



N° d'ordre : .....

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et**  
**de la Recherche Scientifique**

**Université Mohamed Boudiaf - M'sila**

**Faculté des Sciences**

**Département de Physique**

**MEMOIRE**

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

**MASTER**

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique des Particules à haute Energie**

Par

**Naima BENLAITER**

**THEME**

---

***CAPACITE CALORIFIQUE D'UN SYSTEME D'ISING EN 2D : ETUDE PAR  
SIMULATIONS MONTE CARLO***

---

Soutenu le : 05/06/2016

Devant le jury composé de :

A.MAIRECH	PROF Univ. de M'sila	Président
A. METATLA	MCB Univ. de M'sila	Rapporteur
Y.SABRI	MAA Univ. de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2016

## *Dédicaces*

*Je tiens à dédier ce humble travail à ma petite famille à l' incomparable mon mari l'époux, mon paradis belle mère, mes chères parents et mes petites filles Firdaws Sawab (6ans) et Hosna Maâb (3ans) .*

*Qu'Allah me les garde.*

*Mes frère, beaux frères et sœurs ma grande famille*

*Mes enseignants du département de physique théorique*

*Mes collègues*

# REMERCIEMENTS

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

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

J'exprime mes plus vifs remerciements **M.MAIRECH Abdelmadjid** d'avoir présider le jury et qu'il trouve ici le témoignage de notre très haute considération.

Je tiens à remercier **M.SABRI Youcef** pour avoir accepté d'être l'examinatrice de ce mémoire.

J'adresse mes vifs remerciements à mon encadreur **M.METATLA Abboud** pour l'effort considérable qu'il a déployé pour moi, ainsi que pour le soutien moral qu'il m'a offert lors de la réalisation de ce modeste travail.

N'oublier pas de remercier **M.BAADJI Nadjib** pour sa patience et son encouragements précieuse celui a dit « vous êtes physiciens attendus » qu'il m'a offert beaucoup d'ambition et d'espoir, je prie dieu tout puissant serai au niveau de sa bonne volonté.

Mes plus profonds remerciements vont à mes enseignants qui se sont consacrés à leurs taches avec dévouement et patience, ainsi pour la qualité de leurs cours et leur talent pédagogique incomparable.

En fin, mes remerciements s'adressent à ma petite famille, ma belle-mère et mes parents, mes tantes mes oncles mes collègues qu'ils m'ont toujours soutenu, encouragé et aidé.

# Sommaire

Introduction .....	05
Chapitre 01 : modèle d'Ising à une et deux dimension.....	06
1-Définition .....	06
2-Modèle d'Ising à une dimension, cas général ( $h \neq 0$ et $j \neq 0$ ) et solution exacte.....	06
2-1- Fonction de partition exacte.....	07
2-2-Energie libre .....	09
2-3 Aimantation.....	10
2-4 susceptibilité magnétique.....	10
2-5Energie moyenne.....	10
2-6 Capacité calorifique .....	11
3- modèle d'Ising à deux dimensions .....	11
3-1Fonction de partition exacte.....	12
3-2Energie libre .....	12
3-3Aimantation.....	13
3-4Susceptibilité magnétique .....	13
3-5Energie moyenne .....	13
3-6Capacité calorifique.....	14
4- Approximation du champ moyen solutions à d-dimensions .....	14
4-1 Fonction de partition.....	14
4-2Energie libre .....	15
4-3Aimantation.....	15
4-4Solution graphique de l'équation auto cohérente.....	16
4-5 Susceptibilité magnétique .....	16
4-6Energie moyenne.....	17

4-7 Capacité calorifique .....	18
5-Calcul les observables thermodynamiques par la relation de fluctuation .....	19
5-1 Susceptibilité magnétique.....	19
5-2Capacité calorifique .....	19
Chapitre II : Simulation Monte Carlo et modèle d'Ising.....	20
1-Définition .....	20
2-Principe.....	20
3-Calcul des valeurs moyennes.....	20
4-Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps.....	21
4-1Particules dans l'espace continue.....	22
4-2Modèles sur réseau.....	23
5-Importance échantillonnage et bilan détaillé .....	24
6-Algorithmes Metropolis pour le modèle d'Ising.....	27
7-Mesure des observables physiques.....	28
Chapitre III : Simulation et résultats .....	29
Conclusion .....	32

## Liste des figures

<b>Figure 1-1</b> : Représentation graphique d'une chaîne d'Ising. Les cercles en bleu représentent les spins et les traits sont les liens d'interactions J entre eux. ....	06
<b>Figure 1-2</b> : Chaîne Fermée et Chaîne Ouverte. ....	08
<b>Figure 1-3</b> : Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction .....	12
<b>Figure 1-4</b> : Résolution graphique de l'équation de champ moyen.....	16
<b>Figure 2-1</b> : Etats-basse énergie du modèle d'Ising bidimensionnel avec ferromagnétique (à gauche) et (à droite) interactions antiferromagnétiques. Les cercles pleins correspondent à et ouverte vers le bas jusqu'à une tourne, respectivement.....	23
<b>Figure 3-1</b> : Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16, 32$ et $64$ initialement à la phase aléatoire. La mesure est faite après $10 \times 50000$ MCS, $10 \times 40000$ MCS et $10 \times 20000$ MCS pour les réseaux $L=16, 32$ et $64$ respectivement.....	29
<b>Figure 3-2</b> : Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16, 32$ et $64$ initialement à la phase HS . La mesure est faite après $10 \times 50000$ MCS, $10 \times 40000$ MCS et $10 \times 20000$ MCS pour les réseaux $L=16, 32$ et $64$ respectivement. ....	30
<b>Figure 3-3</b> : Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16, 32$ et $64$ initialement à la phase BS . La mesure est faite après $10 \times 50000$ MCS, $10 \times 40000$ MCS et $10 \times 20000$ MCS pour les réseaux $L=16, 32$ et $64$ respectivement.....	31
<b>Figure 3-4</b> : Aimantation absolu en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16, 32$ et $64$ initialement dans les phases indiquées dans la figure. La mesure est faite après $10 \times 50000$ MCS, $10 \times 40000$ MCS et $10 \times 20000$ MCS pour les réseaux $L=16, 32$ et $64$ respectivement. ....	32

## **Introduction**

Les systèmes de spins en interactions décrivent en premier lieu des matériaux magnétiques, en physique statistique ces systèmes peuvent être décrits par les modèles de spin parmi ces modèles celui d'Ising est le plus important et le plus célèbre.

Le modèle d'Ising est un modèle simple possède des solutions analytiques, ces solutions exactes ne sont connues que pour les systèmes à 1D et 2D en absence de champ magnétique extérieur. La motivation initiale qui a conduit à étudier ce modèle était au départ pour décrire des problèmes de magnétisme et les phénomènes des transitions de phase ferromagnétique-paramagnétique. Si à une dimension il n'existe pas une transition de phase, en 1944 Lars Onsager confirme l'existence de transition de phase à 2 dimensions.

Il y a plusieurs techniques de simulations numériques, parmi lesquelles la méthode de Monte Carlo est la plus utilisée, elle est conçue pour effectuer le calcul de grandeurs thermodynamiques du modèle d'Ising telles que l'énergie interne, l'aimantation, la capacité calorifique, la susceptibilité magnétique,...Elle permet de tester la validité des approximations théoriques. La méthode MC 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, le deuxième chapitre est un rappel sur les techniques des simulations par la méthode de Monte Carlo, les résultats et la discussion des mesures de la capacité calorifique d'Ising en 2D seront présentés dans le chapitre 3, nous terminerons ce mémoire par une conclusion.

# Chapitre 01

## MODELE D'ISING A UNE ET DEUX DIMENSIONS

### 1- Définition

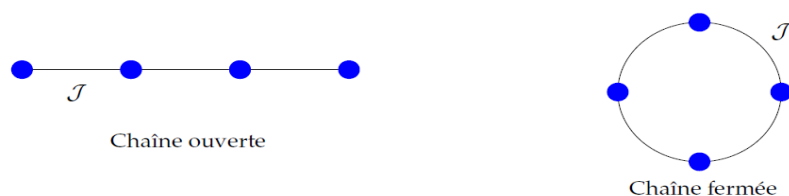
Le modèle d'Ising dénommé d'après son étudiant le physicien Ernest Ising il est parmi les modèles exactement solubles en physique statistique à une dimension, à deux dimensions (solution d'Onsager 1944). A trois dimensions il n'existe que des solutions approchées. Il s'agit d'un modèle de  $N$  spins classiques disposés sur un réseau, ce modèle très simple est défini de la façon suivante : on considère un réseau régulier dont les sites de spins sont numérotés d'une certaine façon et chaque site de spin  $i$  on le définit par une variable scalaire appelée moment magnétique  $\sigma_i$  qui ne peut prendre que deux valeurs  $\pm 1$ , ces variables sont couplées à un champ magnétique extérieur  $h_i$  et entre eux avec une interaction  $J$ .

En physique statistique on étudie des systèmes à très grand nombre  $N$  de particules, tant que  $N$  est grand cette étude est difficile. Paradoxalement le cas limite  $N \rightarrow \infty$  redevient un cas relativement simple, et cela grâce aux méthodes statistiques (calcul des probabilités où la loi des grands nombres donne une limite universelle aux distributions de probabilités: la loi gaussienne) aussi se sert-on en physique statistique du concept de la limite thermodynamique qui n'est rien d'autre que la limite d'un système infini. Bien sur les systèmes physique que l'on étudie ne sont pas infini néanmoins le nombre de particules d'un système macroscopique ( $N \approx 10^{23}$ ) est suffisamment grand pour que ses propriétés soient très proche de celles déduites théoriquement de la limite thermodynamique.

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

A 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.

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 1.1 :** Représentation graphique d'une chaîne d'Ising. Les cercles en bleu représentent les spins et les traits sont les liens d'interactions  $J$  entre eux.

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

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

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.

On constate que l'Hamiltonien va comporter deux termes :

$$H_1 = -j \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1.2)$$

Qui représente l'interaction entre spins les plus proches voisins, le deuxième terme :

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

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

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

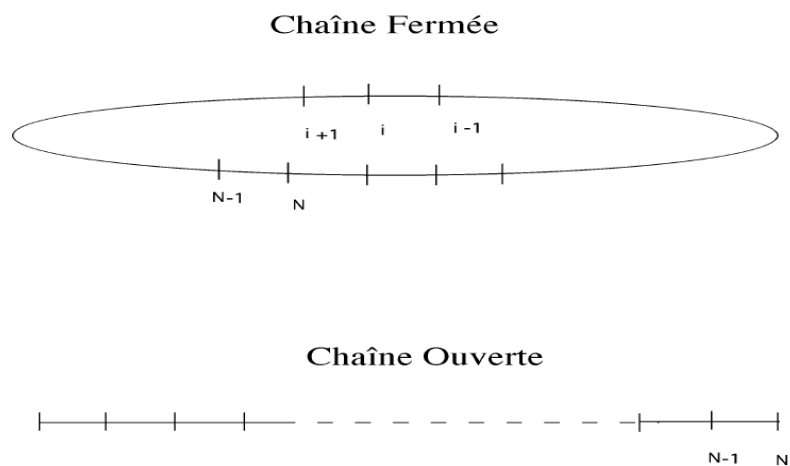
Alors l'Hamiltonien devient :

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

## 2-1- Fonction de partition exacte

Calculons maintenant la fonction de partition pour un système linéaire d'Ising de  $N$  spins,  $N$  étant un très grand nombre, ceci afin de se placer dans la limite thermodynamique avec les conditions périodiques (Figure 1-1)

$$\sigma_i = \sigma_{N+i} \quad \forall i$$



**Figure 1.2 :** Chaîne Fermée et Chaîne Ouverte

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

Donc la fonction de partition par définition est :

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

tel que  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  est la constante de Boltzmann on injectant H donné par l'équation (1.5) dans cette fonction on obtient :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp(\beta \sum_{i=1}^N [j\sigma_i\sigma_{i+1} + h(\sigma_i + \sigma_{i+1})/2]) \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp(\beta [j\sigma_i\sigma_{i+1} + h(\sigma_i + \sigma_{i+1})/2]) \end{aligned}$$

On réécrit Z en fonction de produit de matrice :

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (1.7)$$

tel que La matrice T est donné par :

$$T(\sigma_1, \sigma_2) = \exp(\beta [j\sigma_1\sigma_2 + h(\sigma_1 + \sigma_2)/2]) \quad (1.8)$$

ces éléments est :

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

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

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

T appelée la matrice de transfert de dimension  $2 \times 2$ , s'écrit comme suit :

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

La matrice T peut être diagonalisable et les valeurs propres  $\lambda_+$  et  $\lambda_-$  sont les racines du déterminant suivant :

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

où I est la matrice unité et

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

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

$$\text{tr}(AB) = \sum_{i=1}^n (AB)_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_{ij} B_{ji} = \sum_{j=1}^m (BA)_{jj} = \text{tr}(BA) \quad (1.10)$$

et après la diagonalisation de T la fonction Z devient :

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

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

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

Donc 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 appelé aussi potentiel thermodynamique dans l'ensemble canonique.

L'énergie libre de Helmholtz est définie par :

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

Avec

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

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

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

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

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

## 2-3 -Aimantation

L'aimantation est donné par :

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

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

Pour produire une magnétisation à température finie, il faut un champ extérieur.

## 2-4 -Susceptibilité magnétique

Elle est défini par :

$$\chi = \left( \frac{\partial m}{\partial h} \right)_{h=0} = -\frac{1}{N} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \right)_{h=0} \quad (1.18)$$

$$\chi = \left[ \frac{(\beta \cosh(\beta h)) \sqrt{\sinh^2 h(\beta h) + e^{-4\beta j}} - \frac{2\beta \sin^2 h(\beta h \cosh(\beta h))}{2\sqrt{\sinh^2 h(\beta h) + e^{-4\beta j}}}}{\sinh^2 h(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right]_{h=0}$$

Enfin on a :

$$\chi = \frac{\beta e^{-2\beta j}}{e^{-4\beta j}} = \beta e^{2\beta j} \quad (1.19)$$

Qui reste finie à toute température non nulle.

## 2-5 -Energie moyenne

L'énergie moyenne est défini de la façon suivante :

$$E = \sum_s E_s P_s = \sum_s \frac{E_s e^{-\beta E_s}}{Z} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.20)$$

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

$$E = -N \left[ j + \frac{h \sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}}} - \frac{2j e^{-4\beta j}}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} (\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}})} \right] \quad (1.21)$$

## 2-6- Capacité calorifique

La capacité calorifique est donnée par :

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{K_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (1.22)$$

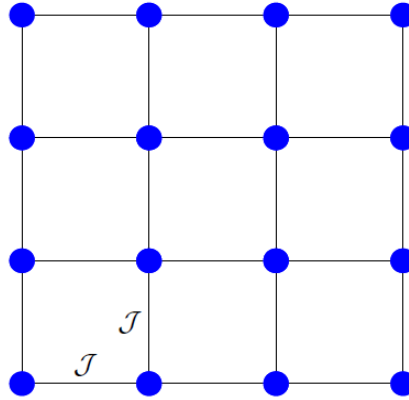
$$C_v = -\frac{1}{K_B T^2} \frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{N}{K_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

$$C_v = \frac{N}{K_B T^2} \left\{ \begin{array}{l} 8 j^2 e^{-4\beta j} \left( \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right) \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} + \\ \frac{h e^{-4\beta j} (h \cosh(\beta h) + 2 j \sinh(\beta h))}{\left( \sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j} \right)^{\frac{3}{2}}} + \\ \frac{2 j h e^{-4\beta j} \sinh(\beta h) \cosh^2(\beta h) - 4 j^2 e^{-8\beta j} \cosh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}}} + \\ 2 j \sinh(\beta h) \cosh(\beta h) e^{-4\beta j} - \\ 4 j^2 e^{-8\beta j} + \\ h \sinh(\beta h) \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} + \\ \frac{h \cosh(\beta h) \sinh(\beta h) - 4 j e^{-4\beta j}}{\left( \sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j} \right) \left( \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right)^2} \end{array} \right\} \quad (1.23)$$

Toutes les fonctions thermodynamiques du modèle d'Ising à une dimension dans l'ensemble canonique sont régulières, il ne peut apparaitre de singularité à température fini.

### 3- Modèle d'Ising à deux dimensions

La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel a été donné pour la première fois par Lars Onsager .Ce système comporte bien à 2D une transition de phase de second ordre, elle se manifeste par un comportement singulier des fonctions thermodynamiques ou leurs dérivées.



**Figure 1. 3 :** Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré .Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction  $J$  (traits noir).

Considérons un réseau carré régulier (Figure 1.3). Il est géré par l'Hamiltonien :

$$H = -j \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.24)$$

Chaque spin possède deux valeurs  $\sigma_i = \pm 1$  on aura donc  $2^N$  états pour un réseau de N spins.

### 3-1-Fonction de partition exacte

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

$$Z = \sum_{\sigma_{i=\pm 1}} e^{-\beta H} = \text{trace} T^N$$

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

$$Z = [2 \text{cosh}(2j\beta) e^I]^N \quad (1.25)$$

Où  $I$  est une intégrale elliptique qui a la forme :

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

$$\text{Avec } x = \frac{2 \sinh\left(\frac{2j}{K_B T}\right)}{\cosh^2\left(\frac{2j}{K_B T}\right)}$$

$x$  est une fonction de  $T$  qui s'annule pour  $T=0$  et  $T=\infty$ . Pour  $j$  et  $T$  positives  $x$  est aussi positive et continue, le paramètre  $x$  présente un maximum à  $T = T_C$  (il suffit de dériver  $x$  en fonction de  $T$  pour observer  $sh(T_C) = 1$  et donc  $x(T_C) = 1$ )

### 3-2 -Energie libre

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

$$\begin{aligned} F(T) &= -K_B T \ln Z \\ &= -NK_B T \ln [2 \text{cosh}(2\beta j)] - \frac{NK_B T}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \left[ \frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - x^2 \sin^2 \varphi}) \right] \end{aligned} \quad (1.26)$$

### 3-4 -Aimantation

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

$$m = \left[ 1 - (\sinh(2\beta j))^{-4} \right]^{\frac{1}{8}} \quad (1.27)$$

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

$$\tanh\left(\frac{2j}{K_B T}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \frac{K_B T_C}{j} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.269185 \quad (1.28)$$

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

### 3-5 -Susceptibilité magnétique

Selon la solution exacte d'Onsager on a :

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial h}$$

On peut aussi obtenir la susceptibilité à partir des fluctuations de l'aimantation :

$$\chi = \frac{1}{kT} \int d^3 r [\langle m(r)m(0) \rangle - \langle m(0) \rangle^2]$$

Par comparaison avec la définition de la fonction de corrélation donne,  $m(r)$  est la densité de paramètre d'ordre.

### 3-6 -Energie moyenne

est donnée par :

$$\begin{aligned} E &= - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \\ &= -2Nj \tanh(2j\beta) - 2Nj \frac{(\sinh^2(2j\beta) - 1)}{\sinh(4j\beta)} \left[ \frac{2}{\pi} g(x) - 1 \right] \end{aligned} \quad (1.29)$$

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

$$g(x) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 - x^2 \sin^2 \varphi}}$$

On a mentionné qu'à  $T = T_c$   $\chi$  atteint un maximum, dans cette valeur de  $\chi$  la fonction  $g(x)$  présente une divergence logarithmique :

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

### 3-7 -Capacité calorifique

La grandeur thermodynamique qui nous intéresse c'est la capacité calorifique, qui représente aussi une divergence logarithmique, le développement limité de cette capacité en champ nul au voisinage de  $T = T_c$  est:

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{2K}{\pi} \left( \frac{2j}{KT_c} \right)^2 \left[ -\ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \ln \left( \frac{KT_c}{2j} \right) - \left( 1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (1.30)$$

## 4-Approximation du champ moyen solutions à d-dimensions

L'approximation la plus simple pour traiter un système de spin en interaction est celle de champ moyen, qui consiste à remplacer chacun des voisins des spins  $s_i$  par une valeur moyenne. Ici la dimension de l'espace n'intervient pas seul le nombre de coordinations ( $q$ ) qui est le nombre de particules en interaction compte. il

augmente avec la dimension d, on comprend pourquoi les calculs en champ moyen seront d'autant meilleurs que d est grand.

Pour obtenir un Hamiltonien approché, qui le soit on part de l'identité suivante:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) + \sum_{\langle i,j \rangle} m(\sigma_i + \sigma_j) - \sum_{\langle i,j \rangle} m^2 \quad (1.31)$$

Valable quel que soit m, et on choisit  $m = \langle \sigma \rangle$  est la valeur moyenne de spin qui on calculera par la suite.

dans cette identité on évalue chaque terme isolément :

$$\sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) = \sum_i (\sigma_i - m) \left[ \sum_{j(i)} (\sigma_j - m) \right] \quad (1.32)$$

Ou  $j(i)$  représente toutes les interactions de sites j plus proches voisins de i, si la coordinnence q était infinie la somme donnée par (1.32)serait nulle par définition de la moyenne(les fluctuations petites par rapport à la valeur moyenne),à la limite thermodynamique( $N \rightarrow \infty$ )l'approximation sera d'autant meilleur que q sera grande,si on néglige les effets de bord alors :

$$\sum_{\langle i,j \rangle} m(\sigma_i + \sigma_j) = \frac{1}{2} 2m \sum_i \sum_{i(j)} \sigma_i = m \sum_i \sigma_i \sum_{i(j)} 1 ,$$

La division par 2évite le double comptage dans cette somme. Hamiltonien (1.24) devient :

$$H_i = - \sum_i (jqm + B)\sigma_i + j \frac{q}{2} Nm^2 \quad (1.33)$$

## 4-1 -Fonction de partition

Est donnée par :

$$Z = \sum_{\sigma_i} e^{-\beta H}$$

On fait la somme sur tous les états de spin :

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\beta \frac{jqNm^2}{2}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta(jqm+h) \sum_i \sigma_i} \\ Z &= e^{-\beta \frac{jqNm^2}{2}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta(jqm+h)\sigma_i} \\ Z &= e^{-\beta \frac{jqNm^2}{2}} \left[ \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta(jqm+h)\sigma_i} \right]^N \end{aligned}$$

Enfin, on a :

$$Z = e^{-\beta \frac{jqNm^2}{2}} [2 \cosh \beta(jqm + h)]^N \quad (1.34)$$

## 4-2- Energie libre :

Est donnée par :

$$F(T) = -K_B T \ln Z$$

Par un calcul simple, on obtient :

$$F = \left( j \frac{q}{2} Nm^2 \right) - NK_B T \ln [2 \cosh \beta (jqm + h)] \quad (1.35)$$

### 4-3- Aimantation

Elle a la même définition que dans 1D et donnée comme suit :

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

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

Et enfin, on a :

$$m = \text{Tanh} \beta (h + jmq) \quad (1.36)$$

Equation dans le cas de spin d'Ising avec l'interaction ferromagnétique entre les premiers voisins. Il ya aussi deux autres façons de calculer  $m$ .

a) On minimise l'énergie libre par rapport à  $m$  ce qui vient à résoudre  $\frac{\partial \ln z}{\partial m} = 0$ .

b) On prend la dérivée logarithmique de  $Z$  il vient :  $\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} = \beta \langle \sigma \rangle = \beta m$ .

Ces deux méthodes conduisent à l'équation auto-cohérente (1.36).

### 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 :

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

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

Lorsque on dessine l'énergie libre en fonction de  $m$  on a pour  $K_B T < K_B T_C = jq$ , les solutions  $m \neq 0$  sont les minima de  $F(m)$  tandis que  $m=0$  correspondant un maximum. Donc à l'équilibre, la théorie de champ moyen prévoit une magnétisation spontanée perdue à  $T > T_C$ , cette brisure de symétrie est étonnante, elle est bien vérifiée expérimentalement: certains substances présentent une aimantation permanente en absence du champ magnétique extérieur  $h$ .

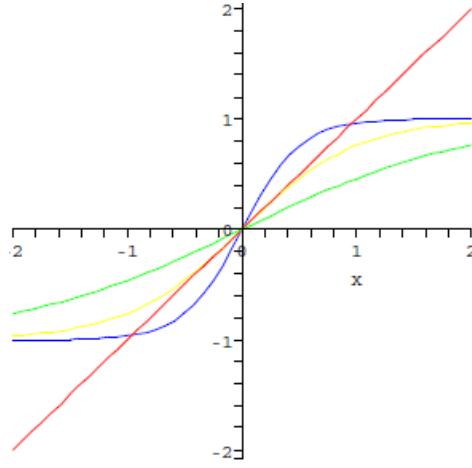


Figure 1.4 : Résolution graphique de l'équation autocohérente (1.36) avec  $j=1, q=6, h=0$ .

## 4-5 -Susceptibilité

On a :

$$m = \text{Tanh}\beta(jqm + h) \quad (1.37)$$

On considère  $h=0$ , donc :

$$m = \text{Tanh}\beta(jqm) \quad (1.38)$$

Quand  $\beta$  est grand  $T$  est petite, il existe 3 solutions possibles  $m=0$  et  $m = \pm|m|$ , la solution  $m > 0$  apparait où la pente de la fonction  $\text{Tanh}$  à l'origine est supérieur à un c'est-à-dire :

$$\frac{d}{dm}(\text{Tanh}\beta(jqm))_{m=0} > 1 \quad (1.39)$$

On trouve la condition (1.39) est  $\beta jq > 1$  équivalent de :

$$\beta jq = \frac{T_c}{T} \quad (1.40)$$

Ou  $T_c = \frac{jq}{K}$

On considère l'équation (1.38) et on utilisant (1.40) :

$$m = \text{Tanh}\left(m \frac{T_c}{T}\right) \quad (1.41)$$

Quand  $T \approx T_c$   $|m| \ll 1$  on porte le développement suivant

$$\text{Tanh}(x) \approx x - \frac{x^3}{3} \quad (1.42)$$

$$m = m \frac{T_c}{T} - \frac{m^3}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \Rightarrow m^2 = 3 \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \left(\frac{T_c}{T} - 1\right) \quad (1.43)$$

On pose  $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ ,  $t$  est la température réduite mesure l'approximation au point critique, quand  $t$  est petit

l'équation (1.43) deviennent :

$$m^2 = 3(1+t)^3 \left(1 - \frac{1}{1+t}\right) \approx -3t \quad (1.44)$$

Alors :

$$\begin{cases} T \rangle T_c : m = 0 \\ T \langle T_c : m \approx \pm (3|t|)^{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (1.45)$$

$$\chi = \left( \frac{\partial m}{\partial h} \right)_{h=0} \quad (1.46)$$

On porte le développement de l'équation (1.42) en tenant compte de  $h$  seulement dans le premier terme de

développement :  $m = m \frac{T_c}{T} + \beta h - \frac{m^3}{3} \left( \frac{T_c}{T} \right)^3$  et prend la dérivée par rapport à  $h$  :

$$\chi = \chi \frac{T_c}{T} + \beta - \chi m^2 \left( \frac{T_c}{T} \right)^3 \Rightarrow \chi = \frac{\beta}{\left[ 1 - \frac{T_c}{T} + m^2 \left( \frac{T_c}{T} \right)^3 \right]} \quad (1.47)$$

Lorsque  $t$  est petit on utilisant l'approximation suivant pour  $m$  :

$$\begin{cases} T \rangle T_c : \chi = \frac{\beta}{\left( 1 - \frac{T_c}{T} \right)} \approx \frac{\beta}{t} \\ T \langle T_c : \chi = \frac{\beta}{\left[ 1 - \frac{T_c}{T} + 3 \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right) \right]} \approx \frac{\beta}{2|t|} \end{cases} \quad (1.48)$$

La divergence de la susceptibilité sera à  $t=0$

## 4-6- Energie moyenne

L'énergie moyenne par site est donnée par :

$$e = \frac{E}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.49)$$

Un calcul simple donne :

$$e = -j \frac{q}{2} m^2 + \tanh \beta (jqm + h) + \frac{\partial m}{\partial \beta} [-\beta jqm + \beta jq \tanh \beta (jqm + h)] \quad (1.50)$$

D'autre part :  $\frac{\partial \ln Z}{\partial m} = -\beta jqm + \beta jq \tanh \beta (jqm + h)$ , on remplace dans l'équation (1.50), on obtient :

$$e = -j \frac{q}{2} m^2 + \tanh \beta (jqm + h) + \frac{\partial \ln Z}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial \beta}$$

L'équation auto-cohérente permet d'éliminer la  $\tanh$  et l'énergie libre ( $F = -K_b T \ln Z$ ) étant stationnaire par rapport à  $m$ , alors le second terme s'annule donc :

$$e = -\frac{q}{2} j m^2 \quad (1.51)$$

#### 4-7 - Capacité calorifique

La capacité s'écrit comme suit :

$$c = \frac{\partial e}{\partial T} = \frac{j q}{2} \frac{\partial m^2}{\partial T} \quad (1.52)$$

Au voisinage de  $T = T_c$ ,  $m$  est très petit on peut donc porter le développement:(1.42)

Dans l'équation auto-cohérente :

$$x = \beta(jqm + h)$$

Injectons  $x$  dans le développement (1.42) on obtient :

$$m = \beta(jqm + h) - \beta^3 \frac{(jqm + h)^3}{3}$$

Quand ( $h=0$ ) en absence de champ magnétique extérieur on tire  $m$  :

$$m = \beta jqm - \frac{\beta^3 j^3 q^3 m^3}{3} \Rightarrow m^2 \approx \frac{3(\beta jq - 1)}{\beta^3 j^3 q^3}$$

$$m^2 \approx \frac{3\left(\frac{T_c}{T} - 1\right) T^3}{T_c^3} \approx 3\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$$

$$\begin{cases} T < T_c, c = \frac{3K_b}{2} \\ T > T_c, c = 0 \end{cases} \quad (1.53)$$

$\frac{\partial m^2}{\partial T}$  est une fonction décroissante de  $T$ , l'équation auto-cohérente montre que  $c$  croit de 0 à  $\frac{3K_b}{2}$  pour  $T = T_c^-$  et

s'annule de façon discontinue à partir de  $T_c^+$ .

#### 5- Calcul les observables thermiques par la relation de fluctuation

L'énergie interne est donnée par :

$$E = -j \sum_{i,j} s_i s_j - h \sum_i s_i = E_0 - hM \quad (1.54)$$

On note  $M$  la magnétisation totale  $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i$

Et la quantité normalisée :  $m = \frac{M}{N}$

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s m(s) e^{-\beta \frac{(E_0 - hM)}{T}} \quad (1.55)$$

Avec  $Z = \sum_s e^{-(E_0 - hM)/T}$

### 5-1 -Susceptibilité magnétique :

Par définition on a :

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{d\langle m \rangle}{dh} = \frac{1}{TZ} \sum_s m M e^{-(E_0 - hM)/T} - \frac{1}{Z^2} \frac{dZ}{dh} \sum_s m e^{-\frac{(E_0 - hM)}{T}} \\ \chi &= \frac{1}{NT} \frac{1}{Z} \sum_s M^2 e^{-(E_0 - hM)/T} - \frac{1}{NT} \frac{1}{Z^2} \sum_s M e^{-(E_0 - hM)/T} \sum_s M e^{-(E_0 - hM)/T} \\ \chi &= \frac{1}{NT} \left[ \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right] \end{aligned} \quad (1.56)$$

### 5-2 -Capacité calorifique :

Tout d'abord on va calculer l'énergie moyenne :

On a :

$$E = \sum_s P_s = \frac{1}{Z} \sum_s E(s) e^{-\beta E(s)} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s e^{-\beta E(s)} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Et on déduit la capacité à partir de la dérivée de l'énergie :

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{-\beta}{T} \frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{\beta}{T} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = \frac{\beta}{T} \frac{\partial}{\partial \beta} \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) = \frac{\beta}{T} \left[ \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right] \\ C_v &= \frac{\beta}{T} \left[ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right] \end{aligned} \quad (1.57)$$

## Chapitre 02

### SIMULATIONS MONTE CARLO ET MODELE D'ISING

#### 1-Définition :

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

#### 2- Principe

Dans une simulation on veut calculer les valeurs moyennes des grandeurs physiques telles que l'énergie moyenne, la capacité calorifique, l'aimantation, la susceptibilité magnétique. 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 :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(T)} \sum_s A(s) e^{-\beta E(s)} \quad (2.1)$$

Où  $Z(T)$  est la fonction de partition à  $T$ ,  $E(s)$  et  $A(s)$  sont l'énergie du système et la valeur de  $A$  dans l'état microscopique  $s$ .

On principe on doit sommer sur tous les configurations de spins, dans le cas des spins d'Ising le nombre des configurations de spin est  $2^N$  où  $N$  est le nombre total de spins.

#### 3-Calcul des valeurs moyennes

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

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L P(x) A(x) dx \quad , \quad \int_{-L}^L P(x) dx = 1 \quad (2.2)$$

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

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M P(x_i) A(x_i) \quad (2.3)$$

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

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{P(x_i)}{W(x_i)} A(x_i) \quad (2.4)$$

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, dans le sens d'être raisonnablement lisse et pas très petite où  $P(x)$  est grand et vice versa.

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

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i) \quad (2.5)$$

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  $P$  sont 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.

Utilisation échantillonnage d'importance à la place de l'échantillonnage aléatoire uniforme est cruciale quand une petite fraction de l'espace de configuration domine la fonction de partition, qui est toujours le cas avec la probabilité de Boltzmann dans les modèles de mécanique statistique à des températures d'intérêt.

Un des utilitaires principaux de la simulation Monte Carlo est dans les études des transitions de phase et phénomènes critiques. Bien qu'il existe des simulations par des méthodes analogues disponibles également pour les systèmes quantiques (appelée quantiques des méthodes de Monte Carlo). Ici 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 des à plusieurs particules dans l'espace continu et après nous allons voir les modèles réseau de spin aux quelles appartient le modèle d'Ising.

### 4-1-Particules dans l'espace continu

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

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d A(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) e^{H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/k_B T} \quad (2.6)$$

Où  $Z$  est la fonction de partition

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d e^{H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/k_B T} \quad (2.7)$$

$k_B$  Est la constante de Boltzmann, et  $H$  est l'hamiltonien. Pour les particules identiques de masse  $m$  dans un potentiel  $U(\vec{x}_i)$  et une à deux particules interaction  $V(\vec{x}_i, x_j)$ , l'hamiltonien est

$$H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j} V(\vec{x}_i; x_j) \quad (2.8)$$

Si l'observable  $A$  est indépendante de la vitesse (i.e. une fonction que des positions  $x$ ), les intégrales de moment annulent en (2.6), conduisant à

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d A(\{\vec{x}_i\}) e^{H(\{\vec{x}_i\})/k_B T} \quad (2.9)$$

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

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

$$E(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) = \sum_{i=1}^N U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j} V(\vec{x}_i; x_j) \quad (2.10)$$

Est pertinent pour les propriétés statiques [la densité  $\rho(\vec{x})$ , fluctuation de densité, les fonctions de corrélation égale-temps, etc.] du système. Souvent, la seule quantité dépendant de la vitesse considéré en équilibre mécanique statistique est l'énergie cinétique, qui, pour une seule particule est donnée par

$$k_i = \left\langle \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{Z_p} \quad (2.11)$$

$$Z_p = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d e^{-p_i^2/2mk_B T} \quad (2.12)$$

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

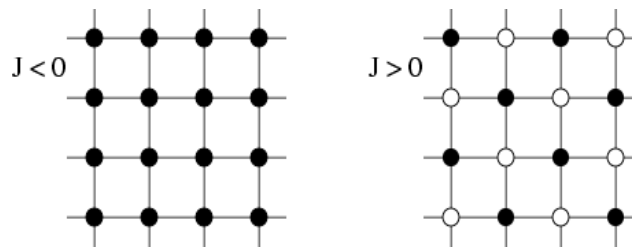
$$k_i = \frac{d}{2} k_B T \quad (2.13)$$

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

## 4-2-Modèles sur réseaux

Dans un modèle sur réseau les degrés de liberté du système peuvent être continus ou discrète. Les modèles de spin constituent une classe importante de modèles sur réseau. Dans la nature, les modèles de spin ont des réalisations directs dans des cristaux d'atomes avec des spins non appariés électroniques qui sont localisés sur les sites atomiques, à savoir, dans les isolants dont les spins sont pas portés par des électrons de conduction délocalisés mais peuvent être associés à des atomes individuels. Un des modèles les plus importants de ce genre est le modèle de Heisenberg, où l'interaction entre les spins sur les sites  $i$  et  $j$  est proportionnelle à leur produit scalaire;

$$E = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.14)$$



**Figure 2.1:** États-basse énergie du modèle d'Ising bidimensionnel avec ferromagnétique (à gauche) et (à droite) interactions antiferromagnétiques. Les cercles pleins correspondent à et ouverte vers le bas jusqu'à une tourne, respectivement.

Les constantes de couplage  $J$  sont souvent limitée à être non nul uniquement pour les sites de réseau  $i, j$  qui sont voisins les plus proches. Ici, les vecteurs de spin sont en trois dimensions, mais peut conduire à des modèles anisotropiques efficaces de spin dans lequel les orientations de spin sont confinés à l'intérieur d'un plan, comme illustré sur la Fig 2.1

Le modèle de spin simple est le modèle Ising, dans lequel les spins ont seulement deux orientations possibles le long d'un axe choisi; "haut" ou "bas". En notant les degrés de liberté  $\sigma_i = \pm 1$ , l'énergie est

$$E = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.15)$$

où nous avons également inclus un champ magnétique externe. L'interaction  $J_{ij}$  est encore souvent (mais pas toujours) non nulle seulement entre voisins les plus proches. Un modèle d'Ising peuvent survenir dans un système

de  $\sigma = \frac{1}{2}$  lorsque les anisotropies font les interactions dans un sens de rotation dominante, par exemple, seulement  $\sigma_i^z \sigma_j^z$  peut devoir être pris en considération.

Considérant seulement les interactions entre plus proche voisin, l'énergie est

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.16)$$

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

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} A(\sigma) e^{-E(\sigma)/T} \quad (2.17)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} \quad (2.18)$$

Pour les interactions ferromagnétiques (c.-à-  $J < 0$ ) 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 (de  $J > 0$ ), et par exemple, sur un réseau carré bidimensionnel les configurations les plus bas de l'énergie sont en alternance de haut spin en bas spin dans un motif en damier (les spins haut et bas constituent deux sous-réseaux).

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 (dans une dimension, fluctuations thermiques interdisent l'ordre à  $T > 0$ , et le système présente alors un véritable ordre à longue). Le paramètre d'ordre de cette transition de phase est l'aimantation.

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.19)$$

## 5- Importance échantillonnage et bilan détaillé

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

$$\langle A \rangle = \sum_{\sigma} P(C_i) A(C_i), \quad P(C_i) = \frac{1}{Z} e^{-E(C_i)/T} \quad (2.20)$$

Où nous travaillons en unités telles que  $k_B = 1$  (ie, 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). Nous allons discuter des conditions sur les probabilités de transition  $P(C_i \rightarrow C_j)$  pour la distribution désirée  $P(C)$  à atteindre. Il convient de noter que  $P$  peut être une distribution de probabilités, pas nécessairement la probabilité de Boltzmann qui nous intéresse ici.

Au lieu de considérer une seule séquence de configurations, il est utile d'abord 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 les configurations est

$$N_1(C_i) = N_0(C_i) + \sum_{j \neq i} [N_0(C_j)P(C_i \rightarrow C_j) - N_0(C_i)P(C_i \rightarrow C_j)] \quad (2.21)$$

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  $i = 1, \dots, N$

$$\sum_{j \neq i} [N_0(C_j)P(C_i \rightarrow C_j) - N_0(C_i)P(C_i \rightarrow C_j)] = 0 \quad (2.22)$$

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

$$\sum_{j \neq i} [P(C_j)P(C_i \rightarrow C_j) - P(C_i)P(C_i \rightarrow C_j)] = 0 \quad (2.23)$$

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;

$$P(C_j)P(C_i \rightarrow C_j) - P(C_i)P(C_i \rightarrow C_j) = 0 \quad (2.24)$$

Ce qui donne un état, appelé équilibre détaillée, sur le rapport des probabilités de transition;

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{P(C_i)}{P(C_j)} \quad (2.25)$$

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

$$P(C_i) = \frac{1}{Z} W(C_i), W(C_i) = e^{-E(C_i)/T} \quad (2.26)$$

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

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_i)}{W(C_j)} \quad (2.27)$$

Qui est la condition de bilan détaillé.

Bien que nous ayons tiré la condition détaillée de l'équilibre à partir d'un ensemble de configurations, il est valable pour une seule chaîne de Markov aussi, cette déclaration serait clairement vraie si les chaînes de Markov formés par l'évolution temporelle de toute la configuration individuelle dans l'ensemble auraient la même répartition dans le temps, dans ce cas, il est clair qu'ils seront tous distribués selon P. Pour ce faire tenir l'échantillonnage doit être ergodique, à savoir les types de mises à jour faites doivent être tels que, d'une configuration arbitraire toute configuration peut être atteint par une série de mises à jour. La plupart des systèmes de simulation de Monte Carlo sont basés sur les principes de l'équilibre 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 observables.

Dans une simulation, on ne considère généralement pas toutes les transitions possibles  $C_i \rightarrow C_j$ , mais seulement un sous-ensemble de toutes les transitions correspondant à faire certains petits changements en  $C_i$ . Par exemple, pour 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  $\vec{\delta}$ , avec  $\vec{\delta}$  choisi au hasard dans une sphère de rayon  $\Delta$ .

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  $\vec{\delta}$ ) et l'autre pour exercer effectivement le changement (accepter). Nous écrivons donc

$$P(C_i \rightarrow C_j) = p^{\text{attempt}}(C_i \rightarrow C_j) p^{\text{accept}}(C_i \rightarrow C_j) \quad (2.28)$$

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 (2.27) et on se retrouve avec une condition bilan détaillé pour les probabilités d'acceptation :

$$\frac{p^{\text{accept}}(C_i \rightarrow C_j)}{p^{\text{accept}}(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (2.29)$$

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

$$p^{\text{accept}}(C_i \rightarrow C_j) = \min \left[ \frac{W(C_j)}{W(C_i)}, 1 \right] \quad (2.30)$$

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(2.29). 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)  $r \in [0; 1]$ , si  $r < p^{\text{accept}}(C_i \rightarrow C_j)$  la mise à jour est acceptée, et sinon elle est rejetée. Si une mise à jour est rejetée, l'ancienne configuration  $C_i$  devrait être considérée comme la configuration suivante dans la séquence. L'ensemble de la procédure de tenter des mises à jour et d'accepter ou de les rejeter en utilisant le schéma ci-dessus prend le nom de l'algorithme de Metropolis.

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

$$p^{\text{accept}}(C_i \rightarrow C_j) = \frac{W(C_j)}{W(C_i) + W(C_j)} \quad (2.31)$$

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

$$p^{\text{select}}(C_{j(k)}) = \frac{W(C_{j(k)})}{\sum_{l=1}^m W(C_{j(l)})} \quad (2.32)$$

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

## 6- Algorithme de Métropolis pour le modèle d'ising

Il a été déjà indiqué plus haut comment fonctionne l'algorithme de Metropolis dans le cas du modèle d'Ising, pour lesquels l'énergie en présence d'un champ magnétique est donnée par l'équation. (2.15), 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 :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[ -\frac{J}{T} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma'_i \sigma'_j - \sigma_i \sigma_j) + \frac{h}{T} \sum_i (\sigma'_i - \sigma_i) \right] \quad (3.33)$$

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

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[ -\frac{2J}{T} \sigma_j \left( \sum_{\delta[j]} \sigma_{\delta[j]} - \frac{h}{J} \right) \right] \quad (2.34)$$

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 (2.30). 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 :

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad m = \frac{M}{N}$$

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.

Une autre quantité de grand intérêt est la susceptibilité magnétique, définie comme :

$$\chi = \frac{d\langle m \rangle}{dh} = \frac{1}{N} \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)$$

La chaleur spécifique est donnée par:

$$C = \frac{1}{N} \frac{dE}{dT} = \frac{1}{N} \frac{d}{dT} \frac{1}{Z} \sum_S E(C) e^{E(C)/T} = \frac{1}{N} \frac{1}{T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

## CHAPITRE 03

### SIMULATIONS ET RÉSULTATS

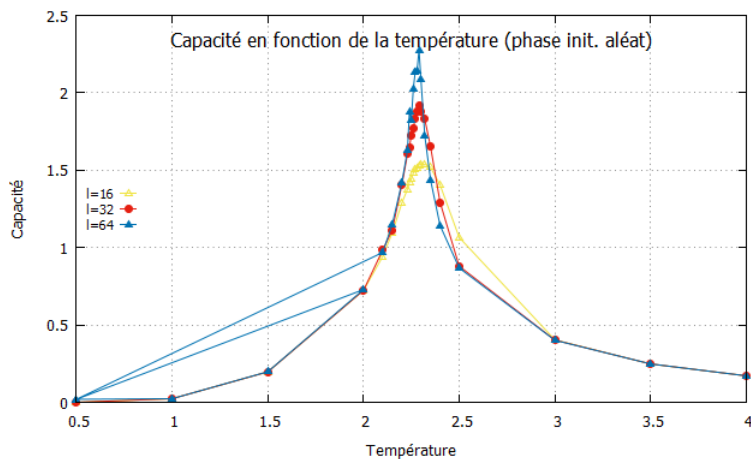
Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ( $d=2$ ) de taille  $L=16, 32, 64$ , en trois phases initiales différentes : aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS), pour des valeurs de température dans l'intervalle  $[0.5, 4]$  en unité de  $[k_B/J]$  et avec des conditions périodiques aux bords.

L'algorithme utilisé dans les simulations MC est celui de Métropolis. Avant chaque mesure, on fait équilibrer thermiquement le système.

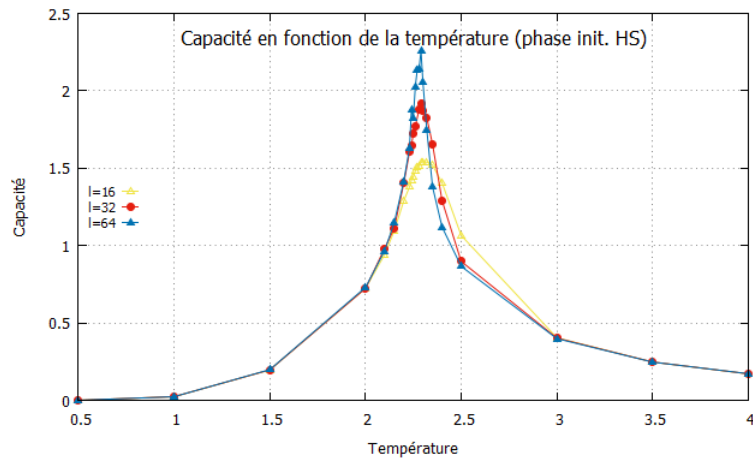
#### Discussion :

Les résultats de simulations montrent que plus le système est large plus la divergence de la capacité calorifique est rapide à une température critique quel que soit la phase initiale ; aléatoire, haut spin (HS) ou bas spin (BS), et plus le système est large plus la température de divergence est très proche de celle d'Onsager ;  $T_c = 2/\ln(1+\sqrt{2}) \cong 2.269$ , qui correspond à un système de taille infinie.

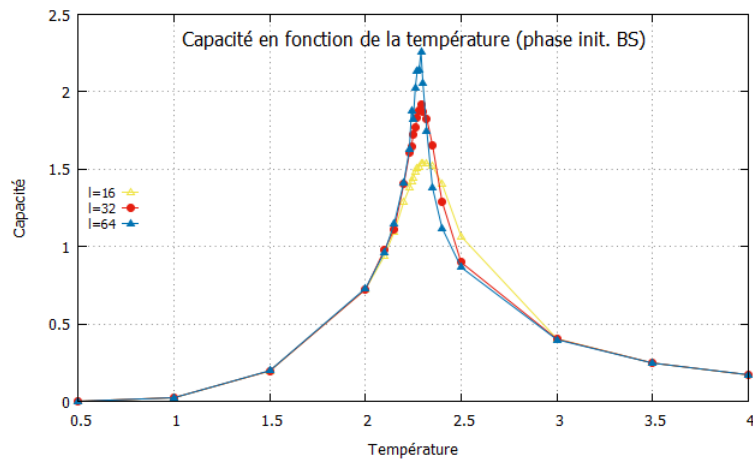
Nous avons mesuré la capacité calorifique aux phases initiales: aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS) respectivement pour les valeurs de température indiqués précédemment. Les résultats sont illustrés dans les Figures ci-dessous.



**Figure 3.1:** Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille  $L=16, 32$  et  $64$  initialement à la phase aléatoire. La mesure est faite après  $10 \times 50000$  MCS,  $10 \times 40000$  MCS et  $10 \times 20000$  MCS pour les réseaux  $L=16, 32$  et  $64$  respectivement.



**Figure 3.2:** *Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille  $L=16, 32$  et  $64$  initialement à la phase HS. La mesure est faite après  $10 \times 50000$  MCS,  $10 \times 40000$  MCS et  $10 \times 20000$  MCS pour les réseaux  $L=16, 32$  et  $64$  respectivement.*

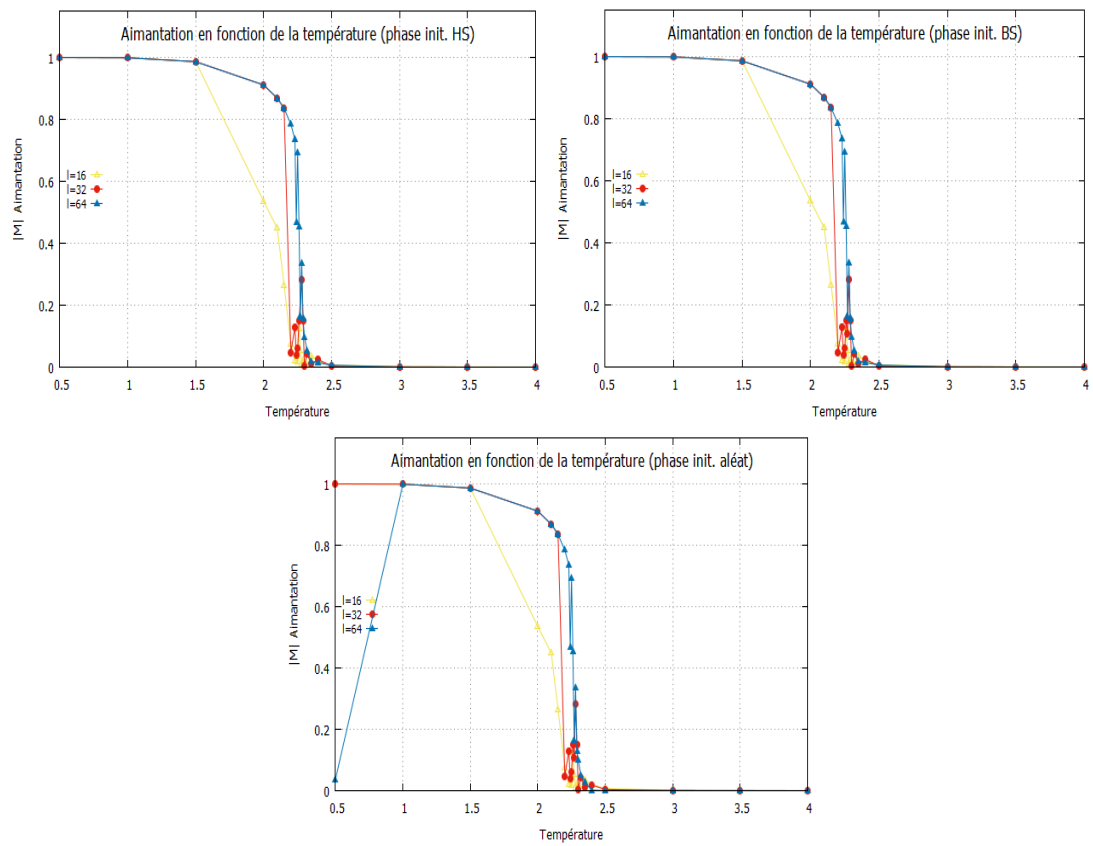


**Figure 3.3:** *Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille  $L=16, 32$  et  $64$  initialement à la phase BS. La mesure est faite après  $10 \times 50000$  MCS,  $10 \times 40000$  MCS et  $10 \times 20000$  MCS pour les réseaux  $L=16, 32$  et  $64$  respectivement.*

Nous avons aussi mesuré la valeur absolue de l'aimantation aux différentes phases initiales. Les résultats sont illustrés dans les Figures ci-dessous. Nous remarquons que les courbes de l'aimantation ont quelques comportements particuliers :

a)- Pour le réseau de taille  $L=16$  au voisinage de la température critique, on peut attribuer ça à l'effet de taille où le changement de phase apparaît à une température inférieure à  $T_C$  pour des systèmes de petites tailles.

b)- Pour le réseau de taille  $L=64$  initialement en phase aléatoire et à basses températures, ce comportement est justifié par le fait que la phase normale d'un système d'Ising à basse température est celle BS ou HS, est plus le système est large plus l'équilibrage thermique du système est difficile à atteindre, il demande plus de MCS, d'où les mesures sur les réseaux  $L=16, 32$  sont faites sur des systèmes en équilibre thermique mais celles sur  $L=64$  les mesures à basse température sont réalisées sur un système qui n'a pas encore été équilibré.



**Figure 3.4:** Aimantation absolue en fonction de la température pour un réseau carré de taille  $L=16, 32$  et  $64$  initialement dans les phases indiquées dans la figure. La mesure est faite après  $10 \times 50000$  MCS,  $10 \times 40000$  MCS et  $10 \times 20000$  MCS pour les réseaux  $L=16, 32$  et  $64$  respectivement.

## **Conclusion et perspectives**

Nous avons étudié dans ce mémoire la capacité calorifique et l'aimantation pour le modèle d'Ising bidimensionnel par les techniques des simulations de Monte Carlo. Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ( $d=2$ ) avec des conditions périodiques aux bords et pour trois phases initiales différentes pour le système: aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS).

L'algorithme utilisé dans les simulations Monte Carlo est celui de Métropolis, les simulations Monte Carlo sont très importantes et elles permettent d'obtenir des résultats proches des résultats de l'expérience des grandeurs physiques du système: l'énergie interne, l'aimantation, la susceptibilité magnétique,...

Les simulations montrent que plus le système est large et le nombre de pas Monte Carlo (MCS) est grand plus les valeurs de l'aimantation et la capacité calorifique à une température donnée sont plus précises, pour un système équilibré thermiquement et pour un nombre suffisant de MCS on obtient une température critique (de divergence) pour la capacité calorifique très proche de celle d'Onsager :  $T_c = 2/\ln(1+\sqrt{2}) \cong 2.269$  quel que soit la phase initiale : aléatoire, haut spin (HS) ou bas spin (BS).

## **Références :**

- 1-Alexandre. B, Simulation de Monte Carlo pour un matériau magnétique. 8 Février 2014.
- 2-Anders. W ; Sandvika, Computational Physics Monte Carlo simulation in classical statistical physics. Département of Physics, 2013. Boston University.
- 3-Gabriel. Ch., Jérôme. P, Jean-Marcel. R .Fondements statistiques de la matièreparis les presses de l'ensta, boulevard Victor.47p.[www.ensta.fr](http://www.ensta.fr)
- 4-Hubert k et Jacques T , La physique statistique en exercices. Paris, Vuibert, 323 pages. 2008 .
- 5-Hung T , physique statistique .. Paris, Ellipses Edition Marketing, 239page. 2006.
- 6-Ishita. ANumerical Analysis of 2-D Ising Model University of Bonn, Masters in Physics. , 17mars 2011.
- 7- Ismail ZERGOUG, Modèle d'Ising dilué. Thèse pour l'obtention d'un Doctorat 3 cycle en Physique Option Physique Médicale, Oran, 129p. 2005.
- 8-John. W ; sons, statistical michanics.canada, Library of congrès cataloging-in-publication data.487p. 1987. ISBN : 0-471-81518-7.
- 9-Stéphane. D ; Nicolas. V, Introduction à la Physique Statistique. Belgique, Université de Liège.212p. 2006.
- 10-Velenik. Y, le modèle d'Ising.90p. 25 mai 2009.
- 11- Yicheng Z, Mécanique statistique classique. 15 septembre 2009.  
<http://www.unige.ch/math/folks/velnik/cours.html>

## Résumé :

Nous avons étudié la capacité calorifique d'un système d'Ising en deux dimensions par les simulations Monte Carlo, un système d'Ising est un système de spins en interaction, dans lequel il se manifeste le phénomène de la transition de phase. Tant que ce modèle est trop compliqué à résoudre analytiquement ( $d=2$ ), nous allons trouver des solutions numériques à l'aide des simulations MC qui permet de tester la validité des approximations théoriques. Effectivement la méthode MC prouve l'existence de la transition de phase ( $d=2$ ) et permet de déterminer la température de transition et d'analyser les résultats obtenus. Dans cette simulation lorsque on tenant compte des conditions requises telles que une taille suffisamment grande du réseau et un grand nombre d'étapes de monte Carlo (MCS) on obtient des résultats précis, la précision est très convaincante même pour des réseaux de petites tailles.

## ملخص

قمنا بدراسة السعة الحرارية لنموذج ازينج في بعدين بطريقة المحاكاة لمونت كارلو، نظام ازينج يصف نظام لسبين في حالة تفاعل، فيه تتجلى ظاهرة الانتقال في الطور. مادام هذا النموذج يصعب حله تحليليا في بعدين، سنقوم بإيجاد حل له بطريقة البرمجة المقترحة وهي طريقة المحاكاة لمونت كارلو التي تسمح بالتحقق من التقريبات النظرية. بالفعل طريقة مونت كارلو تؤكد وجود الانتقال في الطور في بعدين. كما تسمح بتحديد حرارة الانتقال و تقوم بتحليل النتائج المحصل عليها. في طريقة المحاكاة لما نأخذ بعين الاعتبار الشروط من حيث كبر حجم النظام و عدد كاف من خطوات مونت كارلو نحصل على النتائج بدقة، هذه الدقة مقنعة حتى من اجل صغر حجم النظام المدروس.

## Summary :

We studied the heat capacity of an Ising system in two dimensions by Monte Carlo simulations, an Ising system is a spin system interacts, wherein there occurs the phenomenon of the phase transition. As this model is too complicated to solve analytically ( $d = 2$ ), we will find digital solutions using MC simulations for testing the validity of theoretical approximations. MC actually the method to prove the existence of the phase transition ( $d = 2$ ) and determines the transition temperature and analyze the results. In this simulation it when taking into account the requirements such as a sufficiently large size of the lattice and a large number of Monte Carlo steps (MCS) accurate results are obtained, the accuracy is very convincing even for small sizes of lattice.