

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

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° : Ph/TH/06/2023



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

**Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique**

Par: Khalil ELGOUIZI

Intitulé

**Capacité Calorifique du Modèle de Type-Ising
pour la Conversion de Spin en 2D: Etude par La
Dynamique des Clusters de Monte Carlo.**

Soutenu le 20 / 06 / 2023 devant le jury composé de:

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

Année universitaire : 2022/2023

REMERCIEMENTS



﴿ وَاللَّهُ أَحْرَجَكُمْ مِنْ بُطُونِ أُمَّهَاتِكُمْ لَا تَعْلَمُونَ شَيْئًا وَجَعَلَ لَكُمُ السَّمْعَ وَالْأَبْصَارَ وَالْأَفْئِدَةَ ۗ لَعَلَّكُمْ تَشْكُرُونَ ﴾

سورة النحل الآية 78

Louange et gratitude à Dieu pour m'avoir permis d'atteindre ce stade scientifique et d'être parmi vous aujourd'hui pour discuter de cette thèse.

J'adresse également mes sincères remerciements aux membres du jury de discussion, qui sont :

Le Prof. **H'mida LATELLI**, qui m'a honoré en acceptant de présider le jury de discussion.

Le Dr. **Siham KALLI**, qui est mon enseignante pour plusieurs modules accompagné le long de mon parcours académique.

Le Dr. **Abboud METATLA**, pour avoir accepté de diriger ce mémoire, pour son suivi attentif et son intérêt. Merci infiniment, honorable homme.

Vous n'avez jamais lésiné sur vos efforts, votre temps et votre aide chaque fois que j'en avais besoin. Votre encadrement de mon mémoire a été essentiel pour sa réalisation et le fait qu'elle soit entre vos mains aujourd'hui pour discussion.

Je n'oublierai jamais non plus mes remerciements à tous les enseignants et amis que j'ai rencontrés au cours de ma carrière universitaire.

Vous méritez tous les éloges et ma gratitude sincère. Que Dieu vous préserve pour continuer à servir le savoir et qu'Il vous récompense pour tout ce que vous offrez aux étudiants...

Khalil ELGOUIZI

DÉDICACE

Je dédie ce fruit de mon travail à ceux qui ont été la raison de ma passion pour les sciences et de mon ambition à atteindre les plus hauts sommets : à mon père et ma mère, qui ont été le moteur de mon activité et ont contribué à l'élargissement de mes connaissances.

À mes frères et sœurs, je leur suis extrêmement reconnaissant de m'avoir toujours soutenu.

J'aimerais également exprimer ma reconnaissance particulière à mes collègues de l'université. Leur dévouement envers l'apprentissage de chaque élève est admirable. En particulier, mes amis de classe méritent une mention spéciale pour la place qu'ils occupent dans mon cœur, chacun d'entre eux : « **Yacoub, Badro, Salah, Loqman, Mohammed, Elias, Nabila, Dalal, Wissam, Saadia** »

En réponse à leur soutien précieux et à leur gratitude, je dédie ce travail à ma famille du C.E.M **Al-Hassan Al-Basri**, qui sont tous des travailleurs acharnés, sans exception. Je les remercie pour leur patience et leur gentillesse à mon égard.

Et enfin, je souhaite conclure en dédiant ce travail avec une profonde gratitude envers tous ceux qui m'ont encouragé à poursuivre mes études et à raviver mon projet de fin d'études lorsque celui-ci était près de mourir.

Khalil ELGOUIZI

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE.....	6
-----------------------------------	----------

CHAPITRE I:

LA CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

I.1. Introduction et rappel historique	10
I.2. Types de conversion de spin	11
I.2.1. Transition de spin graduelle.....	11
I.2.2. Transition abrupte	11
I.2.3. Transition avec hystérésis	11
I.2.4. Transition en deux étapes.....	11
I.3. Rappel de quelques notions et outils de physique statistique	12
I.3.1 L'opérateur densité	12
I.3.2 Valeur Moyenne	13
I.3.3 L'entropie statistique.....	13
I.3.4 Ensembles statistiques	14
I.3.4.1 Ensemble microcanonique	14
I.3.4.2 Ensemble canonique	15
I.3.4.3 Ensemble grand canonique.....	16

CHAPITRE II:

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

II.1. Définition du modèle d'Ising	19
II.2. Modèle d'Ising en 1D	19
II.3. Modèle d'Ising en 2D	21
II.3.1 Approximation de champ moyen de Weiss	21
II.3.2 Solution d'Onsager	24
II.4. Modèle de type-Ising.....	25
II.4.1 Définition du modèle de type -Ising	25

II.4.2 Modèle de type Ising simple.....	25
---	----

CHAPITRE III:

DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

III.1 Définition de la simulation	29
III.1.1 Principe de simulation	29
III.1.2 Bref histoire de simulation de Monte carlo	30
III.2 Introduction de l'estimateur-échantillonnage de l'espace des phases	30
III.2.1 L'estimateur des moyennes thermodynamiques.....	30
III.2.2 L'échantillonnage aléatoire et son importance	31
III.2.3 Chaine de Markov pour échantillonner le système à l'équilibre	31
III.2.3.1 Equation Maitresse	31
III.2.3.2 Taux d'acceptation	33
III.3 Algorithmes de simulation.....	33
III.3.1 Algorithme de Metropolis	33
III.3.1.1 Moyenne thermique à l'équilibre thermodynamique	35
III.3.2 Algorithme de Swendsen-Wang.....	37

CHAPITRE IV:

RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

IV.1 Caractéristiques générales des systèmes simulés	41
IV.2 Résultats des simulations sur la Capacité Calorifique	42
CONCLUSION GENERALE.....	45
REFERENCES.....	47

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Le modèle d'Ising est un modèle de Physique Statistique largement connu et utilisé depuis son introduction en 1920[1,2]. Sa simplicité et son comportement riche en ont fait un choix populaire pour tester de nouvelles idées et méthodes en Physique Statistique. Il a également trouvé des applications dans divers domaines, qualitatifs et parfois quantitatifs. Dans les années 1940, Lars Onsager a démontré l'existence d'une transition de phase dans le modèle d'Ising bidimensionnel [3,4,5], ce qui en fait l'un des modèles les plus simples présentant une telle transition. Plus tard, dans les années 1970, Wajnflasz et Pick ont utilisé une variante du modèle d'Ising, appelée "modèle de type-Ising" [6], pour décrire le phénomène de transitions dans les molécules bistables.

L'électronique mobile, Internet, l'intelligence artificielle, le big data et le calcul haute performance ont entraîné une explosion du volume des données numériques à travers le monde. Pour relever ce défi, il est crucial de développer des techniques de stockage de données à haute densité. Parmi ces techniques, le stockage de données au niveau moléculaire a suscité un grand intérêt. Certains complexes moléculaires de métaux de transition ont montré une propriété appelée "conversion de spin", où ils peuvent changer leur état électronique de manière réversible sous l'influence de diverses perturbations externes, telles que la température, la radiation, la pression, le champ magnétique, etc... Ce phénomène implique des changements structurels importants dans la molécule et conduit à des modifications des propriétés physiques telles que les propriétés magnétiques, optiques, électriques et mécaniques [7].

Le modèle de type-Ising est largement utilisé dans l'étude des matériaux à conversion de spin. C'est un modèle théorique simple à niveaux discrets qui peut être adapté à différents types de conversion. Bien qu'il ait une solution exacte en une dimension, il nécessite des simulations (Monte Carlo (MC)) pour son étude en deux dimensions et plus. Les simulations MC sont des outils puissants largement utilisés pour l'étude de systèmes réels. Ainsi, le modèle d'Ising en Physique Statistique et le modèle de type-Ising dans l'étude des matériaux à conversion de spin sont tous deux des sujets de recherche importants qui utilisent des techniques de simulation telles que les simulations MC pour approfondir notre compréhension des transitions de phase et des phénomènes physiques associés.

INTRODUCTION GENERALE

Ce mémoire a pour objectif l'étude de la Capacité Calorifique d'un système à conversion de spin en utilisant le modèle de type-Ising en 2D à l'aide des techniques MC via la dynamique des clusters de Swendsen-Wang. Il est structuré de la manière suivante :

Le premier chapitre introduit le phénomène de transition de spin. Il rappelle tout d'abord les notions générales sur la transition de spin, ainsi que quelques concepts de base et outils de physique statistique sur lesquels repose notre étude.

Le deuxième chapitre se concentre sur l'étude d'un système de spins en interaction. Nous présentons le modèle d'Ising qui décrit ce système, et mettons en avant son avantage majeur : la solution exacte connue pour une et deux dimensions. Ensuite, nous abordons l'étude du modèle de type-Ising pour les systèmes à conversion de spin.

Le troisième chapitre présente les techniques de simulation MC, en mettant l'accent sur les algorithmes de Metropolis et de clusters de Swendsen-Wang. Tout cela est réalisé dans le cadre de la description canonique.

Le dernier chapitre présente les résultats des simulations ainsi que leur discussion. Enfin, la conclusion clôture ce mémoire.

CHAPITRE I

LA CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

I.1. Introduction et rappel historique

La transition de spin ou la conversion de spin peut être observée dans les métaux de transition ayant une configuration électronique de d^4 à d^7 lorsqu'ils sont introduits dans des complexes de symétrie octaédrique. Cette transition se produit lorsque la force du champ de ligands est de l'ordre de l'énergie d'appariement des électrons dans les orbitales d . Cela est le cas pour les cations $Fe(III)$ [8,9], $Co(II)$ [10], $Co(III)$ [11], $Mn(II)$ [12], $Mn(III)$ [13], $Cr(II)$ [14] et $Fe(II)$ [15,16]. Parmi ceux-ci, le cation $Fe(II)$ est le plus étudié en raison de ses propriétés originales et de la diversité observée dans ses complexes. Sous l'effet d'une contrainte extérieure telle qu'une variation de température, une irradiation lumineuse, une pression ou l'application d'un champ magnétique, par exemple, l'ion métallique subit des modifications au niveau de son état de spin.

Ce phénomène a été observé pour la première fois en 1931 dans le complexe tris(dithiocarbamate) de fer(III) par L. Cambi et L. Szegö [8]. Ces chercheurs ont expliqué le changement des propriétés de ce composé par l'existence de deux isomères magnétiques. En 1956, Griffith introduit la notion d'"équilibre de spin" dans un composé d'hémoglobine ferrique hydroxyde [17]. Ensuite, en 1959, Balhausen et Liehr expliquent l'équilibre de spin de certains complexes tétracoordinés du Ni(II) par la faiblesse de l'écart énergétique entre les niveaux singulet et triplet, plutôt que par un changement de conformation [18]. Ils suggèrent que la conversion de spin peut être induite par la température via le peuplement de Boltzmann au niveau triplet. En 1961, cette hypothèse est confirmée par le suivi du moment magnétique du composé $[Co(PdAdH)_2]I_2$ ($PdAdH = 2,6$ -pyridindialdihydrazone) en fonction de la température [19]. En 1964, Baker et Bobonich mettent en évidence la première transition de spin d'un composé de Fe(II) à l'état solide avec le complexe $[Fe(phen)_2(NCS)_2]$ [20], tandis qu'Ewald et al. [9] introduisent la notion de "spin crossover" (SCO) dans le cadre de la théorie du champ de ligands pour décrire un changement d'état de spin.

I.2. Types de conversion de spin

Lorsqu'on étudie le phénomène de la conversion de spin, on s'intéresse à la fraction de molécules se trouvant dans l'état haut spin (*HS*) en fonction de la température, ce qui permet d'obtenir différentes formes de courbes de conversion de spin. Ces courbes nous permettent de distinguer quatre types de conversions.

I.2.1. Transition de spin graduelle

Les caractéristiques de la transition de spin dépendent toujours de la coopérativité du système [21]. La transition graduelle apparaît comme le type le plus fréquent dans le cas des systèmes présentant des interactions faibles, généralement observée dans les systèmes en solution. Ce type de transition a été observé dans la famille des composés $[\text{Fe}(\text{L})_3](\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ et $[\text{Fe}(\text{L})_3](\text{ClO}_4)_2$ avec $\text{L} = 2\text{-}(2'\text{-pyridyl})\text{benzimidazole}$ [22].

I.2.2. Transition abrupte

Ce type de transition se penche sur les systèmes avec des interactions à coopérativité forte. La première transition de ce type a été observée dans le composé $[\text{Fe}(\text{phen})_2(\text{NCS})_2]$ [20] ($\text{phen} = 1,10\text{-phénanthroline}$).

I.2.3. Transition avec hystérésis

L'hystérésis thermique est observée dans les matériaux présentant des interactions fortes à longue distance. Ces systèmes se caractérisent par des interactions coopératives intenses. Cette transition est associée à un changement de phase cristallographique, ainsi qu'à des modifications dans la nature du système [23]. L'hystérésis confère au système une bistabilité sur une large plage de températures, ce qui permet d'exploiter un effet de mémoire dans le développement de dispositifs de stockage de l'information et de commutation moléculaire.

I.2.4. Transition en deux étapes

Dans ce type de transition, un plateau presque horizontal est observé dans la courbe de conversion autour de $n_{\text{HS}} = 0.5$, ce qui résulte de la formation préférentielle des paires d'états (*BS-HS*) [24].

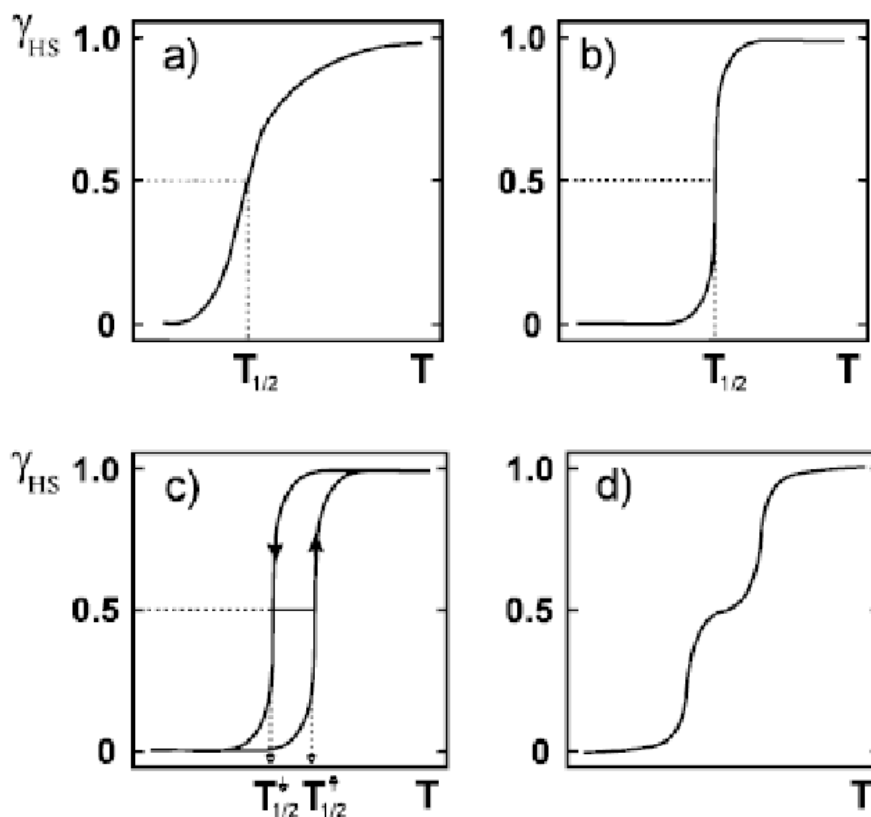


Figure I.1: Représentation schématique des principales courbes SCO.
a)- Transition graduelle de spin, b)- Transition abrupte.
c)- Transition avec hystérésis, d)- Transition en deux étapes

I.3. Rappel de quelques notions et outils de physique statistique

I.3.1 L'opérateur densité

L'opérateur densité paraît comme un outil commode qui permet de donner une expression simple et compacte aux propriétés du système [25].

Considérons un système qui peut se trouver dans un quelconque des états (purs) d'un ensemble $\{|\psi_m\rangle; m = 1, 2, \dots\}$ chacun de ces états a en quelque sorte une probabilité d'être réalisé $\{p_m; m = 1, 2, \dots\}$.

Avec $\sum_m P_m = 1; 0 \leq P_m \leq 1$ pour tous m .

CHAPITRE I : LA CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

L'opérateur densité est donc associé au mélange statistique $\{|\psi_m\rangle, P_m\}$, est défini par [26] :

$$\hat{\rho} = \sum_m P_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| \quad (\text{I.1})$$

La matrice densité possède les propriétés suivantes :

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

Considérons maintenant le cas particulier où le mélange statistique ne comporte qu'un seul ket $|\psi\rangle$ avec probabilité 1. Donc le système se trouve dans l'état pur. L'opérateur densité donne dans ce cas :

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (\text{I.3})$$

I.3.2 Valeur Moyenne

La valeur moyenne d'une grandeur physique A est vue au sens de la mécanique quantique par:

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad (\text{I.4})$$

La valeur moyenne d'un opérateur A s'exprime tout simplement grâce à l'opérateur densité [27] par:

$$\begin{aligned} \langle\hat{A}\rangle &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle \\ &= \sum_n \langle n|\hat{A}\hat{\rho}|n\rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

I.3.3 L'entropie statistique

Considérons un système quelconque. En mécanique statistique, la grandeur qui joue un rôle très important est l'entropie statistique défini par [28]:

$$S = -K_B \sum_l P_l \ln P_l \quad (\text{I.6})$$

Où P_l est la probabilité de l'état microscopique l du système et K_B est la constante de Boltzmann.

CHAPITRE I : LA CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

Boltzmann a montré qu'on pouvait simplement exprimer l'entropie statistiquement sous la forme:

$$S = K_B \ln(\Omega) \quad (\text{I.7})$$

Où (Ω) est vu comme le nombre de configurations microscopiques.

En physique statistique quantique, la définition de l'entropie statistique doit reposer sur l'opérateur densité sous la forme suivante :

$$S(\hat{\rho}) = -K_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad (\text{I.8})$$

I.3.4 Ensembles statistiques

L'étude d'un problème concret en physique statistique a besoin tout d'abord d'une définition claire et précise du cadre dans lequel cette étude va se placer : il faut qu'on définisse le système que l'on va étudier et les contraintes extérieures sur ce système. L'ensemble statistique correspondant sera donc utilisé pour établir des liens entre les grandeurs observables du système [29]. Trois cas sont étudiés

I.3.4.1 Ensemble microcanonique (système isole)

Soit un système de N objet microscopiques identiques: atomes, molécules, ions ou spins isolés, donc leurs énergie totale E reste une constante, N est supposé fixé (système isole).

Un système avec toutes ces propriétés est vu comme un ensemble microcanonique. Les micro-états qui sont accessibles au système sont pour lesquels l'énergie totale E appartient à l'intervalle $E_0 \leq E \leq E_0 + \delta E$. Tous les micro-états sont équiprobables parce qu'il existe un équilibre statistique.

Si Ω parait comme le nombre de micro-états accessibles, la probabilité de trouver un système dans un micro-état donné est égale à $\frac{1}{\Omega}$ [26]. Sa matrice densité a la forme suivante :

$$\rho_{mc} = \sum_n P(E_n) |n\rangle \langle n| \quad (\text{I.9})$$

CHAPITRE I : LA CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

$$P(E_n) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega} & \text{si } E_0 \leq E \leq E_0 + \delta E \\ 0 & \text{dans tout les cas} \end{cases} \quad (\text{I.10})$$

Avec $\Omega = \Omega(E, N, V)$.

Alors l'entropie statistique d'un système isolé serait :

$$\begin{aligned} S &= -K_B \sum_l P_l \ln P_l = K_B \sum_l \frac{1}{\Omega} \ln \Omega \\ &= K_B \frac{1}{\Omega} \ln \Omega \sum_l 1 = K_B \ln \Omega \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

Remarque

- L'entropie constitue d'une fonction extensive i.e. proportionnelle à N , c'est une propriété additive.
- Elle a les dimensions de K_B , c'est à dire d'une énergie divisée par la température, $K_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J / k}$.

La valeur moyenne d'une grandeur physique A , dans cet ensemble statistique est donnée par:

$$\langle A \rangle = \sum_m A_m P_m = \frac{1}{\Omega} \sum_{m=1}^{\Omega} A_m \quad (\text{I.12})$$

I.3.4.2 Ensemble canonique (système fermé)

Considérons un système (S) en contact thermique avec un réservoir beaucoup plus grand que lui, que nous appellerons le réservoir. Le système (S) peut échanger de l'énergie avec le réservoir, mais il n'y a pas d'échange de matière [30,4].

Dans ce cas, la matrice densité du système est décrite par l'ensemble canonique et est donnée en fonction de l'Hamiltonien du système [31,32].

$$\hat{\rho}_c = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}; \beta = \frac{1}{K_B T} \quad (\text{I.13})$$

Avec Z est la fonction de partition :

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right) \quad (\text{I.14})$$

La connaissance de cette fonction permet de donner des descriptions sur les grandeurs physiques fondamentales [28].

CHAPITRE I : LA CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

- Energie moyenne :

$$\bar{E} = \langle H \rangle = Tr(\rho_c H) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad (\text{I.15})$$

- La capacité calorifique est :

$$C_v = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right) = \frac{\partial}{\partial T} \left[-\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right] = \frac{1}{K_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (\text{I.16})$$

- Entropie canonique :

$$\begin{aligned} S(\hat{\rho}_c) &= -K_B Tr(\hat{\rho}_c \ln \hat{\rho}_c) = \frac{K_B}{Z} \sum_l [\beta E_l e^{-\beta E_l} + e^{-\beta E_l} \ln Z] \\ &= \frac{1}{T} (\bar{E} + K_B T \ln Z) \end{aligned} \quad (\text{I.17})$$

- Energie libre :

$$F = -K_B T \ln Z \quad (\text{I.18})$$

Cette définition permet de réécrire l'entropie sous la forme suivante :

$$S = \frac{\bar{E}}{T} - \frac{F}{T} \quad (\text{I.19})$$

I.3.4.3 Ensemble grand canonique (système ouvert)

Revenons à la situation du système (S) en contact avec le réservoir, décrite dans le paragraphe précédent. Supposons maintenant qu'en plus de l'échange d'énergie, il y a également un échange de matière (de particules) avec le système (S). Dans ce cas, on parle d'un ensemble grand canonique [33].

La matrice densité dans ce cas est:

$$\hat{\rho}_{gc} = \frac{e^{-\beta(\hat{H}_1 - \mu N_1)}}{Z_{gc}} \quad (\text{I.20})$$

Ou H , l'Hamiltonien du système, μ est le potentiel chimique du réservoir, qui est définie par:

$$\mu = -T \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right) \quad (\text{I.21})$$

CHAPITRE I : LA CONVERSION DE SPIN DANS LES MOLECULES BISTABLES

On définit la grande fonction de partition Z_{gc} par:

$$Z_{gc} = Tr \left[e^{-\beta(H_1 - \mu N_1)} \right] \quad (\text{I.22})$$

Qu'elle peut s'exprimer en fonction de la fonction de partition canonique par la relation :

$$Z_{gc} = \sum_N e^{\beta\mu N} Z_c \quad (\text{I.23})$$

On rappelle ici quelques formules utiles des grandeurs physiques [34,28]

- Le nombre moyen de particule N vaut

$$\bar{N} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_{gc}}{\partial \mu} = K_B T \frac{\partial \ln Z_{gc}}{\partial \mu} \quad (\text{I.24})$$

- L'énergie moyenne vaut E

$$\bar{E} = \mu \bar{N} - \frac{\partial \ln Z_{gc}}{\partial \beta} = K_B T \frac{\partial \ln Z_{gc}}{\partial \mu} \quad (\text{I.25})$$

- Entropie grand canonique

$$S(\hat{\rho}_{gc}) = -K_B Tr(\hat{\rho}_{gc} \ln \hat{\rho}_{gc}) = \frac{1}{T}(\bar{E} - \mu \bar{N}) + K_B \ln Z_{gc} \quad (\text{I.26})$$

- Une nouvelle fonction appelée "grand potentiel" J par:

$$J = -K_B T \ln Z_{gc} \quad (\text{I.27})$$

CHAPITRE II

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

II.1. Définition du modèle d'Ising

L'étude du phénomène de transition de phase des systèmes de spin en interaction repose sur le modèle d'Ising, qui vise à décrire ces systèmes. Il est considéré comme le modèle le plus simple pour illustrer la transition de phase magnétique, ce qui est l'objet du présent chapitre. Le principal intérêt du modèle d'Ising réside dans sa résolubilité exacte en une et deux dimensions. Ce modèle a été introduit en 1925 par Ising [1,2] et a connu un succès remarquable en physique, notamment après l'obtention de sa solution exacte en deux dimensions par Onsager en 1944 [3,4,5].

II.2. Modèle d'Ising en 1D

Pour un système linéaire d'Ising de N particules se referme sur lui-même au bout de N spins, c'est-à-dire que le spin ($N + 1$) et le spin 1 restent en fait une seule et même entité (**Figure : II.1**).

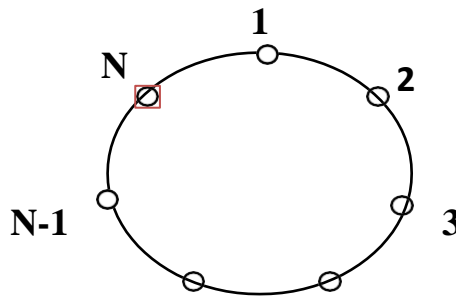


Figure II.1: Boucle fermée de N spins

On peut donc calculer l'énergie interne U tout en déplaçant le long de la chaîne, On a:

$$U = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (\text{II.1})$$

Avec $S_1 = S_{N+1}$ dont l'équivalent est présenté comme suit:

$$U = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \frac{S_i + S_{i+1}}{2} \quad (\text{II.2})$$

Chaque spin indice i ne peut avoir que deux valeurs, $+1$ et -1 . Le système possède alors 2^N états différents.

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

La fonction de partition est présentée par les 2^N termes:

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \prod_i \exp\left(\beta\left(JS_i S_{i+1} + \frac{1}{2}B(S_i + S_{i+1})\right)\right) \quad (\text{II.3})$$

Que l'on peut formuler tel un produit de matrice T :

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} T(S_1, S_2) T(S_2, S_3) \dots T(S_N, S_1) \quad (\text{II.4})$$

Ou $T(S_1, S_2)$ est montrée par l'expression:

$$T(S_1, S_2) = \exp\left(\beta\left(JS_1 S_2 + \frac{1}{2}B(S_1 + S_2)\right)\right) \quad (\text{II.5})$$

Considérée comme une matrice 2×2 , sous l'appellation matrice de transfert, T et s'écrit par

$$T = \begin{pmatrix} \exp \beta(J + B) & \exp -\beta J \\ \exp -\beta J & \exp \beta(J - B) \end{pmatrix} \quad (\text{II.6})$$

C'est pourquoi nous exprimons la fonction de partition comme la trace de la matrice qui produit des N exemplaires de T , on peut obtenir alors :

$$Z = \text{Tr}(T^N) \quad (\text{II.7})$$

La matrice de transfert comporte deux valeurs propres dites (les éléments diagonaux) qui sont :

$$\lambda_{\pm} = \exp \beta J \left(\cosh \beta B \pm \sqrt{\sinh^2 \beta B + \exp(-4\beta J)} \right) \quad (\text{II.8})$$

Comme $\lambda_+ > \lambda_-$, la fonction de partition est dominée par le terme λ_+^N .

On note que pour un champ nul, la plus grande valeur propre se réduit à $2 \cosh(\beta J)$. Pour qu'on calcule la magnétisation par spin dans le système, cette relation est essentiellement utilisée:

$$m = \frac{M}{N} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right) = \frac{K_B T}{\lambda_+} \frac{\partial \lambda_+}{\partial B} \quad (\text{II.9})$$

$$m = \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{\sinh^2(\beta B) + \exp(-4\beta J)}} \quad (\text{II.10})$$

Pour qu'on produise une magnétisation à température finie, il est obligatoire d'avoir un champ B non nul cela pose évidemment qu'il n'existe pas une transition de phase sous une seule dimension.

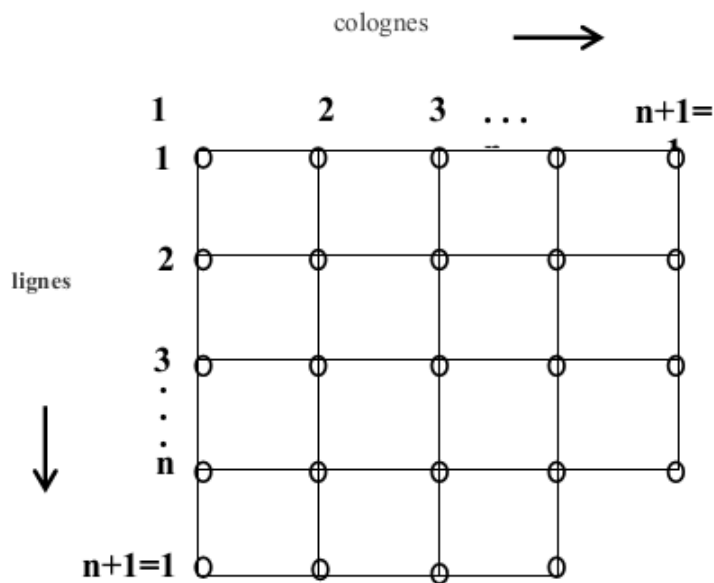
CHAPITRE II : MODELE D'ISING ET MODELE DE TYPE-ISING POUR LA CONVERSION DE SPIN

II.3. Modèle d'Ising en 2D

On considère un système de $N = L^2$ spins sur un réseau carré où L présente le nombre de sites de réseau dans chaque direction. Chaque spin S_i ne peut avoir que deux valeurs possibles $S_i = +1$ (HS) et $S_i = -1$ (BS). Chaque spin n'interagit qu'avec ses 4 voisins les plus proches et pareillement avec un champ magnétique B . L'Hamiltonien du système s'écrit sous la forme suivante [3]:

$$H_{Is} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (\text{II.11})$$

Où la somme s'effectue sur les paires de spins les plus proches $\langle i, j \rangle$ avec J la constante de couplage entre ses paires de spins voisins. Si $J > 0$, l'interaction demeure ferromagnétique et si $J < 0$ l'interaction est vue comme antiferromagnétique (FigureII.2).



FigureII.2: Représentation du Model d'Ising en deux dimensions

II.3.1 Approximation de champ moyen de Weiss

À l'intérieur du modèle d'Ising, chaque spin interagit à la fois avec le champ magnétique externe et avec celui créé par les spins voisins. Le champ magnétique créé par les spins est évidemment une variable dynamique. L'approximation du champ moyen vise à remplacer le champ magnétique créé par les spins par sa moyenne

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

thermique [1, 29]. Cette substitution conduit à une interaction entre tous les spins, de sorte que la solution du champ moyen est principalement équivalente pour résoudre le modèle dans la limite de D dimensions. Pour un réseau infini, la solution du champ moyen reste exacte. Bien que cette limite puisse sembler artificielle et éloignée des caractéristiques physiques réelles des aimants, on constate néanmoins que la solution du champ moyen est capable de capturer les principales propriétés de transition de phase dans le modèle d'Ising de manière simple et suffisamment précise [33,34,35].

Soit l'Hamiltonien:

$$H_{Is} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (\text{II.12})$$

Et on a:

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N S_i \right\rangle \quad (\text{II.13})$$

Le produit des spins est présenté comme suit :

$$\begin{aligned} S_i S_j &= (S_i - m + m)(S_j - m + m) \\ &= m^2 + m(S_i - m) + m(S_j - m) + (S_i - m)(S_j - m) \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

L'approximation du champ moyen a donc pour fonction de négliger le terme $(S_i - m)(S_j - m)$ complètement, on fait remplacer le précédent Hamiltonien par:

$$H_{Is} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i \cong -J \sum_{\langle i,j \rangle} [-m^2 + m(S_i + S_j)] - B \sum_i S_i \quad (\text{II.15})$$

Le premier terme s'exprime par :

$$-\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (-m^2) = \frac{1}{2} J q m^2 \sum_i = \frac{1}{2} J N q m^2 \quad (\text{II.16})$$

Ou

$$-\frac{J}{2} m \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j) = -J q m \sum_i S_i \quad (\text{II.17})$$

Où q présentes le nombre de coordination du réseau, proprement dit le nombre de voisins q :

$$H_{cm} = N \frac{Jq}{2} m^2 - (Jqm + B) \sum_i S_i \quad (\text{II.18})$$

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

On peut donner la fonction de partition comme suit:

$$\begin{aligned} Z_N^{cm} &= \sum_{\{S\}} e^{-\beta H_{cm}} = e^{-\frac{1}{2}N J q m^2} \left(\sum_{S=\pm 1} e^{(J q m + B) S} \right)^N \\ &= e^{\frac{1}{2}N J q m^2} [2 \cosh(J m + B)]^N \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

L'énergie libre par spin se présente sous :

$$F^{cm} = -\frac{1}{N} K_B T \ln Z_{cm} = \frac{1}{2} J q m^2 - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(J m + B)] \quad (\text{II.20})$$

Et l'aimantation moyenne par spin :

$$m = -\frac{\partial F}{\partial B} = \tanh(J q m + B) \quad (\text{II.21})$$

On place à $B=0$ l'aimantation va devenir:

$$m = \tanh(J q m) \quad (\text{II.22})$$

Généralement, on résout graphiquement cette fonction: on est à la recherche de l'intersection de deux courbes $y_1 = m$ et $y_2 = \tanh J q m$ pour une valeur de T donnée, il existe deux intersections symétriques $\pm m$ (**Figure II.3**), la résolution fournit l'expression de l'aimantation en fonction de la température met en évidence que $m = 0$, $T < T_c$ avec $T_c = \frac{J q}{K_B}$.

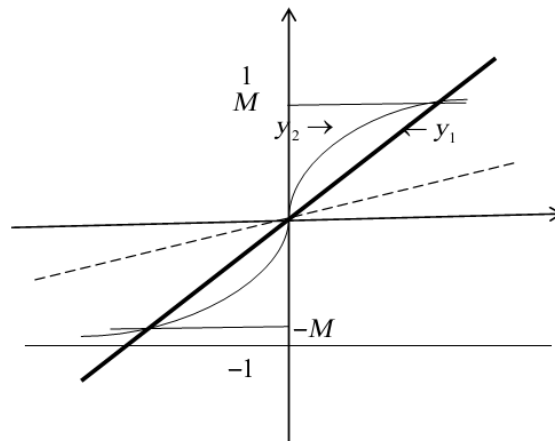


Figure II.3: Solution graphique de l'équation II.22

D'une autre part on a : $\tanh x = x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \dots$, ce qui donne :

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

$$m_0 = \beta J q m_0 - \frac{1}{3} (\beta J q)^3 m_0^3 \quad (\text{II.23})$$

Et si on s'arrête au troisième ordre, on peut obtenir :

$$m_0(T) = \pm \sqrt{3} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^{1/2} \quad (\text{II.24})$$

$$m_0(T) \cong (T_c - T)^{1/2}$$

Nous pouvons également calculer la susceptibilité magnétique dans cette approximation de champ moyen. La susceptibilité par spin reste sous la forme suivante :

$$\chi(B, T) = \left(\frac{\partial m}{\partial B} \right)_T = \frac{1 - m_0(T)^2}{K_B \left(T - [1 - m_0(T)^2] T_c \right)} \quad (\text{II.25})$$

En particulier, comme $m_0(T) = 0$ pour $T > T_c$, la susceptibilité se simplifie :

$$\chi(T) = \frac{1}{K_B (T - T_c)} \quad (\text{II.26})$$

Et ce pour $T > T_c$ (loi de Curie).

II.3.1 Solution d'Onsager

Onsager a obtenu la solution exacte a $d=2$ quand le champ magnétique est nul ($B=0$). Sur un réseau carrée, le modèle d'Ising présente une transition de phase en

$$T_c = \frac{2J}{K_B \ln(1 + \sqrt{2})} \approx \frac{2.269J}{K_B} \quad (\text{II.27})$$

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

$$m \sim (T_c - T)^\beta \quad (\text{II.28})$$

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

La susceptibilité magnétique χ diverge en T_c . On a :

$$\chi(0, T) \cong |T_c - T|^{-\gamma} \quad (\text{II.29})$$

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

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

$$c_h \cong -\ln|T_c - T| \quad (\text{II.30})$$

Cependant l'énergie interne est continue en T_c ce qui signifie qu'il n'y a pas de chaleur latente.

On assiste donc bien à une transition du second ordre.

II.4. Modèle de type-Ising

II.4.1 Définition du modèle de type -Ising

Le modèle de type Ising se base sur l'étude de la conversion de spin dans les matériaux dits moléculaires, ces matériaux restent des bistables moléculaires. Les molécules à conversion de spin possèdent donc deux états de spin possibles, Haut Spin (*HS*) et Bas Spin (*BS*). Le fait de passer d'un état de spin vers un autre état est possible par divers excitateurs extérieurs: la température, le champ magnétique et électrique, la pression, la lumière, etc...

D'un point de vue historique, le premier modèle de type Ising a été proposé par Wajnflasz et Pick [6].

II.4.2 Modèle de type Ising simple

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

$$H = \sum_i H_i = \frac{\Delta}{2} \sum_i S_i - J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (\text{II.31})$$

Où les deux valeurs $S = \pm 1$ sont associés aux états *HS* et *BS* respectivement, Δ est l'énergie du champ de ligand agissant sur la molécule isolée et J la force des interactions. La première somme parcourt les N molécules du système et la deuxième somme sur les paires $\langle i, j \rangle$, parcourt toutes les paires de proches voisines dans le réseau.

Généralement on prend $\Delta > 0$. Si $J > 0$ le modèle est dit ferromagnétique, si $J < 0$, antiferromagnétique. On appellera $M = \sum_i S_i$ sa magnétisation. Noter que J et Δ

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

ont la dimension d'une énergie.

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

$$H_i = \frac{\Delta}{2} S_i + J S_i \langle S \rangle \quad (\text{II.32})$$

Soit :

$$H = \sum_i H_i = \sum_i \frac{\Delta}{2} S_i + \sum_i J S_i \langle S \rangle \quad (\text{II.33})$$

H_i a comme valeurs propres:

$$\langle S \rangle = \frac{\left[-1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-\beta(\Delta+2J\langle S \rangle)} \right]}{\left[1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-\beta(\Delta+2J\langle S \rangle)} \right]} \quad (\text{II.34})$$

La fonction de partition de cet Hamiltonien dans l'ensemble canonique, en tenant compte des dégénérescences g_{HS} pour l'état $S = +1$ et g_{BS} pour l'état $S = -1$, s écrit:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_i e^{-\beta E_i} = \prod_i Z_i \quad (\text{II.35})$$

Avec Z_i la fonction de partition de la molécule i , ici:

$$Z_i = g_{HS} e^{-\beta\left(-\frac{\Delta}{2} - \sum j\langle S \rangle\right)} + g_{BS} e^{-\beta\left(+\frac{\Delta}{2} + \sum j\langle S \rangle\right)} \quad (\text{II.36})$$

On a considéré que le système contient N molécules identiques, d'où:

$$Z = \prod_{i=1}^N Z_i = (Z_i)^N \quad (\text{II.37})$$

La valeur moyenne de l'aimantation est présentée par:

$$\langle S \rangle = \text{Tr}(\rho S) = \text{Tr} \frac{S e^{-\beta H}}{Z} = \frac{\sum S e^{-\beta H}}{Z} \quad (\text{II.38})$$

D'où

$$\langle S \rangle = \frac{\left[-g_{HS} e^{-\beta\left(-\frac{\Delta}{2} - j\langle S \rangle\right)} + g_{BS} e^{-\beta\left(+\frac{\Delta}{2} + j\langle S \rangle\right)} \right] (Z_i)^{N-1}}{(Z_i)^N} \quad (\text{II.39})$$

Donc

$$\langle S \rangle = \frac{\left[-1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-\beta(\Delta+2J\langle S \rangle)} \right]}{\left[1 + \frac{g_{HS}}{g_{BS}} e^{-\beta(\Delta+2J\langle S \rangle)} \right]} \quad (\text{II.40})$$

Où

$$\rho = \frac{e^{-\beta B}}{Z} \quad (\text{II.41})$$

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

Est la matrice densité.

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

$$n_{HS} = \frac{1}{2}(1 + \langle S \rangle) \quad (\text{II.42})$$

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

$$\langle S(T_{1/2}) \rangle = 0 \quad (\text{II.43})$$

D'où on obtient:

$$\Delta = K_B T_{1/2} \log \left(\frac{g_{HS}}{g_{BS}} \right) \quad (\text{II.44})$$

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

CHAPITRE III

**DYNAMIQUE DE METROPOLIS
ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS
DE SWENDSEN-WANG**

III.1 Définition de la simulation

III.1.1 Principe de simulation

Dans le présent chapitre de ce modeste travail, les moyennes dites thermodynamiques qui sont déterminées numériquement ont été calculées par le biais des méthodes Monte Carlo (MC). Le principe de ces méthodes est rappelé ici. Une fois que la modélisation des interactions d'un système est décrite par un Hamiltonien H , il convient donc de déterminer les propriétés statistiques de ce modèle et d'en déduire les propriétés thermodynamiques. On considère par exemple, un système d'Ising dont les N degrés de liberté S_i , $i = 1, \dots, N$ sont disposés sur un réseau, la moyenne thermique $\langle A \rangle$ d'une observable A associée à une quantité physique, s'écrit à l'équilibre thermodynamique sous la forme :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} A(\{S_i\}) e^{-\beta H(\{S_i\})} \quad (\text{III.1})$$

Z associée à chaque micro état, est la fonction de partition dans l'ensemble canonique et correspond à la somme de tous les poids de Boltzmann [36] :

$$Z(\beta) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H(\{S_i\})} \quad (\text{III.2})$$

Le calcul de la fonction de partition Z permet l'accès à toutes les fonctions thermodynamiques pertinentes pour l'étude du système. Le problème existe dans le calcul de la somme (III.2). En effet, on connaît très peu de système en interaction dont l'expression de la fonction de partition est connue au niveau analytique. Numériquement, le calcul de la somme ne peut se faire d'une manière directe et exacte. En effet, si à titre d'exemple, les degrés de liberté sont des spins de type Ising ($S_i = \pm 1$), le nombre de configurations accessible pour le système est 2^N . Dans le cas d'un système relativement petit ($N = 100$) par rapport à des systèmes réels, le nombre de micro états est $2^{100} \cong 10^{30}$. En supposant pour simplifier que l'on peut déterminer une configuration de spin tous les $10^{-9}s$, le temps nécessaire pour échantillonner toutes les configurations est de l'ordre de $10^{21}s$, ce qui est beaucoup plus important que la durée d'une vie. Le calcul des moyennes thermodynamiques ne

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

peut donc être réalisée de cette manière. Une autre approche doit être suivie, c'est la technique de Monte Carlo avec un algorithme d'échantillonnage d'importance [37,38].

III.1.2 Bref histoire de simulation de Monte carlo

La technique de simulation de Monte Carlo constitue l'un des outils informatiques utilisés pour l'étude des comportements des systèmes dits complexes de la vie réelle et leur développement avec le temps. Cette technique a été introduite pour la première fois dans un article coécrit avec Stanislaw Ulam en 1949[39], cette méthode numérique prend une place assez importante que la théorie et l'expérience dans divers domaines: biologie, statistiques, sciences des matériaux, finances, chimie et physique... Cette technique en question demeure très importante pour l'étude des phénomènes critiques et les transitions de phase.

Nous souhaitons en premier lieu mettre en lumière la méthode Monte Carlo puis nous mettons l'accent sur quelques concepts en ce qui concerne les algorithmes d'échantillonnages le plus connu qui est l'algorithme de Metropolis (Metropolis et al., 1953) [39,40,41].

III.2 Introduction de l'estimateur-échantillonnage de l'espace des phases

III.2.1 L'estimateur des moyennes thermodynamiques

La méthode Monte Carlo s'est donnée pour mission de choisir un échantillon comportant les états dominants. On appellera donc cette opération l'échantillon important [2]. L'idée se repose sur le remplacement de l'expression de $\langle A \rangle$ par un estimateur $\langle A \rangle_M$ qui présente une somme finie dans l'espace des phases, on choisit d'une manière aléatoire un nombre fini M de micro-états $\{s\}_{i=1,\dots,M}$ à partir d'une distribution de probabilité P_s . L'estimateur de la moyenne de l'observable A se présente comme suit :

$$\langle A \rangle \cong \langle A \rangle_M = \frac{\sum_{s=1}^M A_s P_s^{-1} e^{-\beta H(s)}}{\sum_{s=1}^M P_s^{-1} e^{-\beta H(s)}} \quad \text{(III.3)}$$

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

Le facteur P_s à l'itération i compense le fait que les états avec les probabilités les plus importantes vont être sélectionnés un plus grand nombre de fois que les autres pendant la simulation si ces états sont échantillonnés d'une façon uniforme.

III.2.2 L'échantillonnage aléatoire et son importance

Si on prend la même probabilité $P_s = P$ pour toutes les configurations, l'échantillonnage reste uniforme, on a donc:

$$\langle A \rangle_M = \frac{\sum_{s=1}^M A_s e^{-\beta H(s)}}{\sum_{s=1}^M e^{-\beta H(s)}} \quad (\text{III.4})$$

Ce choix est particulièrement adapté pour des moyennes thermiques qui sont réalisées avec des distributions de probabilité qui ne présentent pas de valeurs significatives pour un petit nombre de configurations et des valeurs proches de zéro pour une majorité de configurations. Si le nombre des états M d'échantillons augmente, $\langle A \rangle_M$ devient une estimation plus précise de $\langle A \rangle$, et lorsque $M \rightarrow \infty$ nous avons $\langle A \rangle_M = \langle A \rangle$.

L'opération de choisir un échantillon contenant les états dominants est connue sous le nom de l'échantillon important [37,42,43]. Les états de l'échantillon ne sont pas équiprobables, mais distribués selon la distribution de probabilité de Boltzmann figurée dans l'équation (III.4) qui permet l'amélioration de l'estimation. A cet égard, l'estimation se présente comme suit [28]

$$\langle A \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{s=1}^M A_s \quad (\text{III.5})$$

Le calcul des fonctions thermodynamiques peut être réalisé tout en évitant le calcul de la fonction de partition Z et en ne considérant qu'un seul échantillon qui représente des configurations de plus forts poids de Boltzmann. On réalise donc une marche dirigée dans l'espace des phases de telle manière que chaque état du système apparaisse avec une probabilité égale à son poids de Boltzmann.

III.2.3 Chaîne de Markov pour échantillonner le système à l'équilibre

III.2.3.1 Equation Maitresse

Dans la physique statistique on s'intéresse le plus souvent au calcul de la moyenne thermique d'une grandeur, qui n'est pas calculable directement par la fonction de partition, solliciter ce problème c'est donc générer toute une chaîne de configurations

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

successives, qui converge vers la distribution d'équilibre P_{eq} , cette mécanique est connue par le processus de Markov et signifie que la transition du système de la configuration i à une autre configuration j est donc possible avec une probabilité de transition $W(i \rightarrow j)$ à laquelle il faut qu'il ait deux conditions nécessaires :

- Ne pas varier avec le temps.
- Dépendre d'une manière unique des propriétés du système sur les états a et b .

Ceci traduit par :

$$\sum_b W(i \rightarrow j) = 1 \quad \text{(III.6)}$$

$W(i \rightarrow i)$ n'est pas obligatoirement nul.

L'équation d'évolution du système est donc présentée par l'équation maitresse suivante [38]:

$$\frac{dP_i}{dt} = -\sum_i W(i \rightarrow j)P_i + \sum_j W(j \rightarrow i)P_j \quad \text{(III.7)}$$

Avec cette procédure, la simulation produise une succession de configurations avec la distribution d'équilibre de Boltzmann. Pour atteindre notre objectif, il est légitime d'imposer deux nouvelles conditions au processus de Markov, précisément l'ergodicité et la balance détaillée.

➤ Ergodicité

La condition d'ergodicité est que le système peut, à partir d'un état précis, assumer tout état possible après un temps long durant le processus de Markov. La condition d'ergodicité n'est pas satisfaite si toutes les probabilités de transition d'un état donné demeurent nulles.

➤ Balance détaillée

Si le système est en équilibre, autrement dit $dP_{eq}/dt = 0$, les taux de transition à partir d'un état et vers le même état sont égaux . On mentionne alors:

$$\sum_i W(i \rightarrow j)P_i = \sum_j W(j \rightarrow i)P_j \quad \text{(III.8)}$$

On applique une condition supplémentaire à nos probabilités de transition qui assure que la distribution de probabilité de Boltzmann :

$$W(i \rightarrow j)P_i = W(j \rightarrow i)P_j \quad \text{(III.9)}$$

C'est la condition de la balance détaillée.

III.2.3.2 Taux d'acceptation

L'équation (III.9) est plus célèbre sous la nomination de taux d'acceptation et sous cette forme [40,42]:

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{P_j}{P_i} = e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad \text{(III.10)}$$

Il y a un nombre infini de taux de transition qui a pour fonction de vérifier l'expression de taux d'acceptation. On décompose le taux de transition en deux parties essentielles :

$$W(i \rightarrow j) = \alpha(i \rightarrow j) \pi(i \rightarrow j) \quad \text{(III.11)}$$

Où $\alpha(i \rightarrow j)$ est la probabilité de "sélection" : à partir de la configuration $\{i\}$, on tire au hasard une configuration $\{j\}$; cette nouvelle configuration est acceptée avec la probabilité d'acceptante [44] $\pi(i \rightarrow j)$. L'équation devient :

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{\alpha(i \rightarrow j) \pi(i \rightarrow j)}{\alpha(j \rightarrow i) \pi(j \rightarrow i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad \text{(III.12)}$$

Parmi les choix de probabilité de sélection $\alpha(i \rightarrow j)$, on s'intéresse à celui qui mène à la dynamique de Monte Carlo le plus important qu'est présentée dans ce chapitre.

III.3 Algorithmes de simulation

III.3.1 Algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis reste l'une des plus efficaces et simples solutions concernant les problèmes de simulation en transition de phase [2,35]

Pour qu'on obtienne des solutions des équations ou, en d'autres termes d'obtenir le taux de transition $W(i \rightarrow j)$, notons que le processus stochastique élémentaire dans un algorithme Monte Carlo sera la succession de deux étapes :

- 1) A partir d'une configuration i , on tire au hasard une configuration j , avec une probabilité $\alpha(i \rightarrow j)$.
- 2) Cette nouvelle configuration est acceptée avec une probabilité $\pi(i \rightarrow j)$.

Dans l'algorithme original de Metropolis (et dans la plupart des algorithmes Monte Carlo), on choisit $\alpha(i \rightarrow j) = \alpha(j \rightarrow i)$. Dans ce cas, l'équation (III.12) se réexprime comme :

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

$$\frac{\pi(i \rightarrow j)}{\pi(j \rightarrow i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad (\text{III.13})$$

La solution choisie par Metropolis et *al.* est :

$$\pi(i \rightarrow j) = \begin{cases} e^{-\beta(E_j - E_i)} & \text{si } E_i < E_j \\ 1 & \text{si } E_i > E_j \end{cases} \quad (\text{III.14})$$

Comme nous allons le voir, cette solution est assez efficace et simple à mettre en œuvre.

Pratiquement, la mise en place de l'algorithme de Metropolis est le suivant. Une itération ou pas Monte Carlo dépend donc aux différentes phases suivantes:[39,38,45]

- (1) On choisit un site i au hasard parmi les N possibilités.
- (2) Réorienter le site choisi i d'une façon aléatoire vers une nouvelle orientation j parmi les voisins.
- (3) Nous calculons la différence d'énergie $\Delta E = E_j - E_i$ entre la nouvelle configuration avec un spin retourné et la configuration de départ.
- (4) Si $\Delta E < 0$ la nouvelle configuration est donc acceptée.
- (5) Si $\Delta E > 0$, on génère alors un nombre aléatoire ζ tel que $\zeta \in [0,1]$.
- (6) Si $\zeta < \exp(-\beta\Delta E)$ la nouvelle configuration est acceptée, sinon l'ancienne configuration est conservée.
- (7) On calcule ces grandeurs : aimantation par spin, susceptibilité par spin.
- (8) On tire par la suite un nouveau site d'une manière hasardeuse et on recommence la procédure. Pratiquement l'algorithme de Métropolies est connu sous la forme suivante [42] (**Figure III.1**)

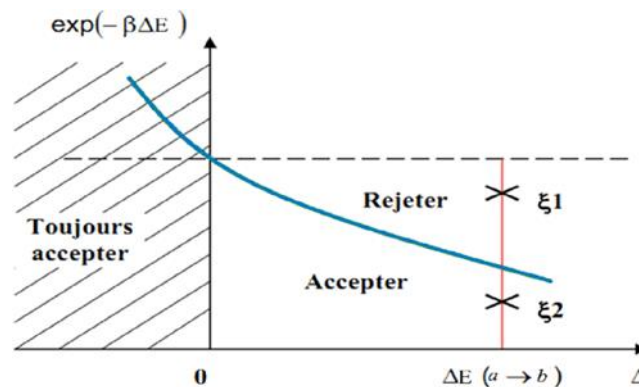


Figure III.1 : Critère d'acceptation de la méthode de Metropolis

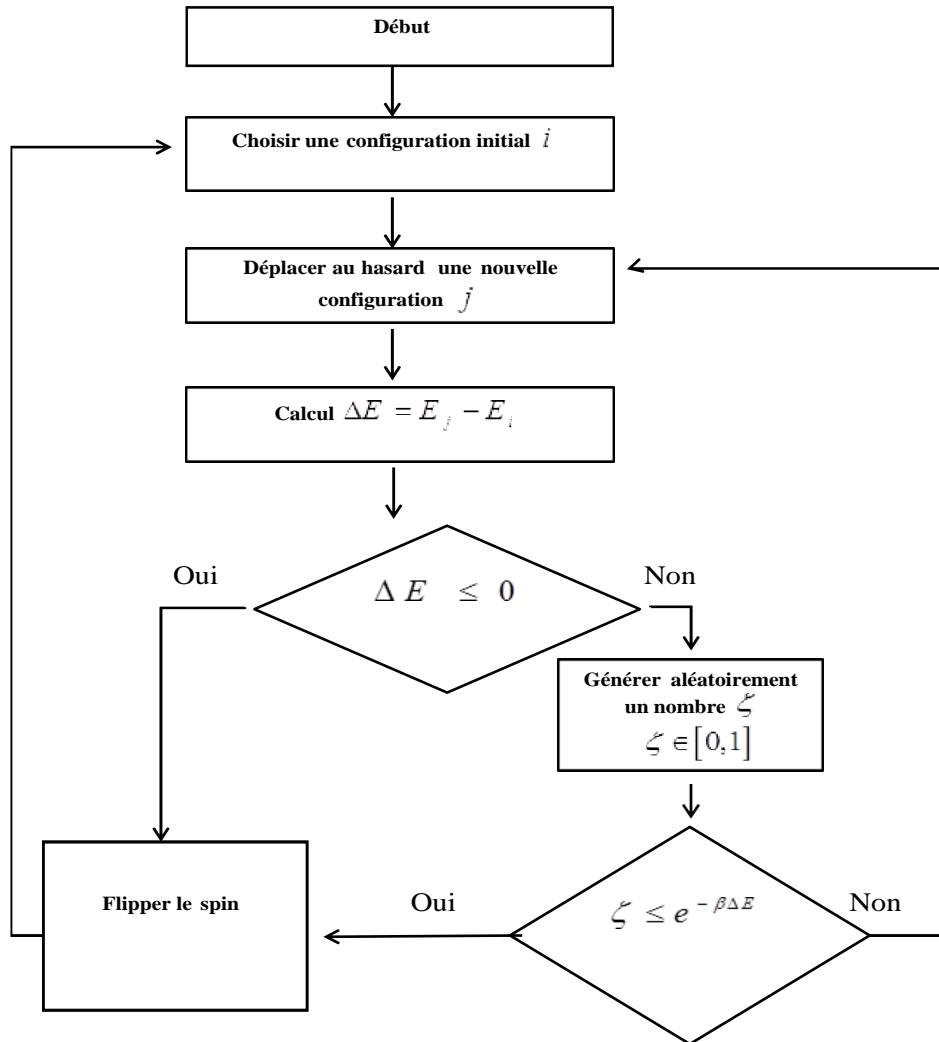


Figure III.2: Organigramme d'un programme Monte Carlo.

III.3.1.1 Moyenne thermique à l'équilibre thermodynamique

Pour commencer le calcul d'une moyenne, il est préférable de laisser le système atteindre son équilibre. Généralement, dans la simulation Monte Carlo, on distingue deux périodes essentielles [47]:

- **Thermaliser le système:** cette période se repose sur un nombre de steps N_1 d'équilibre pour que le système atteigne l'équilibre thermodynamique.

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

- **Moyenner les grandeurs physiques:** cette phase se repose sur un nombre N_2 steps beaucoup plus important et grand que N_1 , le programme fait la sommation sur toutes les configurations visitées par la simulation à chaque itération ou temps Monte Carlo (**MCS** : Monte Carlo steps en Anglais) avant de commencer à prendre des statistiques.

➤ L'aimantation

Une quantité d'intérêt naturel dans le contexte d'un modèle magnétique est donc la magnétisation, qui représente le paramètre d'ordre de la transition de phase se produisant à une température $T_c > 0$. On note par M la magnétisation total du système et par m la quantité normalisée en taille correspondante.

$$M = \sum_{i=1}^N S_i \quad m = \frac{M}{N} \quad (\text{III.15})$$

➤ Chaleur spécifique

Les dérivées thermodynamiques donnent une interprétation microscopique aux grandeurs thermodynamiques associées, L'énergie interne ainsi que la chaleur spécifique sont présentées par les relations suivantes [47,48]:

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \quad \text{ou} \quad \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{\beta E_i} = \frac{-1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (\text{III.16})$$

Et comme il n'y a pas de bonne manière pour qu'on calcule une dérivée de la fonction de partition, on peut noter la chaleur spécifique en termes de moyenne de l'énergie comme suit [47]:

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\frac{\beta}{T} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \frac{\beta}{T} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \\ &= \frac{\beta}{T} \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right] = \frac{\beta}{T} \left[\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{III.17})$$

➤ La susceptibilité magnétique

La susceptibilité magnétique, peut être présentée en termes de la dérivée de la moyenne de la magnétisation [49,50,51]:

$$\chi = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial B} \quad (\text{III.18})$$

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

L'énergie dans l'équation se présente comme suit, $E = E_0 - BM$, on a :

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s m e^{-(E_0 - BM)/T}, \quad Z = \sum_s e^{-(E_0 - BM)/T} \quad (\text{III.19})$$

La susceptibilité devient :

$$\chi = -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B} \sum_s m e^{-(E - BM)/T} + \frac{1}{Z} \frac{1}{T} \sum_s m M e^{-(E - BM)/T} \quad (\text{III.20})$$

Avec

$$\frac{\partial Z}{\partial B} = \frac{1}{T} \sum_s M e^{-(E - BM)/T} \quad (\text{III.21})$$

On obtient

$$\chi = \frac{1}{T} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) \quad (\text{III.22})$$

III.3.2 Algorithme de Swendsen-Wang

Dans le domaine des simulations Monte Carlo sur les systèmes de spins au point critique, les algorithmes classiques utilisent des règles d'itérations dites locales (comme celui de Métropolis) souffrent d'inconvénients majeurs liées au ralentissement critique qui interdisent leur emploi pour des simulations intensives sur des systèmes de grande taille en raison de contraintes de temps de calcul, l'idée pour résoudre ce problème a été proposée pour la première fois par Swendsen et Wang (1987) [51,52] puis par U. Wolff en 1989 [2,38,39] L'algorithme de Wolff est un algorithme de cluster (où algorithme d'amas), son idée se base sur le retournement de tout le domaine de spin au lieu d'un seul spin (algorithme Metropolis). Dans algorithme de Swendsen et Wang, on construit les clusters ont lié les spins voisins, dans le même état, avec la probabilité $P_{add} = 1 - e^{-2J}$

Mais au lieu de retourner un seul cluster comme dans le cas de l'algorithme de Wolf, on retourne donc tous les clusters, chacun avec la probabilité $\frac{1}{2}$ [7]. Cette dynamique capable de réduire le ralentissement critique de manière significative [42,44]

Un cluster est construit comme suit: on choisir un spin de départ initial d'une manière hasardeuse et on regarde ses spins voisins. Ceux qui ont le même signe que le spin sélectionné sont ajoutés au cluster avec une probabilité P_{add} , alors ceux qu'ils

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

sont exclus du cluster avec la probabilité $1 - P_{add}$. La probabilité et la condition de balance détaillé sont présentées par :

$$\frac{\alpha(a \rightarrow b)\pi(a \rightarrow b)}{\alpha(b \rightarrow a)\pi(b \rightarrow a)} = (1 - P_{add})^{m-n} \frac{\pi(a \rightarrow b)}{\pi(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{III.23})$$

Où m présente le nombre de liaisons connectées, et n présente le nombre de liaisons non connectées, $\pi(a \rightarrow b)$ et $\pi(b \rightarrow a)$ sont les taux d'acceptation dans les deux directions et $E_b - E_a = 2J(m - n)$.

Et pour

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J} \quad (\text{III.24})$$

On a:

$$\frac{\pi(a \rightarrow b)}{\pi(b \rightarrow a)} = \left[e^{2\beta J} (1 - P_{add}) \right]^{n-m} \quad (\text{III.25})$$

Ici, on met l'accent sur les détails de l'algorithme Swendsen-Wang.[7,2] voir **(Figure III.3)** pour un schéma représentatif de l'implémentation de cet algorithme, il faut:

- (1) Choisir le spin de départ.
- (2) On visite les sites voisins du site choisi. Si on trouve un site qui a le même état que le spin choisi, on l'ajoute au cluster avec la probabilité P_{add} (i.e placer une liaison entre les deux sites)
- (3) Choisir le spin suivant et passer à (2) jusqu'à ce que toutes les liaisons aient été considérées.
- (4) Appliquer l'algorithme Hoshen–Kopelman pour identifier tous les clusters.
- (5) Choisir un cluster.
- (6) Générer un nombre aléatoire R : $0 < R_i < 1$
- (7) Si la probabilité de retourner le cluster est supérieure que R on accepte la nouvelle configuration du cluster.
- (8) Choisir un autre cluster et passer à (5).
- (9) Lorsque toutes les clusters ont été prises en considération, passer à (1).

CHAPITRE III: DYNAMIQUE DE METROPOLIS ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

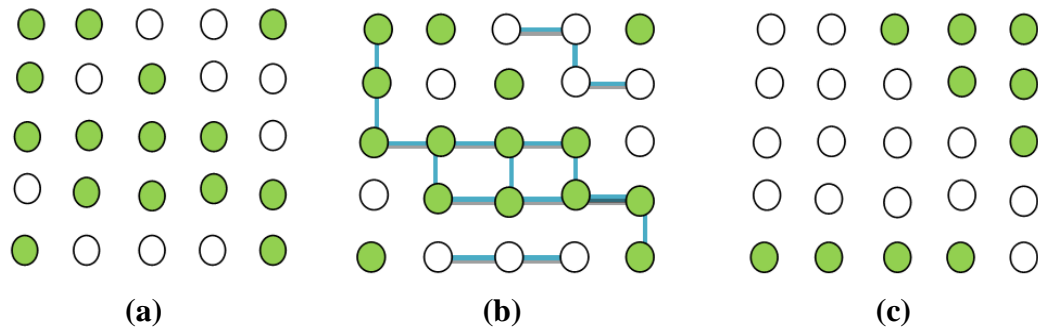


Figure III.3: Représentation schématique de l'algorithme de Swendsen-Wang pour un modèle Ising : (a) Configuration de spin originale
(b) Clusters
(c) Clusters orientées

CHAPITRE IV

RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

IV. 1 Caractéristiques générales des systèmes simulés

Les systèmes de type Ising que nous avons simulé sont composés de réseaux carrés de taille $L \times L$ ($d = 2$) où les simulations sont faites pour deux phases initiales différentes : haute spin (HS) et basse spin (BS). Les interactions entre les spins sont de nature ferromagnétique et se limitent aux voisins les plus proches (nombre de $ppv = 2d$). Les conditions aux limites sont périodiques et le système d'unité est tel que $K_B = J = 1$.

Dans nos simulations, nous avons comparé les résultats obtenus par deux dynamiques différentes: de Métropolis et des clusters de Swendsen-Wang (SW).

Les résultats des mesures pour la fraction de molécules en HS, n_{HS} , dans le cas des systèmes avec des interactions modérées (conversion réversible) et fortes (transition avec hystérésis), sont présentés dans les figures suivantes (**Figure IV.1**).

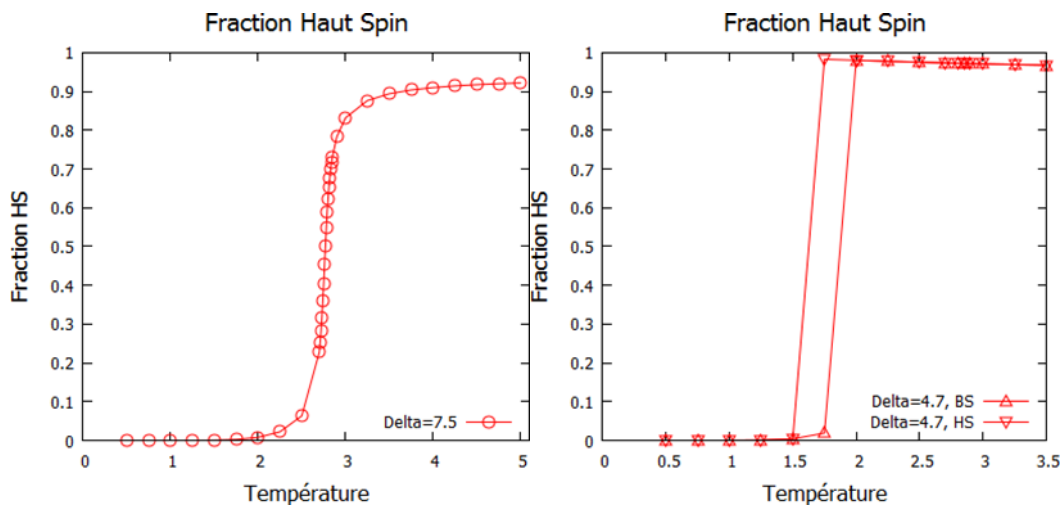


Figure IV.1: Représentation de la fraction des molécules en HS, n_{HS} , en fonction de la température pour des systèmes faiblement ($\Delta = 7.5$) et fortement ($\Delta = 4.7$) coopératifs. Les résultats de mesure sont obtenus par la dynamique de Métropolis.

Les résultats des mesures sur les systèmes avec des interactions modérées, qui sont initialement en phase BS, sont généralement identiques à ceux obtenus sur ceux initialement en phase HS dans les deux dynamiques de simulation.

En ce qui concerne les systèmes avec des interactions fortes (conversion avec hystérésis), nous avons utilisé uniquement la dynamique de Métropolis pour obtenir

CHAPITRE IV: RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

les résultats de mesure sur la fraction des molécules en HS, n_{HS} , pour les deux phases initiales BS et HS.

IV. 2 Résultats des simulations sur la Capacité Calorifique

Nous avons mesuré la capacité calorifique C_v dans les deux dynamiques MC pour des interactions modérées et fortes.

Les résultats de mesure dans le cas des interactions modérées, montrent que plus le système est large plus les résultats de mesure sont meilleurs et les deux dynamiques donnent des résultats très proches aux basses températures, à la température critique le pic de la courbe est plus important dans le cas de la dynamique de Métropolis, passant cette température, la diminution de la courbe devient moins rapide dans le cas de la dynamique des clusters, ce qui mène les deux dynamiques à générer des valeurs de mesure différentes aux hautes températures (**Figure IV. 2**)

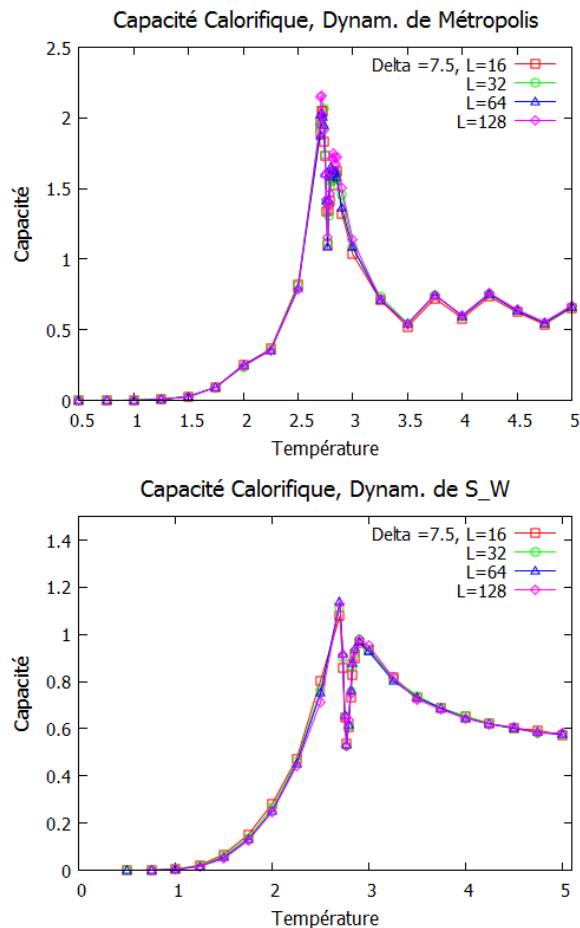


Figure IV. 2: Représentation de la capacité calorifique en fonction de la température dans le cas des interactions modérées ($\Delta = 7.5$) et des réseaux de taille $L = 16, 32, 64, 128$.

CHAPITRE IV: RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

Dans le cas des interactions fortes les résultats de mesure de C_v par la dynamique de Métropolis montrent que cette quantité est légèrement dépendante de la phase initiale du système à simulé, ceci est claire aux alentours de la température critique (**Figure IV.3**).

Dans ce même cas, les simulations par la dynamique des clusters montrent que les résultats de mesure sur cette quantité sont différents de ceux mesurés par la dynamique de Métropolis pour les systèmes de large taille (**Figure IV.4**). ces résultats deviennent erronés pour les systèmes de petites tailles, ce qui confirme une autre fois l'idée qui stipule que la dynamique des clusters et une dynamique des systèmes de grande taille.

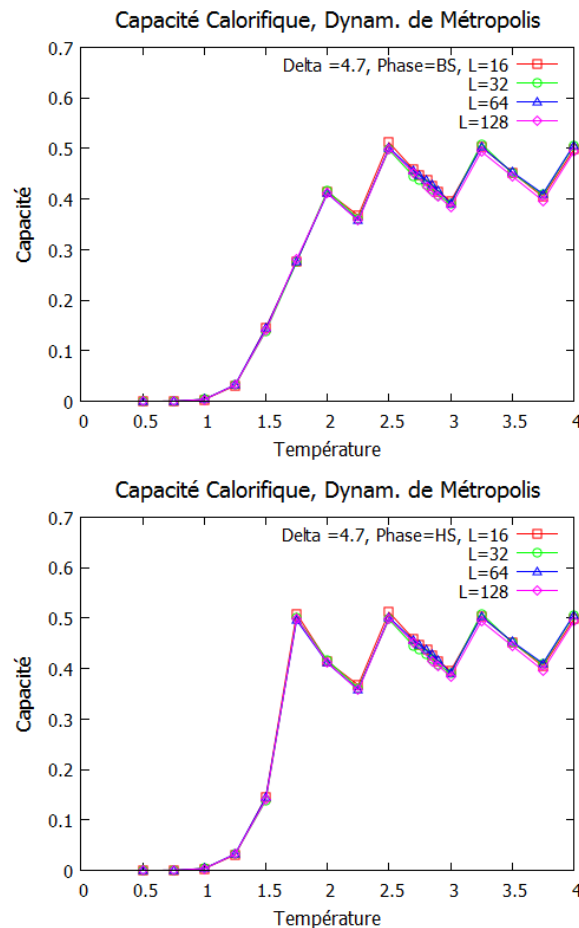


Figure IV.3: Représentation de la capacité calorifique en fonction de la température dans le cas des interactions fortes ($\Delta = 4.7$) et des réseaux carré de taille $L = 16, 32, 64, 128$ dans les phases initiales BS et HS dans le cas de la dynamique de Métropolis.

CHAPITRE IV: RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

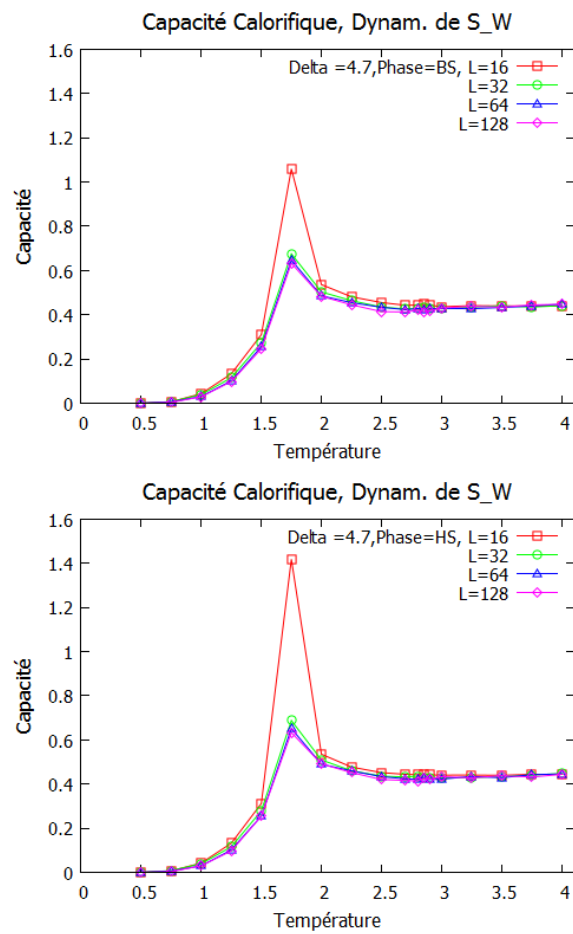


Figure IV.4: Représentation de la capacité calorifique en fonction de la température dans le cas des interactions fortes ($\Delta = 4.7$) et des réseaux carré de taille $L = 16, 32, 64, 128$ dans les phases initiales BS et HS dans le cas de la dynamique des clusters de S-W.

CONCLUSION

GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Dans ce mémoire nous avons étudiés la capacité calorifique d'un système à conversion de spin dans le cadre du modèle de type-Ising en 2D par les techniques MC via la dynamique des clusters de Swendsen-Wang, les résultats des simulations sont comparés avec ceux obtenus par la dynamique de Métropolis.

Nous avons effectué des simulations sur des réseaux carrés ($d=2$) avec des conditions périodiques aux bords et deux phases initiales différentes: haut spin (*HS*) et bas spin (*BS*). La phase initiale dans le processus de simulation n'a pas eu d'effet notable sur les résultats, sauf dans le cas des interactions fortes.

Les résultats de mesures sur la capacité calorifique dans le cas des interactions modérées montrent que la dynamique de Métropolis et des clusters de Swandsen-Wang donnent des résultats très proches aux basses températures, à la température critique le pique de la courbe est plus important dans le cas de la dynamique de Métropolis, passant cette température, la diminution de la courbe devient moins rapide dans le cas de la dynamique des clusters

Concernant les systèmes avec des interactions fortes, les simulations par la dynamique des clusters montrent que les résultats de mesure sur cette quantité sont partiellement différents de ceux mesurés par la dynamique de Métropolis pour les systèmes de large taille, ces résultats deviennent erronés pour les systèmes de petites tailles, ce qui confirme l'idée qui stipule que la dynamique des clusters et une dynamique des systèmes de large taille.

REFERENCES

- [1] J. Perez, G. Chardin, and P. Debu, “Éléments de physique statistique-2^{ème} édition.” 2015.
- [2] Z. Sanae, “Contributions to the Monte Carlo study of the magnetic properties of nanomaterials such as graphyne and graphone,” 2016, Université Mohammed V-Rabat
- [3] A. Tremblay, “La Physique Statistique ” 2020, Université de Sherbrooke.
- [4] H. T. Diep, “Physique statistique.” 2006, Ellipses.
- [5] M.S. Green, T. P. Domb, “Phase Transitions and Critical Phenomena” Academic Press London.
- [6] A. Metatla, W. Nicolazzi, H. Latelli, and A. Bousseksou, “Cluster approach to ferromagnetic Ising-type model for spin-crossover systems,” 2022, Chinese J. Phys.
- [7] F. Wende and T. Steinke, “Swendsen-wang multi-cluster algorithm for the 2D/3D Ising model on Xeon Phi and GPU,” 2013. ZIB-Report
- [8] L. Cambi, L. Szegö, Ber. Dtsch. Chem. Ges. 1931, 64, 259; L. Cambi, A. Cagnasso, Atti. Accad. Naz. Lincei 1931, 13, 809; L. Cambi, L. Szego, A. Cagnasso, Atti. Accad. Naz. Lincei 1932, 15, 266; L. Cambi, L. Szego, A. Cagnasso, Atti. Accad. Naz. Lincei 1932, 15, 329; L. Cambi, L. Malatesta, Ber. Dtsch. Chem. Ges. 1937, 70B, 2067.
- [9] A. H. Ewald, R. L. Martin, I. G. Ross, A. H. White, Proc. Roy. Soc. A. 1964, 280, 235.
- [10] R. C. Stoufer, D. W. Smith, E. A. Cleavenger, T. E. Norris, Inorg. Chem. 1966, 5, 1167; D. Gatteschi, C. A. Ghilardi, A. Orlandini, L. Sacconi, Inorg. Chem. 1978, 17, 3023; J. Zarembowitch, O. Kahn, Inorg. Chem. 1984, 23, 589; J. Zarembowitch, New J. Chem. 1992, 16, 255; J. Faus, M. Julve, F. Lloret, J.-A. Real, J. Sletten, Inorg. Chem. 1994, 33, 5535; K. Heinze, G. Huttner, L. Zsolnai, P. Schrober, Inorg. Chem. 1997, 36, 5457.
- [11] W. Kläui, Journal of the Chemical Society, Chemical Communications 1979, 700; P. Gülich, B. R. McGarvey, W. Kläui, Inorg. Chem. 1980, 19, 3704; W. Eberspach, E. El Murr, W. Kläui, Angew. Chem. Int. Ed. 1982, 21, 915; G. Navon, W. Kläui, Inorg. Chem. 1984, 23, 2722; W. Kläui, W. Eberspach, P. Gülich, Inorg. Chem. 1987, 26, 3977.
- [12] J. H. Ammeter, R. Bucher, N. Oswald, J. Am. Chem. Soc. 1974, 96, 7833; M. E. Switzer, R. Wang, M. F. Rettig, A. H. Maki, J. Am. Chem. Soc. 1974, 96, 7669; D. Cozack, F. Gauvin, Organomet. 1987, 6, 1912.
- [13] P. G. Sim, E. Sinn, J. Am. Chem. Soc. 1981, 103, 241; L. Kaustov, M. E. Tal, A. I. Shames, Z Gross, Inorg. Chem. 1997, 36, 3503

- [14] D. M. Halepoto, D. G. L. Holt, L. F. Larkworthy, G. J. Leigh, D. C. Povey, G. W. Smith, *J. Chem. Soc., Chem. Comm.* 1989, 1322; M. Sorai, Y. Yumoto, D. M. Halepoto, L. F. Larkworthy, *J. Phys. Chem. Solids* 1993, 54, 421.
- [15] H. Toftlund, *Coord. Chem. Rev.*, 1989, 94, 67.
- [16] P. Gülich, *Struct. Bond.* 1981, 44, 83.
- [17] J. S. Griffith, *Proc. Roy. Soc.* 1956, 235A, 23.
- [18] C. J. Ballhausen, A. D. Liehr, *J. Am. Chem. Soc.* 1959, 81, 538.
- [19] R. C. Stoufer, D. H. Bush, W. B. Hardley, *J. Am. Chem. Soc.* 1961, 83, 3732.
- [20] W. A. Baker, H. M. Bobonich, *Inorg. Chem.* 1964, 3, 1184.
- [21] A. Hauser, J. Jeftic, H. Romstedt, R. Hinek, H. Spiering, *Coord. Chem. Rev.* 1999, 190192, 471-491; M.A. Halcrow, *Chem. Commun.* 2013, 49, 10890-10892.
- [22] H. L. Schäfer, G. Gliemann, *Basic principles of ligand field theory*; Wiley-interscience ed; Wiley-interscience: London, 1969.
- [23] P. J. Van Koninghsruggen, Y. Garcia, E. Cadjovi, R. Lapouyade, O. Kahn, L. Fournes, L. J. Rabardel, *Mater. Chem.* 1997, 7, 2069.
- [24] E. König, G. Ritter, *Sol. State. Comm.* 1976, 18, 279.
- [25] D. Guéry-Odelin and C. Fabre, “Matrice densité” 2006.
- [26] Diep. Hung T, “Eléments de physique statistique.” 2006.
- [27] F. Schwabl, “Statistical Mechanics. ” 2006, Springer.
- [28] C. Texier, C., & Roux, G “Physique statistique - Des processus élémentaires aux phénomènes collectifs.” 2017, SCIENCES SUP.
- [29] S. Vauclair “Éléments de physique statistique” Université Paul Sabatier, Toulouse.
- [30] M. B. Gordon, “An Introduction to Statistical Mechanics” 2004 , Springer Berlin Heidelberg,
- [31] X. Cao, “Physique statistique des systèmes désordonnées en basses dimensions.” 2017, Université Paris-Saclay.
- [32] A.-M. Tremblay., “Physique Statistique I.”, 2020, Département Phys. Univ. Sherbrooke,.
- [33] N. Vandewalle , S. Dorbolo, “ Introduction à la Physique Statistique.”

- [34] É. Brunet, J. Beugnon, and É. Wandersman, “Cours de Physique Statistique.” 2015
- [35] R. K. Pathria , Paul D. Beale “Statistical Mechanics Third Edition” 2011, Elsevier,.
- [36] I. Agarwal, “Numerical Analysis of 2-D Ising Model,” 2011, University of Bonn.
- [37] W. Nicolazzi, “Modelisation des processus a l’équilibre et hors équilibre de matériaux a transition de spin ” 2008 Université Henri Poincare, Nancy-I.
- [38] P. Viot, “Simulation numérique en physique statistique ”2006, HAL.
- [39] T. Sahdane “Propriétés Magnétiques De Nanomatériaux : Etude Par La Méthode Monte Carlo.” 2017, Hal.
- [40] K. Binder, “Applications of Monte Carlo methods to statistical physics,” 1996, Rep. Prog. Phys.
- [41] اياد خليل سعيد البرغوثي، "محاكاة اثر الربط المتماثل في أنظمة الكوبالت المتعددة الطبقات باستخدام طريقة مونت كارلو". جامعة آل البيت.
- [42] M. Hayoun, “La Méthode De Monte Carlo Metropolis.” 2002, École “Simulation Numérique en Matière Condensée”.
- [43] P. Mathé and E. Novak, “Simple Monte Carlo and the Metropolis algorithm,”.2007, Journal of Complexity.
- [44] P. Berche and D. Ledue, “ Systèmes modèles et systèmes magnétiques : étude par simulations Monte Carlo.” 2009, Université de Rouen.
- [45] W. K. Hastings, “Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications” 2005, University of Toronto.
- [46] K. Binder and D. W. Heermann, “Monte Carlo Simulation in Statistical Physics” 2019, Springer, , pp. 179–190.
- [47] L. Larrimore “Monte Carlo Simulation of the 2D Ising Model.”
- [48] K. Kudeer and D. N. Abood, “The Phase Transition of the 2D-Ising Model By Using Monte Carlo Method” 2011, Eng. & Tech. Journal.
- [49] L. Witthauer and M. Dieterle, “The Phase Transition of the 2D-Ising Model.” Summer Term 2007.
- [50] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, “Monte Carlo Methods in Statistical Physics chapter 1-4.” 1999, Oxford University Press, Oxford.
- [51] A. W. Sandvik, “Monte Carlo simulations in classical statistical physics,” 2013,PY 502, Computational Physics.
- [52] P. Bickel et al., “Springer Series in Statistics.”2003.

ملخص:

في هذه المذكرة درسنا السعة الحرارية لجمل متحولة السبين من خلال نموذج من نوع أيزينغ في بعدين بواسطة تقنيات مونتني كارلو MC عبر ديناميكيات Swendsen-Wang. نتائج المحاكات قورنت مع تلك المحصل عليها بديناميك Métropolis.

الكلمات المفتاحية: انتقال السبين، نموذج أيزينغ، نموذج من نوع أيزينغ، محاكاة مونتني كارلو، خوارزمية متروبوليس، خوارزمية Swendsen-Wang.

Résumé:

Dans ce mémoire nous avons étudié la capacité calorifique d'un système à conversion de spin en 2-D à travers le modèle de type-Ising. Dans ce but, nous avons utilisés les techniques des simulations MC via la dynamique des clusters de Swendsen- Wang. Les résultats des simulations sont comparés à ceux obtenus par la dynamique de Métropolis.

Mots clés: Conversion de spin, Modèle d'Ising, Modèle de type-Ising, Simulations Monte-Carlo, Algorithme de Metropolis, Algorithme de Swendsen-Wang.

Abstract:

In this memoir, we have studied the heat capacity for spin-crossover systems through the 2-D Ising type model by MC simulations techniques via the cluster dynamic of Swendsen-Wang. The results of simulations are compared to those obtained by the dynamic of Metropolis.

Keywords: Spin crossover, Ising model, Ising-type model, Monte-Carlo simulations, Metropolis algorithm, Swendsen-Wang algorithm.