau carré, les spins (cercle bleu)

3-1- Fonction de partition

La fonction de partition présente une grand analogie avec la fonction de partition d'Ising à 1D. Ainsi, alors que la fonction de partition d'Ising 1D était donné par l'expression [4] .

$$Z = \left(2 \cosh \frac{J}{KT} \right)^N \quad (1.20)$$

Onsager a démontré que la fonction de partition dans le cas d'Ising 2D peut s'écrire sous la forme: [4]

$$Z = \left(2 \cosh \frac{2J}{KT} \exp(I) \right)^N \quad (1.21)$$

Où I est une intégrale elliptique qui a la forme:

$$I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \ln \ln \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + (1 - x^2 \sin^2 \varphi)^{1/2} \right] \right\} \quad (1.22)$$

Et

$$x = \frac{2 \sinh(2J / KT)}{\cosh^2(2J / KT)} \quad (1.23)$$

La fonction x, considérée comme une fonction de T, s'annule pour T = 0 et pour T = ∞. Pour J et T a valeurs strictement positives, la fonction x est elle aussi positive.

Comme elle est continue elle présente donc un maximum pour une valeur de température, noté Tc (dont vérifie simplement qu'elle vérifie la condition) .

, soit $KT_C = 2.669J$, et $x(T_C) = 1 \cdot \sinh\left(\frac{2J}{KT_C}\right) = 1$

3-2-L' énergie libre

L'énergie libre exact d'Onsager est donne par:

$$F(T) = -K_B T \ln z \quad (1.14)$$

$$F(T) = -NK_B T \ln \ln \left[2 \cosh(2\beta j) \right] - \frac{NK_B T}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + (1 - x^2 \sin^2 \varphi)^{1/2} \right] \right\} \quad (1.24)$$

3-3-Aimantation :

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

$$m = \left[1 - (\sinh(2\beta j))^{-4} \right]^{1/8} \quad (1.25)$$

En certain points ce paramètre devient zéro, ces points appelés points critiques ou température de Curie qui a la forme suivante :

$$\tanh \left[\frac{2j}{K_B T} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \frac{K_B T_C}{j} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.269185 \quad (1.26)$$

Cette équation est obtenue à partir des propriétés du réseau carré.

3-4 -Energie moyenne

L'énergie moyenne est donné par :

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.27)$$

$$E = -2Nj \tanh(2j\beta) - 2Nj \frac{(\sinh^2(2j\beta) - 1)}{\sinh(4j\beta)} \left[\frac{2}{\pi} g(x) - 1 \right] \quad (1.28)$$

Où $g(x)$ étant l'intégrale elliptique :

$$g(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 + (1 - x^2 \sin^2 \varphi)}} \quad (1.29)$$

Nous avons vu que la fonction x avait pour maximum 1. En cette valeur, $g(x)$ présente une divergence logarithmique

$$g(x) = \ln \frac{4}{\sqrt{1 - x^2}} + \dots$$

.

4-Approximation du champ moyen et solutions en 2-dimensions

L'approximation de champ moyen repose sur l'idée suivante : on suppose que dans le matériau, chaque spin σ_i ressent une influence moyenne exercée par l'ensemble des spins voisins . Ainsi, σ_i on s'intéresse au spin i , les termes de couplage de la forme $\sigma_i \sigma_j$ seront remplacés par $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ De plus , on suppose que la moyenne des spins est uniforme dans le matériau [5]

$$\sigma_i \sigma_j = (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) + m(\sigma_i + \sigma_j) - m^2$$

Tel que $\langle \sigma_i \rangle = m$. Dans ces conditions l'Hamiltonien de champ moyen s'écrit

$$H^{CM} = \sum_i -(jqm + h) + cte \quad (1.30)$$

Où q désigne le nombre de sites plus proches voisins entourant le site i . La constante est choisie de façon à égaliser les moyennes de l'Hamiltonien réel H et de H^{CM} afin de ne pas compter deux fois les interactions entre deux spins. En effet, on a

$$\langle H^{CM} \rangle = -Njqm^2 + cte = \langle H \rangle = -\frac{N}{2} jqm^2 \Rightarrow cte = \frac{N}{2} jqm^2$$

$$H^{CM} = -\sum_i (jqm + h)\sigma_i + j\frac{N}{2} qm^2 \quad (1.31)$$

4-1- Fonction de partition

Elle est donnée par:

$$Z = \sum_{\sigma_i} e^{-\beta H^{CM}} \quad (1.32)$$

On fait la somme sur tous les états de spins :

$$Z = e^{-\beta \frac{qjNm^2}{2}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta(jqm+h)\sum_i \sigma_i}$$

$$Z = e^{-\beta \frac{qjNm^2}{2}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta(jqm+h)\sigma_i}$$

$$Z = e^{-\beta \frac{qjNm^2}{2}} \left[\sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta(jqm+h)\sigma_i} \right]^N$$

Enfin, on a

$$Z = e^{-\beta \frac{qjNm^2}{2}} [2 \cosh \beta(jqm+h)]^N \quad (1.33)$$

4-2- Energie libre :

Elle est donnée par :

$$F(T) = -K_B T \ln z \quad (1.14)$$

la fonction de (1.33) ne représente pas explicitement la fonction de partition dans l'ensemble canonique. Elle dépend en effet de la température T et du paramètre d'ordre m si bien qu'elle est associée à l'énergie libre $F(T)$, Celle-ci est alors définie par

$$F(T) = \left(j \frac{q}{2} Nm^2 \right) - NK_B T \ln [2 \cosh \beta (jqm + h)] \quad (1.34)$$

4-3- Aimantation

Elle est définie comme

$$m = \langle \sigma \rangle = - \frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h}$$

$$m = - \frac{1}{N} \frac{\partial \left\{ \left(j \frac{q}{2} Nm^2 \right) - NK_B T \ln [2 \cosh \beta (jqm + h)] \right\}}{\partial h}$$

Et enfin, on a

$$m = \tanh \beta (h + jmq)$$

L'équilibre thermodynamique, caractérisé par le minimum de l'énergie libre F , conduit à l'équation fondamentale de la théorie de champ moyen fournissant l'équation d'état de la substance ferromagnétique .

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 0 \Rightarrow m = \tanh (\beta j q m) \quad (1.35)$$

4-4- Solution graphique de l'équation auto-cohérente

Si $h \neq 0$, il ya une seule solution qui assure le minimum de l'énergie libre.

Si $h = 0$, il ya deux cas :

$\beta j q > 1$: il ya deux solutions (symétriques) en plus de $m = 0$ (courbe en bleu)

$\beta j q < 1$: La seule solution est $m = 0$ (courbe en vers).

L'équation (1.35) est une équation transcendante que l'on peut résoudre graphiquement. Ainsi, comme le montre , les solutions de cette équation de la température font apparaître l'existence d'une transition pour la température critique T_c .

Si $T > T_c$, l'équation d'état admet une unique solution pour le paramètre d'ordre : $m = 0$

A l'inverse, si $T < T_c$, l'équation d'état possède une solution nulle et deux solutions non nulles et opposées. Cependant, en utilisant la contrainte sur l'énergie libre, seule les deux solutions non nulles correspondent à une situation d'équilibre. [5]

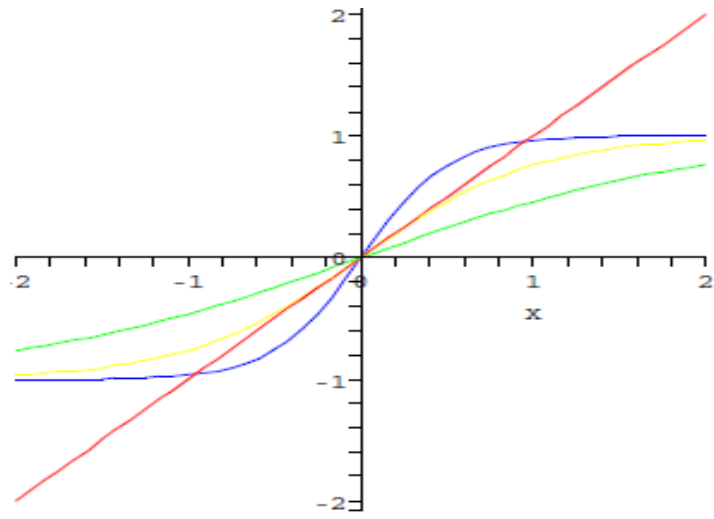


Figure 1.4 : Résolution graphique de l'équation autocohérente (1.35) avec $j=1$, $q=6$, $h=0$.

Chapitre 02

Modèle de type -Ising

1-Définition du modèle de type -Ising

Le modèle de type Ising est introduit pour l'étude de la conversion de spin dans les matériaux moléculaires, ces matériaux sont des bistables moléculaires.

Les molécules à conversion de spin ont deux états de spin possibles, Haut Spin (HS) et Bas Spin (BS). 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 a été proposé par Wajnflasz et pick . [7]

2- Modèle de type –Ising simple

L'Hamiltonien du modèle de type Ising décrivant le comportement de N molécules à transition de spin (assimilées à N sites) isolées sur un réseau peut s'écrire sous la forme :

$$H = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} \uparrow_i + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \uparrow_i \uparrow_j \quad (2.1)$$

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

\uparrow 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 S il existe $(2S + 1)$ états, donc nous appelons g_{BS} et g_{HS} les dégénérescences des valeurs propres (-1) et $(+1)$ respectivement ($g_{BS} < g_{HS}$) .

Il a été montré que ce modèle à 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.

$$H_i = \frac{\Delta}{2} \uparrow_i + \sum_{j(j \neq i)} J_{ij} \uparrow_i \uparrow_j \quad (2.2)$$

Est l'Hamiltonien de la molécules de système s'écrit :

$$H = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} \uparrow_i + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \uparrow_i \uparrow_j \quad (2.3)$$

J_{ij} est un paramètre d'interaction entre les molécules i et j . H ici est un Hamiltonien de type Ising. Lorsque J est négatif , les interactions favorisent les paires $HS - HS$ et $BS - BS$ (analogue aux interactions ferromagnétiques)et lorsque J est positif, les interactions favorisent les paires $HS - BS$ (analogue aux interactions antiferromagnétiques)

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

$$H_i = \frac{\Delta}{2} \uparrow_i + J \uparrow_i \langle \uparrow \rangle \quad (2.4)$$

$$H = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} \uparrow_i + \sum_i J \uparrow_i \langle \uparrow \rangle \quad (2.5)$$

H_i a comme valeurs propres:

$$\begin{cases} -\frac{\Delta}{2} - \sum J \langle \uparrow \rangle \\ +\frac{\Delta}{2} + \sum J \langle \uparrow \rangle \end{cases} \quad (2.6)$$

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:

$$Z = \text{Tr} e^{-S H} = \sum_i e^{-S E_i} = \prod_{i=1}^N Z_i \quad (2.7)$$

où i représente tous les états possibles du système.

$$Z_i = g_{BS} e^{-s(-\frac{\Delta}{2} \sum J \langle \uparrow \rangle)} + g_{HS} e^{-s(+\frac{\Delta}{2} \sum J \langle \uparrow \rangle)} \quad (2.8)$$

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

$$Z = \prod_{i=1}^N Z_i = (Z_i)^N \quad (2.9)$$

2-2-Aimantation

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

$$\langle \uparrow \rangle = \text{Tr}(\dots \uparrow) = \text{Tr} \frac{\uparrow e^{-S H}}{Z} = \sum_i \frac{\uparrow e^{-S E_i}}{Z} \quad (2.10)$$

d'où

$$\langle \uparrow \rangle = \frac{\left[-g_{BS} e^{-s(-\frac{\Delta}{2} \sum J \langle \uparrow \rangle)} + g_{HS} e^{-s(+\frac{\Delta}{2} \sum J \langle \uparrow \rangle)} \right] (Z_i)^{N-1}}{(Z_i)^N} \quad (2.11)$$

$$\langle \uparrow \rangle = \frac{\begin{bmatrix} -g_{BS}e^{-s(-\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} + g_{HS}e^{-s(+\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} \\ g_{BS}e^{-s(-\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} + g_{HS}e^{-s(+\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} -g_{BS}e^{-s(-\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} + g_{HS}e^{-s(+\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} \\ g_{BS}e^{-s(-\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} + g_{HS}e^{-s(+\frac{\Delta}{2}\sum J\langle \uparrow \rangle)} \end{bmatrix}} \quad (2.12)$$

Donc

$$\langle \uparrow \rangle = \frac{\begin{bmatrix} -1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-s(\Delta+2J\langle \uparrow \rangle)} \\ g_{BS} \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} 1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-s(\Delta+2J\langle \uparrow \rangle)} \\ g_{BS} \end{bmatrix}} \quad (2.13)$$

Ou

$$\dots = \frac{e^{-sH}}{Z} \quad (2.14)$$

est la matrice densité.

2-3-La fraction en Haut spin .

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

$$n_{HS} = \frac{1}{2}(1 + \langle \uparrow \rangle) \quad (2.15)$$

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

$$\langle \uparrow (T_{1/2}) \rangle = 0 \quad (2.16)$$

d'où on obtient :

$$\Delta = K_B T_{1/2} \log \left(\frac{g_{HS}}{g_{BS}} \right) \quad (2.17)$$

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

Chapitre 03

Simulations de Monte Carlo et algorithme de Metropolis

1-les simulations

1-1 -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 et quasiment par d'hypothèse spécifique. 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.[6]

2-Les Simulations par Méthode de Monte Carlo

2 -1-Définition

Le nom et le développement systématique des méthodes de Monte Carlo datent de 1944 environ. Le terme méthode de Monte Carlo (MC) désigne une famille algorithmique visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoire, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Les simulations Monte Carlo sont une classe très importante de méthodes stochastiques pour calculer les propriétés thermiques des systèmes, on s'intéresse ici à des simulations classiques (puisque il y a également des simulations MC quantiques). Les simulations MC sans doute ce sont les techniques numériques les plus importantes dans la physique statistique..[6].

En général les méthodes Monte Carlo sont utilisées pour :

- L'évaluation des intégrales.
- Des équations intégrales et différentielles ets...

Tout calcul de Monte Carlo qui conduit à des résultats quantitatifs peut être considéré comme estimant la valeur d'une intégrale multiple.

En physique statistique on peut par exemple calculer la valeur moyenne d'une grandeur physique à partir d'un modèle d'Hamiltonien

2-2-Principes des simulations Monte Carlo

Les simulations Monte Carlo repose sur trois paramètres importants :

- a-l'échantillon important.
- b-bilan détaillée.
- c- taux d'acceptation.

a-L'échantillon important

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 spins 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 .

Et $\beta = 1/K_B T$ avec K_B constante de Boltzmann ($K_B = 1.380658 \times 10^{-23} \text{ J / K}$)

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) : [8]

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

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 $[x, x + dx]$, 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 (2) 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. La fluctuation de P est donc très importante 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, compte tenu à des plusieurs particules dans l'espace continu et après nous allons voir les modèles réseau de spin aux quelles appartient le modèle d'Ising et de type Ising.

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 :

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

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

H est l'Hamiltonien.

Si l'observable A est indépendante de la vitesse (i.e. une fonction que des positions \vec{x}), les intégrales de moment annulent en (3.6), conduisant à

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

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

C'est-à-dire seulement l'énergie potentielle, est pertinent pour les propriétés statiques. 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_i 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 discrètes. 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

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \overrightarrow{S}_i \cdot \overrightarrow{S}_j \quad (3.10)$$

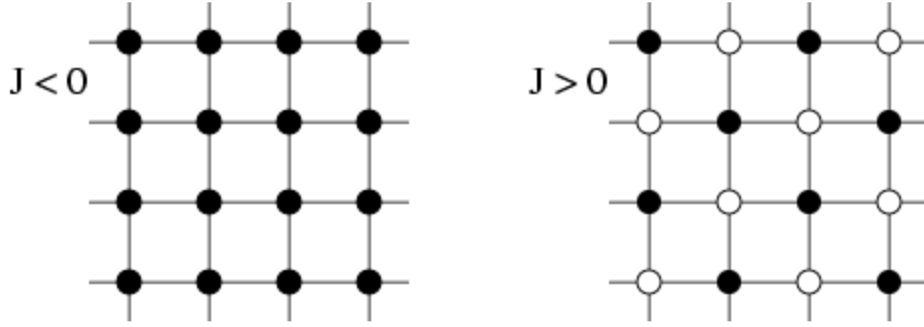


Figure 3.1: Etats-basse énergie du modèle d'Ising bidimensionnel ferromagnétique (à gauche) et (à droite) interactions antiferromagnétiques.

$$E = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (3.11)$$

Où $\langle i, j \rangle$ désigne une paire de sites proches voisins i, j . En notant σ l'ensemble des configuration de spin, la valeur moyenne thermique d'une fonction $A(\sigma)$ est

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} A(\sigma) e^{-E(\sigma)/T} \quad (3.12)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\frac{E(\sigma)}{T}} \quad (3.13)$$

Pour les interactions ferromagnétiques ($J < 0$) lorsque $T \rightarrow 0$ Il ya 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 et 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.

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.14)$$

b-Bilan détaillé

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

$$\langle A \rangle = \sum_i P(C_i) A(C_i), P(C_i) = \frac{1}{Z} e^{-E(C_i)/T} \quad (3.15)$$

Où nous travaillons en unités telles que $K_B = 1$, (nous mesurons les énergies en degrés Kelvin). Dans une simulation, nous commençons avec une configuration arbitraire $C_i(0)$ et de lui sera généré 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).

Au lieu de considérer une seule séquence de configurations, il est utile d'abord imaginé 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 mise à jour toutes par les configurations est.

$$N_1(C_i) = N_0(C_i) + \sum_j N_0(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - \sum_j N_0(C_i) P(C_i \rightarrow C_j) \quad (3.16)$$

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 $i = 1, \dots, N$

$$\sum_j N_0(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - \sum_j N_0(C_i) P(C_i \rightarrow C_j) = 0$$

Ou, depuis $N_0(c_i) \propto P(c_i)$

$$\sum_j P(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - \sum_j P(C_i) P(C_i \rightarrow C_j) = 0 \quad (3.17)$$

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;

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

C'est la condition de bilan détaillé. Puisque l'équation (3.17) est une sommation de (3.18), sur les différents états, alors chaque état satisfaisant (3.18) va satisfaire(3.17).

b-Taux d'acceptation

Après l'avoir décrit précédemment comme élément important pour l'obtention rapide et efficace d'un système à l'état d'équilibre, nous avons aussi démontré que nous pouvons générer un processus de Markov avec lequel nous pouvons retrouver de nouveaux états avec une probabilité qui puisse répondre à l'équation (3.18). Cependant, il est difficile de prévoir le processus de Markov approprié pour générer un nouvel état à partir d'un autre état précédent avec un bon ensemble de probabilités de transition. D'après l'équation de la balance détaillée, les probabilités de transition doivent satisfaire [10] :

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{P(C_i)}{P(C_j)} \quad (2.19)$$

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, la fonction de partition disparaît dans le rapport sur le côté droit de ces équations.

On peut aussi écrire

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

Qui est la condition de bilan détaillé.

La plupart des simulations de Monte Carlo sont basées sur les principes de bilan détaillé et érgodicité.

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 érgodicité 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 en feuilletant un spin choisi au hasard, dans auquel cas N nouvelle configuration peut être atteint. Pour un système de particules dans l'espace continu, on peut envisager de déplacer une particule choisie au hasard par un vecteur de déplacement δ^{\rightarrow} , avec δ^{\rightarrow} choisi au hasard dans une sphère .

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 (sélection du spin à être retourné, ou la particule d'être déplacé et le vecteur de déplacement δ^{\rightarrow} 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, $P(C_i \rightarrow C_j) = \text{Constante}$, indépendante de i, j . Cette partie de la probabilité de transition tombe alors sur la condition de bilan détaillé (3.21) et on se retrouve avec une condition bilan détaillé pour les probabilités d'acceptation :

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

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

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

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 (3.23). Pour déterminer si ou non la mise à jour sera acceptée lorsque $P(C) < 1$, la probabilité d'acceptation peut être comparé avec un numéro (random number)

$$r \in [0;1], \text{ si } r < P^{\text{accept}}(C_j \rightarrow C_i)$$

la mise à jour est acceptée, 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 Métropolis.

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 $P_{\text{accept}}(C_i \rightarrow C_j)$. 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 [8] :

$$W(C')/W(C) = \exp \left[J/T \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma'_i \sigma'_j - \sigma_i \sigma_j) + h/T \sum_i (\sigma'_i - \sigma_i) \right] \quad (3.26)$$

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

$$W(C')/W(C) = \exp \exp \left[-2(J/T) \sigma_i \left(\sum_i \delta_{[j]} - hJ \right) \right] \quad (3.27)$$

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 avec un peu plus d'effort on peut montrer que 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 :

$$M = \sum_i \sigma_i N_i, m = MN \quad (3.28)$$

Comme nous avons discuté, 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 04

Simulations du modèle de type-Ising antiferromagnétique

1-Caractéristiques des systèmes simulés

Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d = 2$) de taille $L=16,32,64$ et 128 , avec des conditions périodiques aux bords, en trois phases initiales différentes : aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS), et pour des valeurs de delta ' Δ ' suivantes : $\Delta = 0$ "modèle d'Ising" et $\Delta = 5,10,15$ "modèle de type Ising antiferromagnétique", pour des valeurs de la température dans l'intervalle $[0.5,4]$ dans le cas du modèle d'Ising, et dans l'intervalle $[0.5,25]$ dans le cas du modèle de type Ising, la température est en unité de $[K_B / J]$.

2-Résultats et discussion

2-1-Aimantation du modèle d'Ising

Dans le modèle d'Ising antiferromagnétique on s'intéresse à la valeur absolue de l'aimantation $|m|$, nous remarquons que $|m|$ est toujours nulle quelque soit la valeur de la température, donc le système reste toujours dans la phase ordonnée antiferro (**Figure 4.1**).

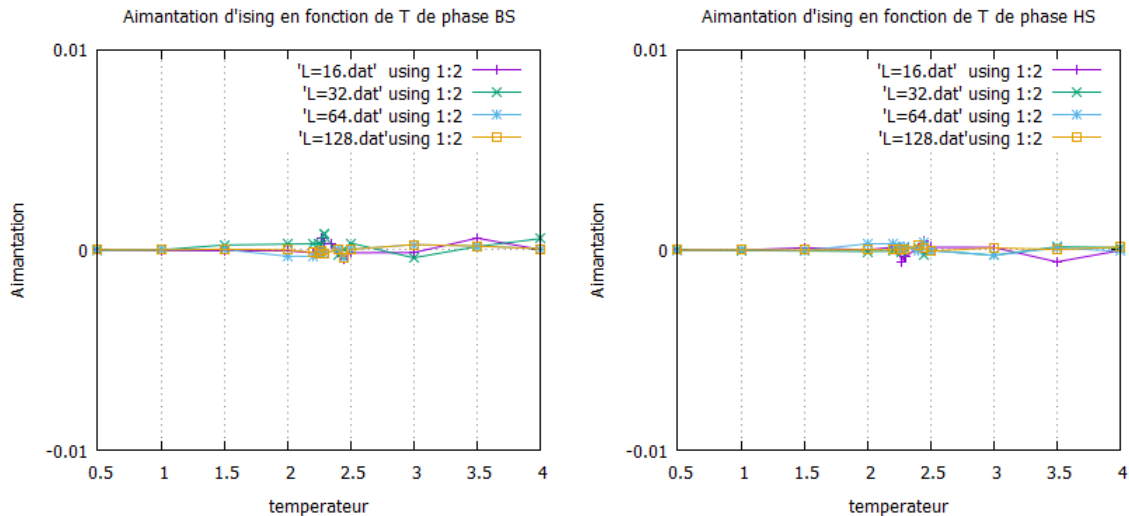


Figure 4.1 : Aimantation du modèle de type Ising en fonction de la température (phase-BS-HS), pour un réseau carré de taille $L=16,32,64,128$, la mesure est faite après 10^5 MCS

On remarque que l'aimantation du modèle d'Ising antiferromagnétique est nulle pour toutes les valeurs de la température.

2-2- Aimantation du 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 fortes (pour des valeurs de $\Delta = 5$ relativement faibles) l'aimantation indique que le système est en phase ordonnée antiferromagnétique à basse température, puis il passe vers la phase ordonnée HS à haute température graduellement (**Figure 4.2 et 4.3**).

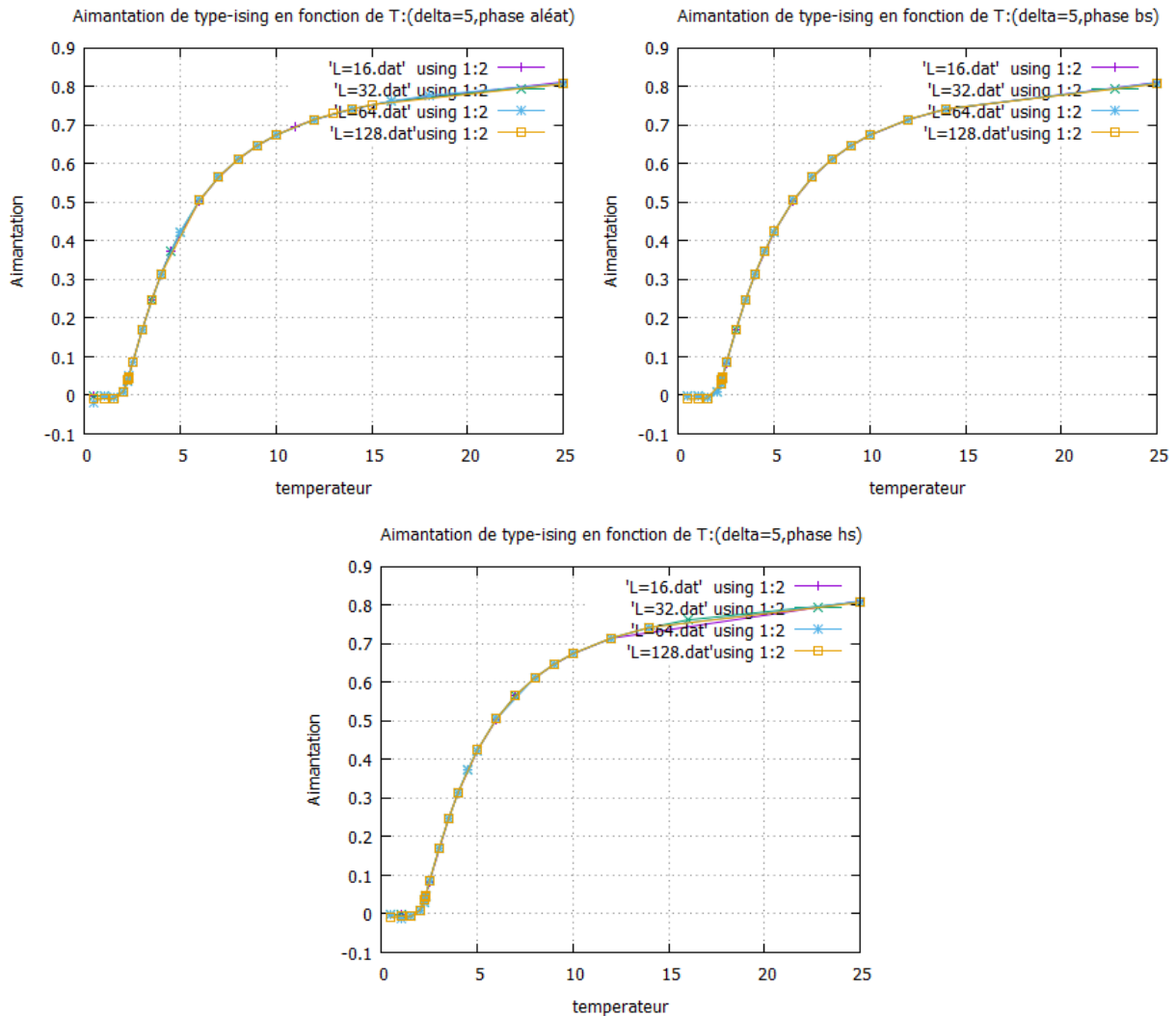


Figure4.2 : Aimantation du modèle de type Ising en fonction de température ($\Delta = 5$; phase aléat HS , BS), pour un réseau carré de taille $L=16,32,64,128$, la mesure est faite après 10^5 MCS

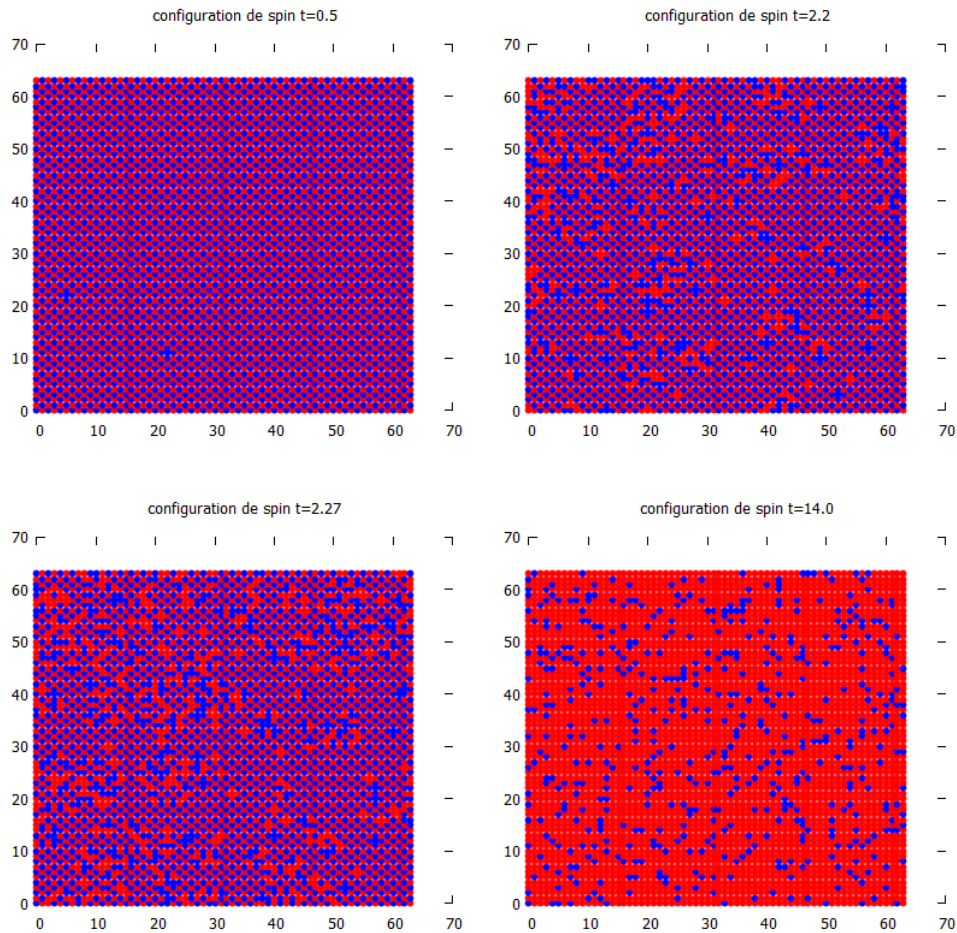
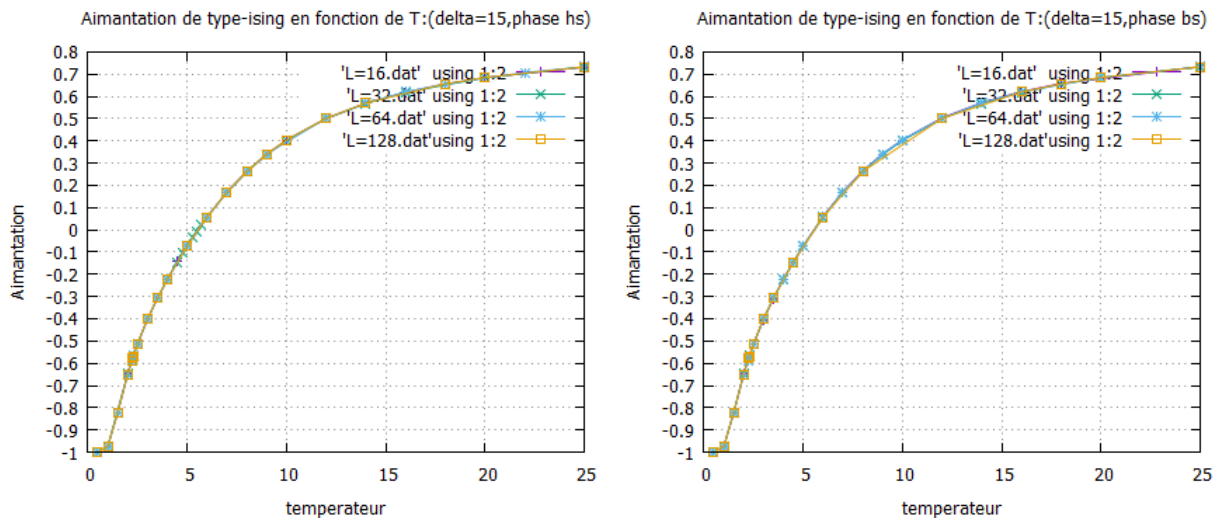


Figure 4. 3 : Configuration de spin en fonction de la température (phase- BS , $L=64$, $\Delta = 5$)

Pour des interactions faibles (pour des valeurs de $\Delta = 15$ relativement fortes) l'aimantation indique que le système est en phase ordonnée ferromagnétique BS à basse température : ceci est due au champ de ligand qui favorise toujours les phases ordonnées ferromagnétiques, au contraire à la constante d'interactions J qui favorise la phase antiferromagnétique, puis le système passe vers la phase ordonnée HS à haute température graduellement (**Figure 4.4 et 4.5**)



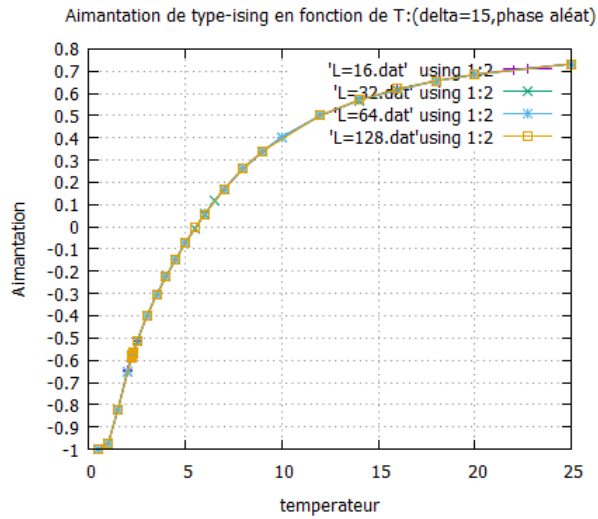


Figure 4.4: Aimantation du modèle de type Ising en fonction de la température, ($\Delta=15$; phase aléat, BS, HS) pour un réseau carré de taille $L=16,32,64,128$, la mesure est faite après 10^5 MCS

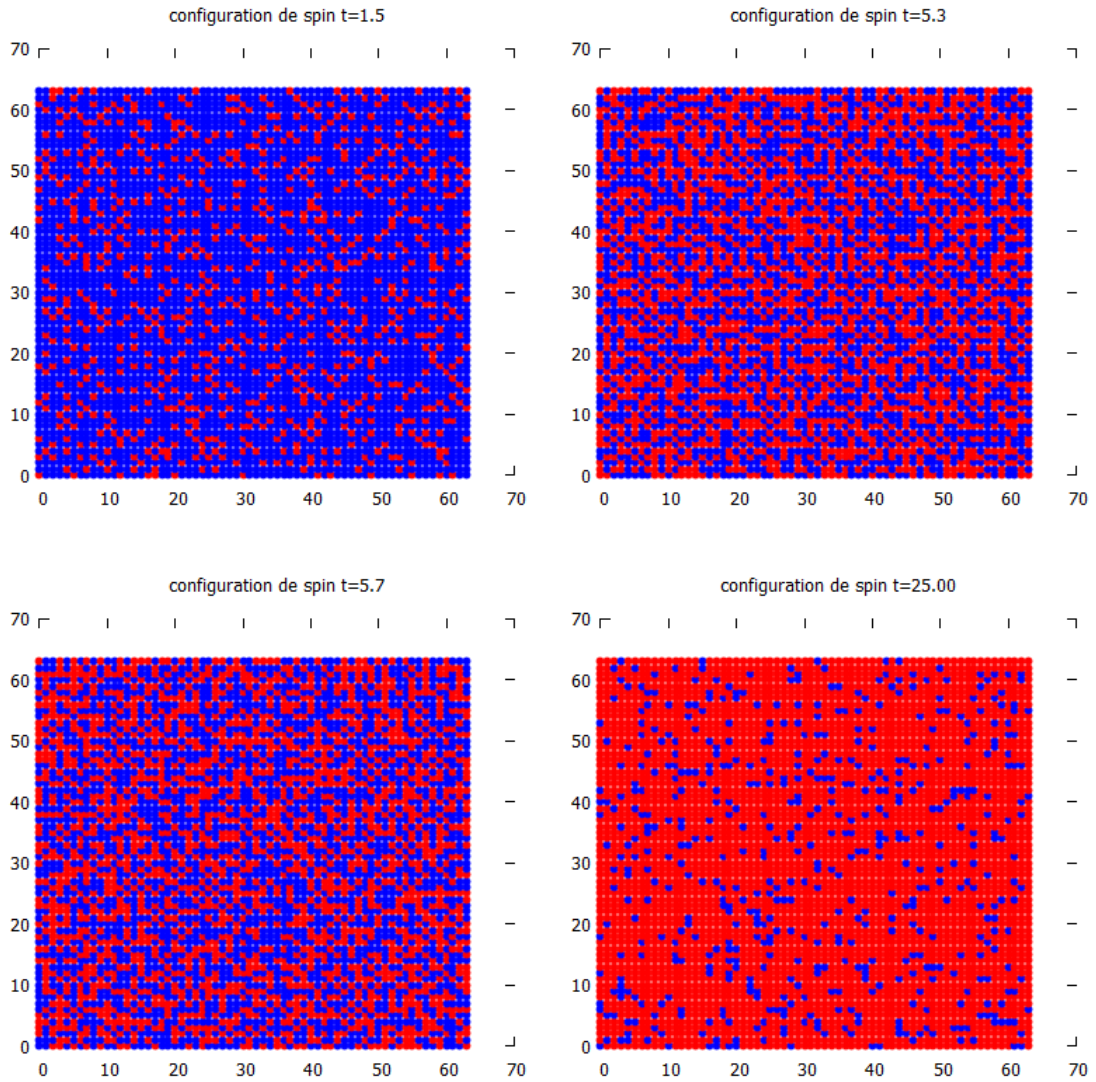


Figure 4.5 : Configuration de spin en fonction de la temperature (phase- BS , $L=64$, $\Delta =15$).

La comparaison des courbes de l'aimantation pour des valeurs différentes du champ de ligand montre que le champ affecte, la phase du système à basse température qui est naturellement la phase antiferromagnétique : plus le champ est fort plus le système, à basse température, s'oriente vers la phase BS. A haute température l'effet du champ se limite à l'accélération du système vers la phase HS (**Figure 4.6**).

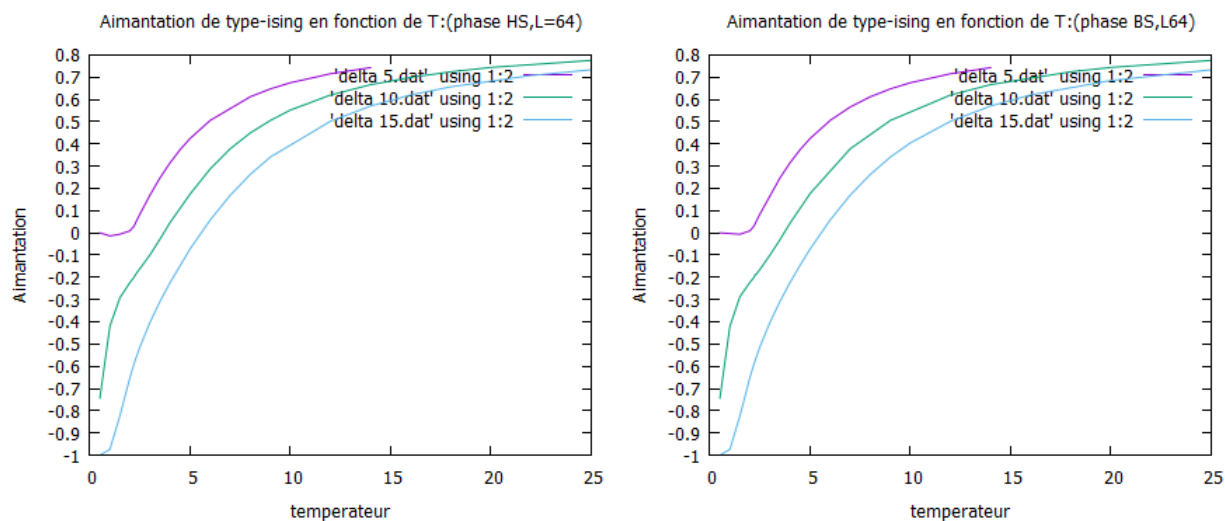


Figure4.6 :Aimantation du modèle de type Ising en fonction de la température($L=16,32,64$;phase-HS-) pour un delta différent(5,10,15) , la mesure est fait après 10^5 MCS .

Conclusion

Nous avons étudié dans ce mémoire le modèle de type-Ising antiferromagnétique 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 système: (aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS)). L'algorithme utilisé dans les simulations MC est celui de Métropolies.

Nous avons mesuré l'aimantation du modèle et nous avons montré la configuration de spin du système pour des interactions antiferromagnétiques fortes et pour celles faibles et ce en fonction de la température. Les courbes de l'aimantation et les configurations de spin montrent que le champ de ligand favorise les deux phases ordonnées BS et HS aux basses et hautes températures respectivement, en particulier à basse température, plus le champ est intense plus le système montre un passage claire de sa phase antiferromagnétique, favorisée par les interactions entre paires de spins, vers la phase ferromagnétique BS.

Références

- [1] Y. Velenik , le modele d'Ising.90p. 25 mai 2009.
<http://www.unige.ch/math/folks/velenik/cours.html> (25 mars 2017).
- [2] Nicolas Vandewalle et Stéphane Dorbolo, Introduction`a la Physique Statistique(2006)
- [3] Ismail ZERGOUG, Modèle d'Ising dilué. Thèse pour l'obtention d'un Doctorat 3 cycle en Physique Option Physique Médicale, Oran, 129p. 2005.
- [4] Gabriel chardin , pascal Debu et jérome peresz. Éléments de physique statistique (2015)
- [5] Vincent Pouthier , INTRODUCTION AUX PHENOMENES CRITIQUES.
<https://www.utinam.cnrs.fr/IMG/pdf/critique.pdf>(1 avril 2017).
- [6] Mme BOUDEFLA Rania ép BELARBI Etude numérique du modèle Ashkin Teller Pour l'obtention du diplôme de :Doctorat en sciences spécialité: Physique Théorique (5 décembre 2015 Tlemcen).
- [7] Abboud METATLA la conversion de spin dans les molécules bistables étude théorique Pour obtenir le diplôme de Doctorat en sciences en physique Option: Physique Théorique(25.11.2013).
- [8] Anders. W ; Sandvika, Computationnel Physics Monte Carlo simulation in classical statistical physics. Département of Physics, (2013. Boston University) .
- [9] Alexandre. B, Simulation de Monte Carlo pour un matériau magnétique. (8 Février 2014).
- [10] Sanae ZRIOUEL , Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone , THÈSE DE DOCTORAT Spécialité : Physique Mathématique.12 Mars 2016 RABAT (MOROCCO).

لقد تعرضنا في هذه المذكرة لدراسة نوع ايزينج مغنطة الحديدية العكسية بي بعدين بواسطة طريقة مونت كارلو. نموذج نوع ايزينج قدم لدراسة تحول السبين في المواد الجزيئية .

الكلمات المفتاحية: - ايزينج , المغنطة الحديدية العكسية .

RESUME

Nous avons étudié dans ce mémoire le modèle de type-Ising antiferromagnétique en 2D par les simulations Monte Carlo. Le modèle de type Ising est introduit pour l'étude de la conversion de spin dans les matériaux moléculaires .

Mot clés: Modèle type- Ising , simulations Monte Carlo , antiferromagnétique.