

MODELE d'ISING 2D

On se propose d'étudier du point de vue numérique la transition de phase entre le ferromagnétisme (phase ordonnée) et le paramagnétisme (phase désordonnée) qui apparaît dans un matériau magnétique à une température critique.

Ce modèle décrit un ensemble de moments magnétiques localisés sur un réseau carré en 2D, toujours dirigés selon une direction de facile aimantation Oz, ne prenant que deux valeurs d'orientation possibles $\sigma=+1$ et $\sigma=-1$. Ce modèle permet de décrire relativement simplement le magnétisme des matériaux ferromagnétiques présentant une anisotropie très forte avec une direction privilégiée très marquée.

1. Un peu de Physique :

L'interaction entre moments qui tend à les aligner pour former des domaines magnétiques dans un matériau ferromagnétique est l'interaction d'échange. C'est une manifestation à l'échelle macroscopique des interactions électrostatiques entre les électrons des atomes voisins et du principe d'exclusion de Pauli.

Pour un ensemble de moments, le Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad \text{avec } J > 0 \quad (1)$$

où la double somme est restreinte au couple $\langle i, j \rangle$ d'atomes premiers voisins. Le facteur $\frac{1}{2}$ compense le double comptage des interactions d'échange.

On note que les interactions magnétostatiques entre moments magnétiques ont été délibérément oubliées pour simplifier le modèle.

A température nulle, comme $J>0$, le système se trouve dans un l'état d'énergie minimale lorsque tous les moments sont alignés. L'ordre magnétique tend à diminuer lorsque la température augmente. En effet à l'équilibre thermodynamique, l'énergie libre est minimale. Il y a compétition entre l'énergie d'échange qui favorise l'ordre et l'entropie qui favorise le désordre.

Au-delà de la température critique de Curie, l'ordre disparaît. L'ordre est mesuré par un paramètre d'ordre défini par $m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i$. Il est nul dans la phase paramagnétique ($T>T_c$) et est non nul dans la phase ferromagnétique ($T<T_c$).

On accède aux propriétés thermodynamiques en calculant l'aimantation moyenne

$$\langle m \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle, \text{ l'énergie interne } U = \langle E \rangle, \text{ la susceptibilité magnétique et la capacité}$$

thermique. Ces deux dernières quantités sont calculées en utilisant le théorème fluctuation-dissipation :

$$\chi_m = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{kT} \text{ et } C_v = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{(kT)^2}. \quad (2)$$

On supposera, de plus que la moyenne sur le temps est équivalent à la moyenne sur l'ensemble canonique, faite sur des échantillons statistiques indépendants.

2. Simulation de la température :

On met en œuvre l'algorithme de Métropolis qui permet d'atteindre un état d'équilibre thermodynamique d'un système en interaction avec un thermostat.

A chaque itération (pas de temps), on choisit un moment de manière aléatoire dont les coordonnées entières sont (i, j) sur le réseau carré. On calcule la différence d'énergie ΔE que pourrait provoquer son retournement, en ne tenant compte que de ses quatre premiers voisins, conformément à la définition du Hamiltonien (1).

Si ΔE est négatif, on retourne le spin car cela contribue à diminuer l'énergie totale du réseau. Si ΔE est positif, on choisit un nombre aléatoire r compris entre 0 et 1. Si $r < \exp(-\Delta E / kT)$, on retourne le moment localisé en (i,j) sinon on le laisse dans son état initial.

On itère le processus jusqu'à atteindre un état proche de l'équilibre thermodynamique.

Sans perdre en généralité, on utilisera des paramètres physiques normalisés, autrement dit une interaction d'échange $J=1$ et une constante de Boltzmann $k=1$.

3. Objectifs du projet :

Les trois principaux objectifs de ce projet sont de :

- développer un programme en C mettant en œuvre le modèle d'Ising. Pour ne pas être perturbé par les bords du système, on appliquera des conditions aux limites périodiques sur la distribution d'aimantation. On prendra une taille de réseau 50x50. Pour la génération de nombres pseudo-aléatoires, on utilise la librairie de calcul numérique GNU-gsl.
- montrer graphiquement, avec une première version de votre programme, l'évolution de la distribution de l'aimantation. On utilisera la librairie gfx.
- mener avec une seconde version en limitant les sorties graphiques, un ensemble de simulations avec différentes températures normalisées. On étudiera l'évolution des grandeurs physiques précitées comme le paramètre d'ordre en fonction du temps et le comportement de leur moyenne en fonction de la température. Il sera intéressant de comparer la valeur de la température critique avec celle obtenue analytiquement par Onsager, $T_c = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) = 2,269$.

Installation des librairies mathématique GNU-gsl :

A titre d'information et aussi pour vous permettre de développer un projet utilisant ces librairies sur des machines Unix autres que celles de l'école, on résume les opérations nécessaires pour installer la librairie GNU-gsl.

- 1^{er} cas : vous n'êtes pas l'administrateur de votre machine, autrement dit, vous ne pouvez pas vous connecter en tant que root :

Télécharger la librairie GNU-gsl `gsl-latest.tar.gz` depuis <https://www.gnu.org/software/gsl/>

`tar -xzf gsl-latest.tar.gz`

Placer vous dans le répertoire `gsl-2.X` puis taper :

`./configure --prefix=$HOME/extralib`

Lancer la compilation et l'installation dans le répertoire local de votre Home Directory :

`make ; make install`

Pour compiler un programme utilisant la GNU-gsl, il est nécessaire d'indiquer le répertoire des fichiers include `$HOME/extralib/include` et le répertoire où se trouve la librairie

`$HOME/extralib/lib`

`gcc -I $HOME/extralib/include pgm.c -o pgm -L $HOME/extralib/lib -lgsl -lgslcblas`

- 2^{ème} cas : l'administrateur de votre machine procède à l'installation de la librairie.
En se plaçant comme précédemment dans le répertoire `gsl-2.X`, exécuter **`./configure`** puis **`make`**.
L'installation s'effectue en mode administrateur. Connecter vous en tant que **root** et dans le répertoire `gsl-2.X`, taper **`make install`**