

Modèle d'Ising

Fraval Julie

Juin 2018

Table des matières

1	Paramagnétisme et ferromagnétisme	3
1.1	Paramagnétisme	3
1.2	Ferromagnétisme	3
1.3	Exemple de matériaux ferromagnétiques	4
1.4	Transition de phase ferromagnétisme paramagnétisme	4
2	Modèle d'Ising	5
2.1	Un peu de physique statistique	5
2.2	Définition du modèle d'Ising	6
2.3	Modèle d'Ising à une dimension et matrice de transfert	6
2.4	Modèle d'Ising en champ moyen	8
3	Simulation du modèle d'Ising	9
3.1	Chaîne de Markov	9
3.2	Méthode de Monte Carlo et Algorithme de métropolis	10
4	Implémentation du Modèle d'Ising à deux dimensions	11
4.1	Description du modèle	11
4.2	Codage en python	11
4.3	Analyse des données obtenues	15
4.3.1	Evolution de l'énergie et de l'aimantation totales du réseau en fonction du nombre de générations avec $T = 5.0$ K	15
4.3.2	Variation de l'aimantation et de l'énergie totales en fonction de la température	17
4.3.3	Etat du réseau en fonction de la température	18
4.4	Antiferromagnétisme	20
5	Conclusion	21

Le modèle d'Ising est un modèle de physique statistique utilisé pour modéliser différents phénomènes dans lesquels des particules à deux états interagissent localement. Le modèle d'Ising du ferromagnétisme est un modèle sur réseau de moments magnétiques, dans lequel les particules sont toujours orientées suivant le même axe spatial et ne peuvent prendre que deux valeurs : +1 et -1 pour les spins. Ce modèle va nous permettre de simuler la transition de phase ferromagnétique-paramagnétique autour de la température de Curie d'un matériau fictif, le ferromagnétisme étant causé par les moments magnétiques de spins des électrons.

1 Paramagnétisme et ferromagnétisme

1.1 Paramagnétisme

Le paramagnétisme désigne en magnétisme le comportement d'un milieu matériel qui ne possède pas d'aimantation spontanée mais qui, sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, acquiert une aimantation orientée dans le même sens que le champ magnétique appliqué. Quand on retire le champ extérieur, les électrons reprennent une orientation aléatoire et l'aimantation disparaît. Le paramagnétisme résulte donc de l'alignement naturel des dipôles magnétiques dans le sens du champ magnétique extérieur. Il est très dépendant de la température car l'agitation thermique des électrons perturbent l'alignement des dipôles magnétiques. La loi de Curie formalise la dépendance de l'aimantation acquise en fonction de la température.

Exemples de matériaux paramagnétiques : l'aluminium, le platine, le manganèse.

1.2 Ferromagnétisme

Un matériau est ferromagnétique lorsqu'il porte une aimantation permanente ou de longue durée. Sa susceptibilité, notée χ_m , est strictement positive. Un corps ferromagnétique acquiert une aimantation forte lorsqu'il est plongé dans un champ magnétique et cette aimantation perdure après disparition du champ extérieur : c'est ce que l'on appelle le phénomène d'hystérésis. On produit donc les aimants permanents en immergeant un matériau ferromagnétique comme du fer, du cobalt ou un alliage de ces métaux dans un champ magnétique.

Le matériau se décompose en une multitude de petits domaines, appelés les domaines de Weiss, dont la taille varie entre 10 et 100 microns. Ces domaines sont séparés par des parois très fines, de l'ordre de 0.1 micron. Dans chaque domaine, les moments dipolaires magnétiques, que l'on assimile aux spins, sont tous orientés dans la même direction. Mais l'orientation de chaque domaine est différente. Sur le plan macroscopique, l'aimantation est nulle, les différentes orientations s'annulant en moyenne. A proximité des parois, les spins des domaines adjacents s'influencent mutuellement en fonction de leur distance.

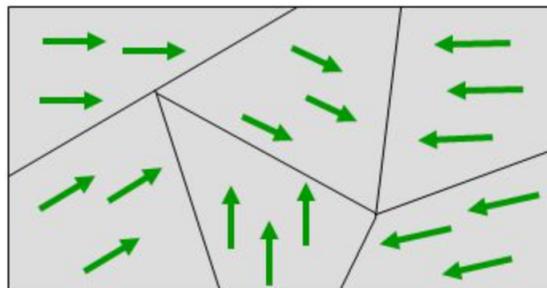


FIGURE 1 – Domaines de Weiss d'un matériau ferromagnétique

Lorsqu'un matériau ferromagnétique est immergé dans un champ magnétique extérieur, les spins de tous les domaines tendent à s'orienter dans la même direction que celle du champ extérieur. Les domaines dont l'orientation était proche de celle du champ extérieur grossissent au détriment des autres, les parois se modifient. Si le champ extérieur n'est pas trop fort et si le matériau ne présente pas trop de défauts, cette transformation est réversible, les domaines retrouvent leur place et leur dimension lorsque le champ disparaît. Si ce n'est pas le cas, si le champ est trop fort par exemple, alors la transformation devient irréversible et l'aimantation du matériau perdure, elle ne revient pas à une valeur nulle, on dit qu'elle est rémanente : c'est la création d'un aimant permanent.

1.3 Exemple de matériaux ferromagnétiques

L'aimant est un corps ferromagnétique dont le moment magnétique macroscopique permanent est :

$$\vec{M} = \sum \vec{m} \neq \vec{0}$$

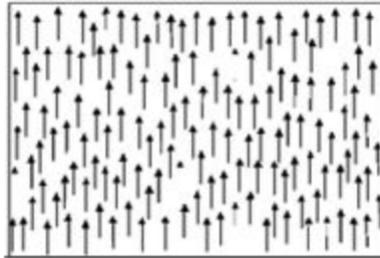


FIGURE 2 – Aimant

Le clou à base de fer est un corps ferromagnétique qui peut s'aimanter et dont le moment magnétique macroscopique est :

$$\vec{M} = \sum \vec{m} = \vec{0}$$

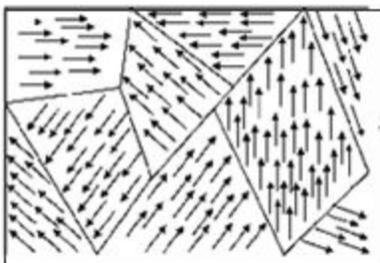


FIGURE 3 – Clou à base de fer

1.4 Transition de phase ferromagnétisme paramagnétisme

Le ferromagnétisme dépend de la température. Il existe en effet une température de Curie dépendante du matériau en dessous de laquelle il est ferromagnétique et au dessus de laquelle il devient paramagnétique. On appelle ce phénomène une transition de phase. Si l'on considère un matériau ferromagnétique doté d'une certaine aimantation et qu'il est chauffé au dessus de sa température de Curie, l'agitation thermique désorganise complètement l'agencement des domaines

de Weiss et l'aimantation disparaît. La transition de phase est, sous certaines conditions, réversible : en augmentant la température le matériau perd son aimantation, qu'il retrouve lorsque la température diminue et passe sous la température de Curie du matériau.

2 Modèle d'Ising

2.1 Un peu de physique statistique

En physique statistique, on est fréquemment amené à calculer des valeurs moyennes de grandeurs observables. Pour un système en contact avec un thermostat de température T , la probabilité d'un microétat μ dont l'énergie est E_μ est proportionnelle au facteur de Boltzmann :

$$p_\mu = Z^{-1} \exp\left(-\frac{E_\mu}{K_b T}\right) = Z^{-1} e^{-\beta E_\mu}$$

où T est la température du thermostat et K_b la constante de Boltzmann. Le dénominateur Z est la somme du facteur de Boltzmann pour tous les états :

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu}$$

La valeur moyenne ou l'espérance d'une grandeur physique Q est alors :

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{Z}$$

où Q_{μ} est la valeur de Q pour la configuration μ .

Remarque : Le nombre de microétats d'un système complexe est gigantesque. Par exemple pour un petit système formé de N particules pouvant prendre chacune 2 états (spin up et down par exemple), le nombre total de microétats du système est 2^N . Il est donc inenvisageable de calculer numériquement cette somme en cherchant à parcourir tous les microétats. Les méthodes de Monte-Carlo consistent à calculer ce type de somme en choisissant aléatoirement des termes de la somme.

Une première approche consiste à choisir les états aléatoirement avec une densité de probabilité uniforme, c'est-à-dire sans privilégier un état plutôt qu'un autre. Mais cette méthode est très inefficace car la majorité des états ont dans la distribution de Boltzmann une probabilité négligeable, leur énergie étant grande devant $K_b T$. Il faut donc choisir les états en favorisant ceux dont l'énergie est petite devant $K_b T$ car leur contribution dans la somme est plus importante.

Notons p_{μ} la probabilité de sélection d'un état μ et M le nombre d'états sélectionnés. Les états sont sélectionnés suivant la distribution de Boltzmann :

$$p_{\mu} = Z^{-1} e^{-\beta E_{\mu}}$$

Une première idée serait de choisir des configurations aléatoirement, toutes ayant la même probabilité. Dans le cas du modèle d'Ising, ce tirage ne pose pas de difficultés. L'espérance est alors évaluée par la moyenne empirique :

$$\langle Q_M \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M p_{\mu_i} Q_{\mu_i}$$

où p_{μ_i} est la probabilité de la configuration μ_i

Or p_μ n'est pas connue puisque c'est ce type de somme que l'on cherche à calculer. La solution consiste alors à tirer aléatoirement les échantillons avec la probabilité p_μ et non pas avec une probabilité uniforme. L'évaluation de l'espérance devient :

$$\langle Q_M \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}$$

2.2 Définition du modèle d'Ising

Ce modèle va nous permettre de simuler la transition de phase ferromagnétique-paramagnétique autour de la température de Curie d'un matériau fictif, le ferromagnétisme étant causé par les moments magnétiques de spins des électrons.

On considère N spins σ_i sur un réseau régulier, une grille en dimension 2 ou 3 par exemple. Les spins voisins interagissent avec une constante de couplage J , et sont soumis à un champ extérieur H . L'énergie d'une configuration est :

$$E_{\sigma_i} = -J \sum_{(i,j) \in V} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

où $(i, j) \in V$ désigne une paire de voisins.

Remarque : Si $\sigma_i = \sigma_j$ on a $\sigma_i \sigma_j = +1$. Le terme $-J \sigma_i \sigma_j = -J < 0$ correspond à une énergie négative donc une configuration favorisée. Et inversement, si $\sigma_i = -\sigma_j$ on a $\sigma_i \sigma_j = -1$. Le terme $-J \sigma_i \sigma_j = -J > 0$. Ce terme de couplage explique la possibilité d'une aimantation en l'absence de champ extérieur. On peut effectuer le même raisonnement avec la deuxième somme : si H et σ_i ont le même signe, l'énergie est négative donc la configuration est favorisée. Ainsi l'énergie totale est minimisée lorsque les spins sont dans le même sens et alignés avec le champ.

Le moment magnétique total du système que l'on cherchera à calculer est :

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

La valeur moyenne du moment magnétique est donc :

$$\langle M \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle = \frac{\sum_{\mu} M_{\mu} e^{\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{\beta E_{\mu}}}$$

où μ désigne une configuration des spins.

2.3 Modèle d'Ising à une dimension et matrice de transfert

La fonction de partition peut être calculée avec exactitude par la méthode de la matrice de transfert. On considère un réseau régulier de dimension 1, i.e. une chaîne, dont chaque site est défini par une variable scalaire de spin σ_i . On considère donc une chaîne linéaire de spins d'Ising, refermée sur un cercle et on impose des conditions aux limites périodiques :

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

L'hamiltonien du système, en présence d'un champ magnétique extérieur B s'écrit alors :

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

La fonction de partition canonique pour les 2^N termes est :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \exp(-\beta H)$$

Notons $K = \beta J$ et décomposons $\exp(-\beta H)$ de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \exp(-\beta H) &= (e^{K\sigma_1\sigma_2 + \beta B\sigma_1}) (e^{K\sigma_2\sigma_3 + \beta B\sigma_2}) \dots (e^{K\sigma_N\sigma_1 + \beta B\sigma_N}) \\ &= T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_N\sigma_1} \end{aligned}$$

Les $T_{\sigma_i\sigma_j}$ peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice puisque chaque σ_i peut prendre exactement deux valeurs $+1$ ou -1 . Cette matrice $T \in M_2(\mathbb{R})$ est définie de la façon suivante :

$$T = \begin{pmatrix} T_{+1+1} & T_{+1-1} \\ T_{-1-1} & T_{-1-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+\beta B} & e^{-K+\beta B} \\ e^{-K-\beta B} & e^{K-\beta B} \end{pmatrix}$$

Or on peut réécrire la fonction de répartition de la manière suivante :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \left(\sum_{\sigma_N} \left(\sum_{\sigma_{N-1}} \dots \left(\sum_{\sigma_2} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \right) \dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} \right) T_{\sigma_N\sigma_1} \right)$$

De plus, on remarque que

$$\sum_{\sigma_2} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} = T_{\sigma_1+1} T_{+1\sigma_3} + T_{\sigma_1-1} T_{-1\sigma_3} = \dots = (T^2)_{\sigma_1\sigma_3}$$

En sommant ainsi de proche en proche sur les spins $\sigma_2 \dots \sigma_N$, on obtient la fonction de partition canonique suivante :

$$Z = \sum_{\sigma_1} (T^N)_{\sigma_1\sigma_1}$$

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

Or les valeurs propres de T sont solutions de l'équation :

$$\lambda^2 - 2\lambda e^K \cosh(\beta B) + 2\sinh(2K) = 0$$

Les racines sont :

$$\lambda_{\pm} = e^K \cosh(\beta B) \pm [e^{2K} \sinh^2(\beta B) + e^{-2K}]^{\frac{1}{2}}$$

Comme on peut écrire $T = PDP^{-1}$ $T^N = PD^N P^{-1}$, on obtient :

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(T^N) \\ &= \text{Tr}(PD^N P^{-1}) \\ &= \text{Tr}(D^N) \\ &= \lambda_+^N + \lambda_-^N \end{aligned}$$

On remarque que l'aimantation moyenne m s'écrit comme une dérivée de F :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial B}$$

Donc pour calculer l'aimantation totale, on passe par l'énergie libre :

$$F = -k_B T \ln Z$$

On s'intéresse à la limite thermodynamique, c'est-à-dire qu'on veut calculer l'énergie libre par spin, dans la limite où le nombre de spins tend vers l'infini. Dans cette limite, l'énergie libre par site s'obtient par :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta N} \ln(Z_N) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \left(\ln \lambda_+ + \frac{1}{N} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right)$$

Le deuxième terme décroît exponentiellement en N car λ_- reste strictement inférieur à λ_+ , indépendamment de la température et du champ extérieur, à l'exception du point singulier $T = 0$ et $h = 0$ de sorte que :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[e^K \cosh \beta H + (e^{2K} \sinh^2(\beta B) + e^{-2K})^{\frac{1}{2}} \right]$$

D'où l'aimantation moyenne par site :

$$m = \frac{\sinh(\beta B)}{\left[\sinh^2(\beta B) + e^{-4K} \right]^{\frac{1}{2}}}$$

On en déduit aisément la susceptibilité magnétique en champ nul :

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_{B=0} = - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial^2 B} \right)_{B=0} = N \beta e^{2K}$$

La susceptibilité reste finie à toute température non nulle. Il ne peut pas apparaître de singularité à température finie et donc pas de transition de phase.

2.4 Modèle d'Ising en champ moyen

En dimensions 1 et 2 le problème est résoluble même si les calculs permettant de parvenir à la solution sont un peu techniques. Mais à partir de la dimension 3, le problème n'est toujours pas résolu. Une approximation possible est de supposer que chaque spin ressent un champ effectif de ses voisins. Notons $m = \langle \sigma_i \rangle$ l'aimantation moyenne (indépendante du spin). D'après l'hypothèse, on écrira $\sigma_i = m + (\sigma_i - m)$ en supposant que $(\sigma_i - m)$ petit. En négligeant $(\sigma_i - m)(\sigma_j - m)$, on peut obtenir une approximation de l'énergie à l'ordre deux. On note J la constante de couplage et H le champ extérieur.

Remarque :

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= [m + (\sigma_i - m)][m + (\sigma_j - m)] \\ &= m^2 + m(\sigma_i - m) + m(\sigma_j - m) + (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) \\ &\approx m^2 + m(\sigma_i - m) + m(\sigma_j - m) \end{aligned}$$

D'où,

$$\begin{aligned} E_{\sigma_i} &\approx -J \sum_{(i,j) \in V} (-m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j)) - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &\approx +\frac{1}{2} J z N m^2 - \frac{Jm}{2} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{(i,j) \in V} \sigma_i + \sum_{j=1}^N \sum_{(i,j) \in V} \sigma_j \right) - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &\approx \frac{1}{2} J z N m^2 - (H + z J m) \sum_{i=1}^N \sigma_i \end{aligned}$$

où z est l'indice de coordination, autrement dit le nombre de voisins de chaque site.

On en déduit la fonction de partition canonique Z ainsi que l'énergie libre F :

$$Z = \sum_{\sigma_i} e^{-\beta E_{\sigma_i}} = e^{-\frac{1}{2}\beta JzNm^2} \left(\sum_{\sigma=\pm 1} e^{\beta(H+Jzm)\sigma} \right)^N = e^{-\frac{1}{2}\beta JzNm^2} (2\cosh[\beta(H+Jzm)])^N$$

$$F = -K_b T \ln(Z) = \frac{1}{2} JzNm^2 - NK_b T \ln(\cosh[\beta(H+Jzm)]) - NK_b T \ln(2)$$

Or nous avons vu précédemment que m s'écrit comme une dérivée de F . Donc en dérivant l'expression de F , on obtient l'équation d'autocoherence :

$$m = \tanh[\beta(H+zJm)]$$

A champ nul, on a $\frac{zJm}{K_b T} = \operatorname{arctanh}(m)$. D'après le graphique généré en python ci-dessous, si $\frac{zJm}{K_b T} < 1$ il existe une unique solution $m = 0$ et si $\frac{zJ}{K_b T} > 1$ il y a existence de trois solutions. La température critique est donc donnée par : $T_c = \frac{zJ}{K_b}$. Si $T > T_c$, le matériau devient paramagnétique.

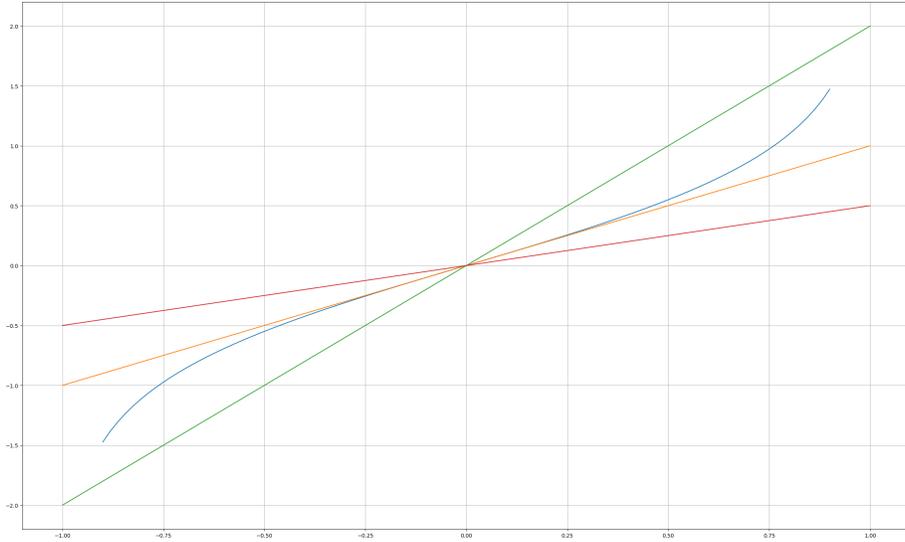


FIGURE 4 – Equations des courbes : $y = \operatorname{arctanh}(x)$ en bleu, $y = x$ en orange, $y = 2x$ en vert et $y = 0,5x$ en rouge

3 Simulation du modèle d'Ising

3.1 Chaîne de Markov

Une chaîne de Markov est une suite d'états générés aléatoirement tels que la probabilité de transition d'un état à l'autre ne dépend que de ces deux états. Notons $P(\mu \rightarrow \nu)$ cette probabilité. L'objectif est d'obtenir une chaîne d'états qui sont sélectionnés avec la distribution de Boltzman i.e. $P_\mu = Z^{-1} e^{-\beta E_\mu}$. La chaîne de Markov doit vérifier deux propriétés importantes :

1. L'ergodicité : tous les états du système doivent être accessibles, cela afin d'éviter que la chaîne ne parcourt qu'un sous ensemble des états possibles.

2. Le principe de l'équilibre détaillé : $P_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = P_\nu P(\nu \rightarrow \mu)$

Ce deuxième principe signifie que le nombre de passages de l'état μ vers l'état ν est en moyenne égal aux nombres de passages de l'état ν vers l'état μ . Dans le cas de la distribution de Boltzmann, cette condition s'écrit :

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

3.2 Méthode de Monte Carlo et Algorithme de métropolis

La probabilité de transition est décomposée de la manière suivante :

$$P(\mu \rightarrow \nu) = A(\mu \rightarrow \nu) S(\mu \rightarrow \nu)$$

Le premier terme S est la probabilité de sélection d'un état à partir du précédent. Le second terme est la probabilité d'acceptation de la transition. Dans la méthode de Metropolis originale, la probabilité de sélection est choisie constante : toutes les transitions sont équiprobables. La transition est une modification élémentaire du système, par exemple le déplacement d'un seul atome, ou le basculement d'un seul spin dans le modèle d'Ising. Il reste alors à établir des probabilités d'acceptation vérifiant :

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

La probabilité d'acceptation doit être la plus grande possible, afin d'éviter le rejet d'un trop grand nombre de transitions. Supposons que $E_\mu > E_\nu$. La probabilité d'acceptation la plus grande est celle de l'état μ vers l'état ν , c'est-à-dire celle de l'état de plus grande énergie vers l'état de plus faible énergie. Cette probabilité est choisie égale à la valeur maximale, c'est-à-dire 1. L'autre probabilité d'acceptation, celle de l'état de faible énergie vers l'état de forte énergie, est donc :

$$A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

Pour implémenter la méthode de Metropolis, il faut donc un générateur de nombres pseudo-aléatoires, pour l'étape de sélection et pour l'étape d'acceptation dans le cas où l'énergie augmente. L'algorithme permettant de passer d'un état à un autre dans la chaîne de Markov est le suivant :

1. Sélection d'une modification élémentaire de l'état du système : sélection d'un spin au hasard dans notre cas. Cette sélection doit respecter l'équiprobabilité de toutes les transitions.
2. Calcul de la variation d'énergie δE du système associée à cette modification.
 - (a) Si $\delta E \leq 0$, la transition sélectionnée est acceptée : le spin change de signe.
 - (b) Si $\delta E > 0$, un nombre réel aléatoire x est tiré avec une probabilité uniforme dans l'intervalle $[0,1[$.
 - i. Si $x < e^{-\beta\delta E}$, la transition sélectionnée est acceptée.
 - ii. Dans le cas contraire elle est refusée, le nouvel état est identique au précédent et le spin reste donc inchangé.

L'estimation de la moyenne est faite en utilisant la somme appliquée aux états de la chaîne de Markov. Pour chaque nouvelle configuration, on calcule le moment magnétique total M_k . Lorsque N configurations de spin ont été obtenues de cette manière, on calcule une estimation de la valeur moyenne par :

$$M_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_k$$

4 Implémentation du Modèle d'Ising à deux dimensions

4.1 Description du modèle

Les spins sont disposés sur un réseau bidimensionnel $N \times N$ à mailles carrées. Soit $\sigma_{i,j}$ le spin situé sur la ligne j et la colonne i . L'orientation de chaque spin sera notée $+1$ (up) ou -1 (down). Deux spins de même signe seront parallèles et anti-parallèles s'ils sont de signes opposés. Un spin interagit avec ses 4 plus proches voisins. La contribution à l'énergie des 4 paires est :

$$-J(\sigma_{i,j}\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j}\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j}\sigma_{i,j+1})$$

Pour simplifier, on applique des conditions périodiques de bords au réseau, c'est à dire que le réseau n'est pas un plan mais un tore.

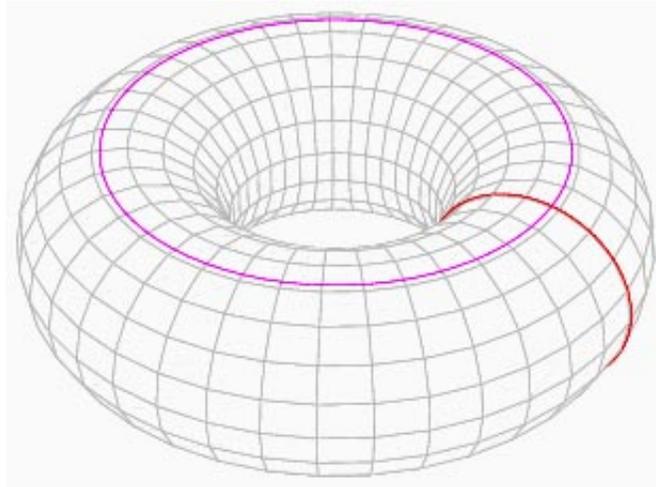


FIGURE 5 – Réseau torique

A une température T supérieure à la température de Curie T_c , les spins sont désordonnés : le matériau est paramagnétique. Si la température diminue progressivement, nous devrions observer une transition de phase i.e. une réorganisation des spins autour de T_c .

Dans notre modélisation, nous ferons un changement d'unité pour adimensionner l'équation et nous poserons $J = 1$ et $K_b = 1$.

Il est possible de calculer théoriquement la température de Curie pour un réseau de spins carré hors champ magnétique extérieur. En 1944, Lars Onsager a obtenu $T_c = \frac{2J}{K_b \ln(1+\sqrt{2})}$ soit sous nos hypothèses une température de Curie égale à 2,269 unités.

4.2 Codage en python

```
# importation des librairies
import time
from scipy import ones, exp, linspace
from numpy.random import random, randint
from matplotlib.pyplot import figure, grid, xlabel, ylabel, plot, show, title, axis
```

```

# Fonction d'initialisation du réseau de spins (matrice carrée de NxN)
def InitReseau(N):
    Res = ones([N,N],int) # tous les spins sont à 1
    return Res

# Fonction de calcul de l'énergie totale du réseau
def EnergieTotale(nw,n):
    energie = 0.0
    for i in range(n):
        for j in range(n):
            energie += nw[i][j]
    return -2*Je*energie

# Fonction de calcul de l'aimantation totale du réseau
def AimantationTotale(nw,n):
    aimantation = 0.0
    for i in range(n):
        for j in range(n):
            aimantation += nw[i][j]
    return aimantation/n**2

# Fonctions de calcul des variations
def DeltaE(nw,i,j,n):
    # calcul de la variation d'énergie
    Ev = nw[i-1][j] + nw[(i+1)%n][j] + nw[i][j-1] + nw[i][(j+1)%n]
    return 2.*Je*Ev*nw[i][j]

def DeltaM(nw,i,j,n):
    # calcul de la variation d'aimantation
    return -2.*nw[i][j]/n**2

# Fonction d'évolution du réseau de spin avec condition de Metropolis
def EvolSpin(nw,n,Temp):
    # choix aléatoire du spin à faire varier
    i = randint(0,n-1)
    j = randint(0,n-1)
    # calcul des variations d'énergie et d'aimantation
    dE = DeltaE(nw,i,j,n)
    dM = DeltaM(nw,i,j,n)
    # application de l'algorithme de Metropolis
    if random() < exp(-dE/(Kb*Temp)):
        nw[i][j] = -nw[i][j] # inversion du spin
    else:
        dE = dM = 0
    return [nw, dE, dM]

# Définition du réseau (N,N) avec la valeur initiale des spin = 1
N = 20
Reseau = InitReseau(N)
Gen = 2000
Energie = []
Aimantation = []

```

```

# Paramètres physiques de la manip
Kb = 1. # constante de Boltzmann
Je = 1. # constante d'échange
T = 5.0 # température initiale
Er = [EnergieTotale(Reseau,N)] # énergie initiale du réseau
Ai = [AimantationTotale(Reseau,N)] # aimantation initiale du réseau

# boucle d'équilibre thermique à T
for i in range(Gen):
    Reseau,dE,dM = EvolSpin(Reseau,N,T)
    Er.append(Er[i]+dE)
    Ai.append(Ai[i]+dM)

# affichage
figure(1)
grid(True)
xlabel('Generation')
ylabel('Energie')
plot(Er)

figure(2)
grid(True)
xlabel('Generation')
ylabel('Aimantation_moyenne')
plot(Ai)

show()

# Vecteur Temperature pour test
Temperature = linspace(T,0.1,99)
# liste de 5 à 0.1 avec un pas de 0.05

# Variables pour sauvegarde du réseau aux températures sélectionnées
TempSelection = (T,4.0,3.0,2.5,2.0,0.5)
ListeReseau = []

# boucle principale d'évolution du réseau en fonction de la température
for t in Temperature:
    # calcul de l'état du réseau pour une température donnée
    for i in range(Gen):
        # choix aléatoire du spin à faire varier
        i = randint(0,N-1)
        j = randint(0,N-1)
        # calcul des variations d'énergie et d'aimantation
        dE = DeltaE(Reseau,i,j,N)
        dM = DeltaM(Reseau,i,j,N)
        # application de l'algorithme de Metropolis
        if random() < exp(-dE/(Kb*t)):
            Reseau[i][j] = -Reseau[i][j] # inversion du spin
        else:
            dE = dM = 0.0
    Er = Er + dE

```

```

    Ai = Ai + dM
    Energie.append(Er)
    Aimantation.append(Ai)
    # sauvegarde du réseau pour les températures sélectionnées
    if t in TempSelection:
        ListeReseau.append(Reseau.tolist())
#n.tolist() transforme la matrice m en liste

# affichage
figure(1)
grid(True)
xlabel('Temperature')
ylabel('Energie')
plot(Temperature, Energie)

figure(2)
grid(True)
xlabel('Temperature')
ylabel('Aimantation_moyenne')
plot(Temperature, Aimantation)

# tracé des configurations du réseau pour les différentes températures
fig = figure(3)
for n in range(len(TempSelection)):
    axe = fig.add_subplot(3, 2, n+1)
    axe.set_xticklabels([]); axe.set_yticklabels([])
    axe.imshow(ListeReseau[n], origin='upper', interpolation='nearest')
    title('T= $\square$ %.1f'%TempSelection[n]);
    axis('tight')
show()

```

4.3 Analyse des données obtenues

4.3.1 Evolution de l'énergie et de l'aimantation totales du réseau en fonction du nombre de générations avec $T = 5.0$ K

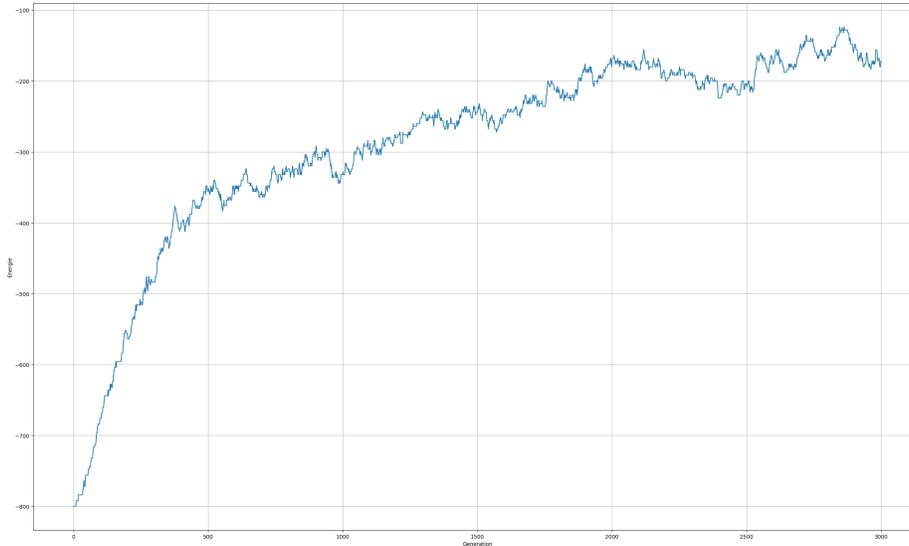


FIGURE 6 – Evolution de l'énergie totale en fonction du nombre de générations

La courbe tend vers une asymptote à l'équilibre thermique. La limite asymptotique est théoriquement égale à $-\frac{N^2}{2}$ lorsque la température est supérieure à la température de Curie. Avec nos valeurs initiales $N = 20$, on doit obtenir $E = -200$ ce qui est très proche de nos résultats expérimentaux.

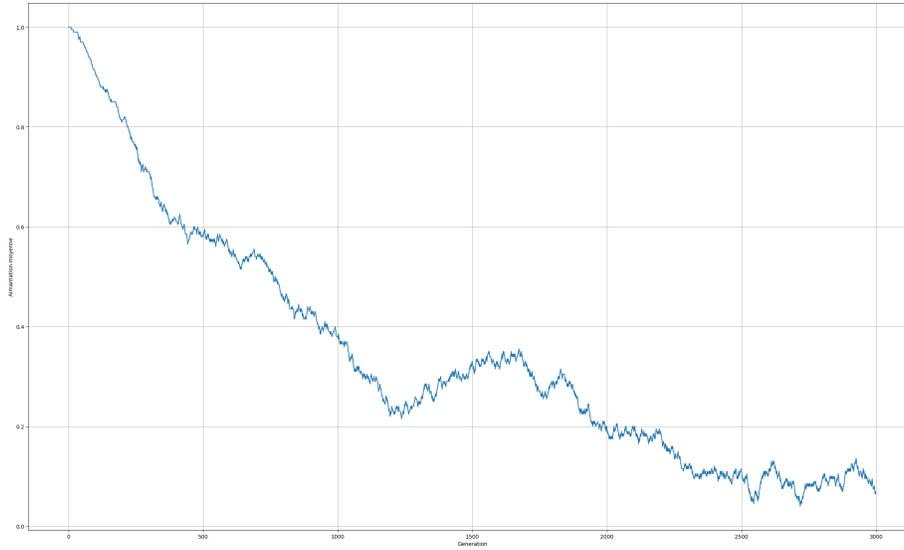


FIGURE 7 – Evolution de l'aimantation totale en fonction du nombre de générations

La température est supérieure à la température de Curie. L'aimantation globale du réseau décroît en fonction du nombre de générations et tend vers 0. Notre réseau est donc paramagnétique. Ce résultat est cohérent puisque $T > T_c$.

4.3.2 Variation de l'aimantation et de l'énergie totales en fonction de la température

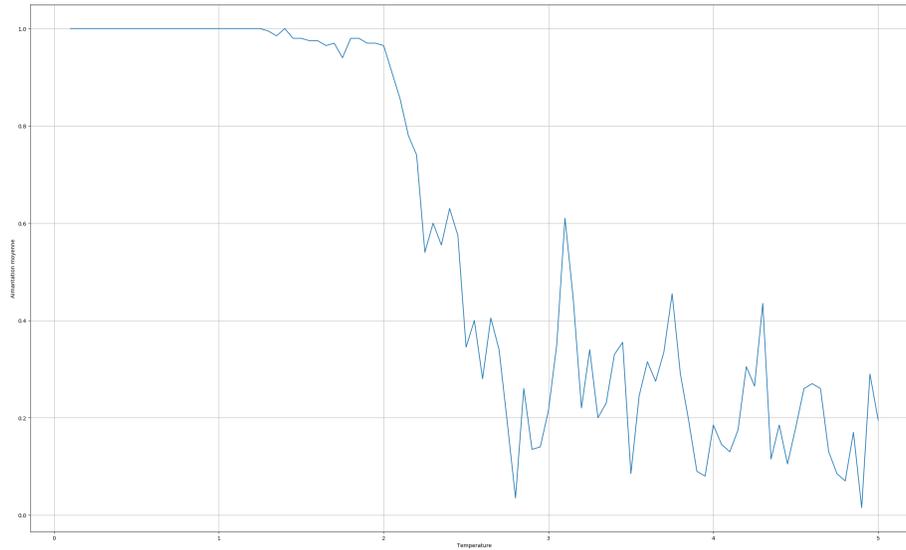


FIGURE 8 – Evolution de l'aimantation totale du réseau en fonction de la température

L'aimantation initiale de l'état ferromagnétique chute rapidement pour devenir pratiquement nulle au dessus de la température de Curie.

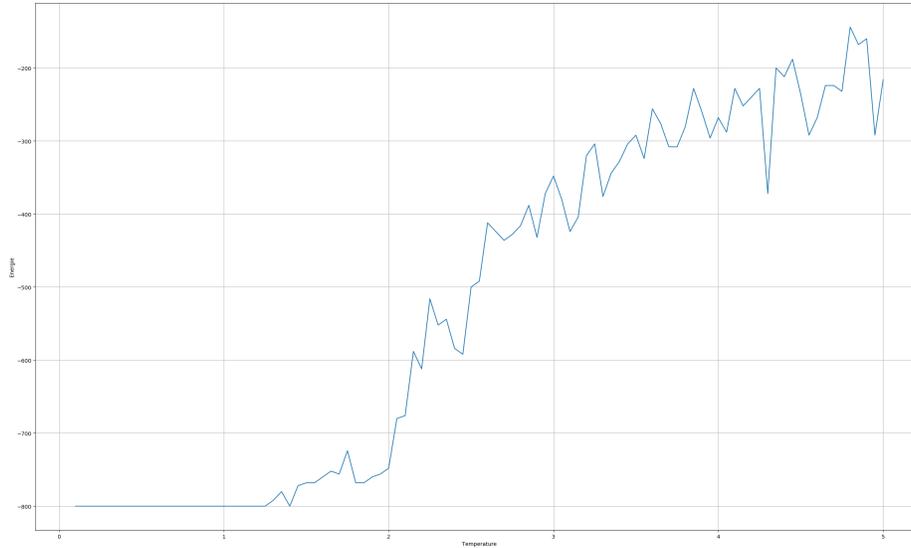


FIGURE 9 – Evolution de l'énergie totale du réseau en fonction de la température

D'après cette courbe, on peut estimer que le point d'inflexion ou température de Curie, est compris entre 2 et 2.5 unités, ce qui est un bon encadrement de la valeur théorique. Pour obtenir une meilleure approximation, il faudrait augmenter le nombre de générations mais les temps de calcul seraient beaucoup plus longs.

4.3.3 Etat du réseau en fonction de la température

Pour mettre en évidence une transition de phase, nous mesurons l'énergie et l'aimantation du réseau à l'équilibre thermique à différentes températures décroissantes. Pour quelques températures, sélectionnées autour de la température de Curie, on pourra même visualiser le réseau.

Voici l'évolution de l'état du réseau pour quelques températures variant autour de la température de Curie (2,269 unité) :

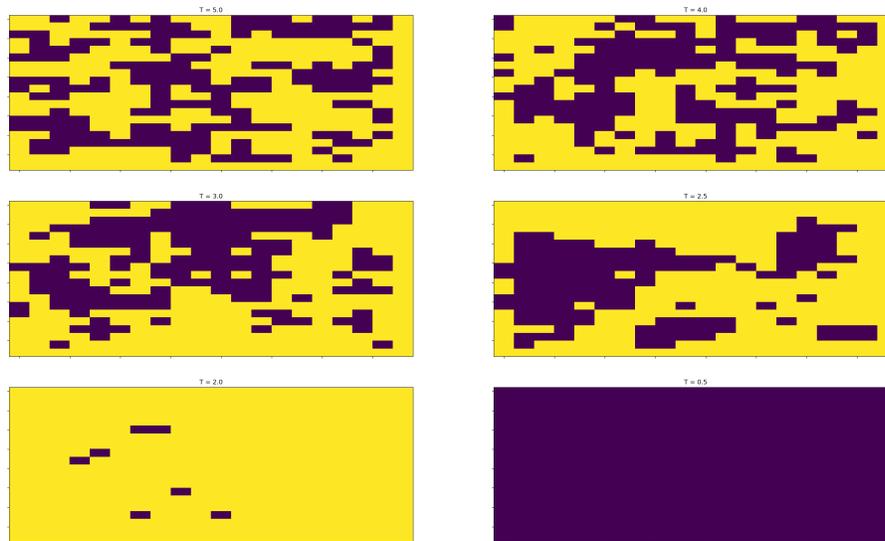


FIGURE 10 – Les spins up sont en violet et les spins down sont en jaune

On remarque qu'à "basse" température (par rapport à la température de Curie), tous les spins sont alignés dans le même sens (up) tandis qu'à "haute" température, le réseau est totalement désordonné. Le résultat obtenu illustre bien une transition d'état : le matériau passe de ferromagnétique à paramagnétique avec l'augmentation de la température.

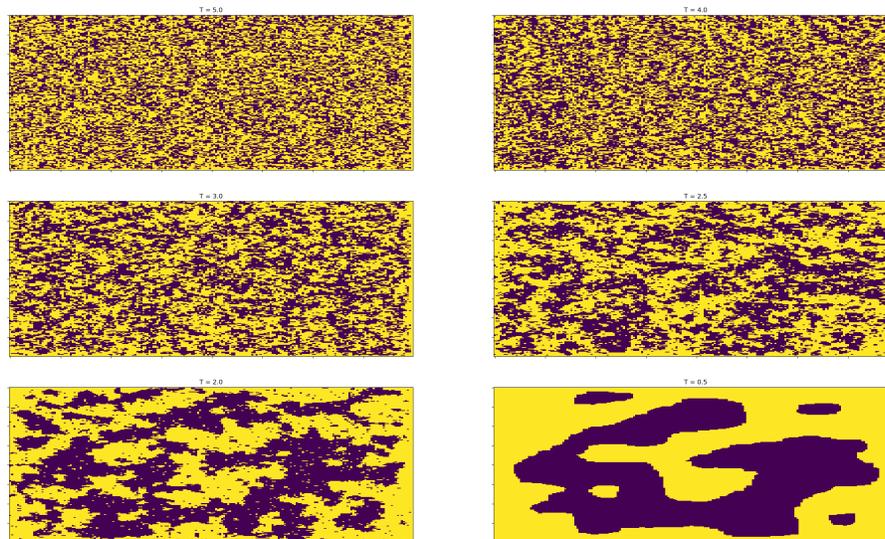
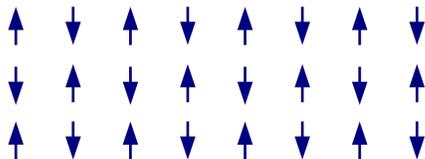


FIGURE 11 – Simulation avec $N=200$ et $\text{Gen}=200000$

Avec un plus grand nombre de générations, on peut même observer les domaines de Weiss à basse température.

4.4 Antiferromagnétisme

Dans certains métaux et oxydes, les atomes portent de petits aimants, les spins, qui s'organisent tête-bêche. Ces matériaux appelés antiferromagnétiques ne présentent plus de pôles même si ils sont aussi ordonnés qu'un vrai aimant. L'antiferromagnétisme est une propriété de certains milieux magnétiques. Contrairement aux matériaux ferromagnétiques, dans les matériaux antiferromagnétiques, l'interaction décharge entre les atomes voisins conduit à un alignement anti-parallèle des moments magnétiques atomiques. L'aimantation totale du matériau est alors nulle.



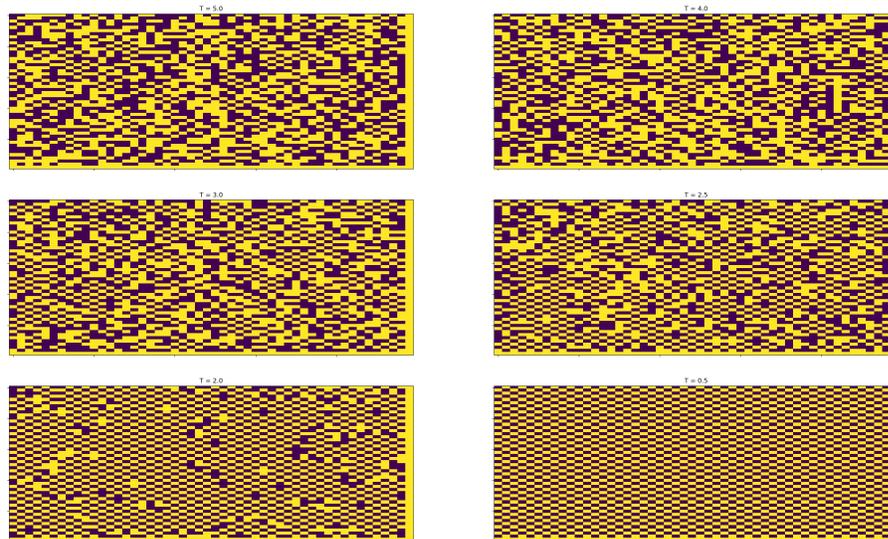
L'énergie d'une configuration sans champ extérieur est :

$$E_{\sigma_i} = -J \sum_{(i,j) \in V} \sigma_i \sigma_j$$

où $J < 0$

Tout comme les ferromagnétiques, ces matériaux deviennent paramagnétiques au-dessus d'une température de transition appelée température de Néel. En utilisant le même algorithme avec

$J = -1$, on obtient l'évolution de l'état du réseau pour quelques températures variant autour de la température de Néel :



On remarque qu'à "basse" température (par rapport à la température de Néel), tous les spins sont alternés tandis qu'à "haute" température, le réseau est totalement désordonné. Le résultat obtenu illustre bien la transition antiferromagnétique-paramagnétique avec l'augmentation de la température. Les spins fluctuent aléatoirement et ont la même chance d'être up ou down.

5 Conclusion

Le modèle d'Ising permet donc de décrire une transition de phase en physique. Malgré la simplicité du calcul à une dimension, le calcul à deux dimensions est plus complexe. Quant au calcul exact à trois dimensions par les méthodes traditionnelles, il est impossible. Outre la simplicité de l'interaction élémentaire, le spin d'Ising est un modèle très adapté aux simulations numériques sur ordinateur. On ne s'étonnera donc pas de la "popularité" d'un modèle. En effet il est utilisé dans de nombreux autres domaines que la physique statistique et la thermodynamique :

1. En biologie avec le développement des espèces adaptées et adaptables, cf. équilibres ponctués de Stephan Jay Gould.
2. En sociologie avec la tendance à la formation de grands domaines d'Ising tels que la mondialisation entrecoupée d'effondrements comme ceux de l'empire romain, des empires coloniaux ou encore du bloc soviétique.
3. En économie, le modèle d'Ising va traduire les mécanismes d'imitation entre les agents.

Ainsi, "La thermodynamique et la biologie sont les flambeaux indispensables pour éclairer le processus économique." (Nicholas Georgescu-Roegen, 1971).