

La transition de phase ferromagnétique-paramagnétique.

B. Delattre

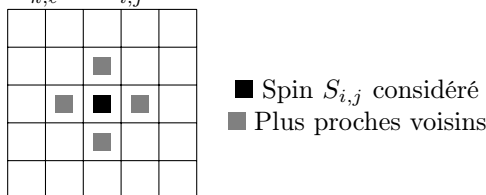
Présentation

Il existe une température critique appelée température de Curie (ex : $T_{Curie}(\text{Fer}) = 770^\circ\text{C}$) au-dessus de laquelle l'aimantation spontanée d'un matériau ferromagnétique disparaît.

- Le modèle le plus simple à deux dimensions est le modèle d'Ising. On considère un réseau carré $N \times N$ composé de N^2 spins $S_{i,j}$ pouvant prendre les valeurs ± 1 . En l'absence de champ magnétique extérieur, l'énergie du système est :

$$E = -J \cdot \sum_{i,j} S_{i,j} \cdot \left(\sum_{k,\ell} S_{k,\ell} \right)$$

(J est la constante de couplage, $J > 0$ pour une interaction ferromagnétique). La somme s'effectue sur les plus proches voisins $S_{k,\ell}$ de $S_{i,j}$.



- Nous allons utiliser un algorithme très général : l'algorithme de Monte-Carlo. Il peut s'appliquer à tout modèle pour lequel il est possible :
 - (i) de faire des modifications aléatoires du modèle (en général à partir d'un nombre fini de variables continues ou discrètes qui sont changées de manière aléatoire)
 - (ii) d'associer une variation d'énergie à chacune de ces modifications. L'algorithme procède alors de la manière suivante :

Soit une modification aléatoire envisagée qui transforme le modèle A_t en modèle A_{t+1} , associé à une variation d'énergie ΔE .

 - Si $\Delta E < 0$, la modification est acceptée.
 - Si $\Delta E > 0$, la modification est acceptée avec la probabilité $P = e^{-\frac{\Delta E}{k_B \cdot T}}$ où T est la température du système et k_B la constante de Boltzmann.

Il est facile de voir qu'une fois un état stationnaire atteint, la distribution des états générés $\{A_i\}$ correspond à une distribution de Boltzmann. N.B. : Un système est dans un état stationnaire si les variables le décrivant n'évoluent plus au cours du temps, ce n'est pas forcément un état d'équilibre.

Un réseau carré de dimension $N \times N$ spins (moments magnétiques) est traité comme un automate cellulaire, ainsi le spin $S_{i,j}$ est repéré par les coordonnées i,j . De plus, pour éviter les effets de bords dus à la taille finie du réseau, le système obéit à des conditions aux limites périodiques (toriques) de telle façon que :

$$\forall (k, \ell) \in \mathbb{Z}^2, \quad S_{k,\ell} = S_{k \% N, \ell \% N}$$

1 Etat initial du système

Pour simplifier on choisira $k_B = 1$ (constante de Boltzmann) et $J = 1$ (interaction ferromagnétique).

On prendra un réseau carré 300×300 et $T = 5$ K. La configuration de départ est fixée en choisissant tous les spins égaux à $+1$.

1. Quelle est l'énergie initiale E_0 du système ?
2. Quelle est l'aimantation moyenne par spin initiale m_0 avec l'aimantation moyenne $m = \frac{1}{N^2} \cdot \sum_{i,j} S_{i,j}$?
3. Coder l'obtention de la matrice de spin de l'état initial.

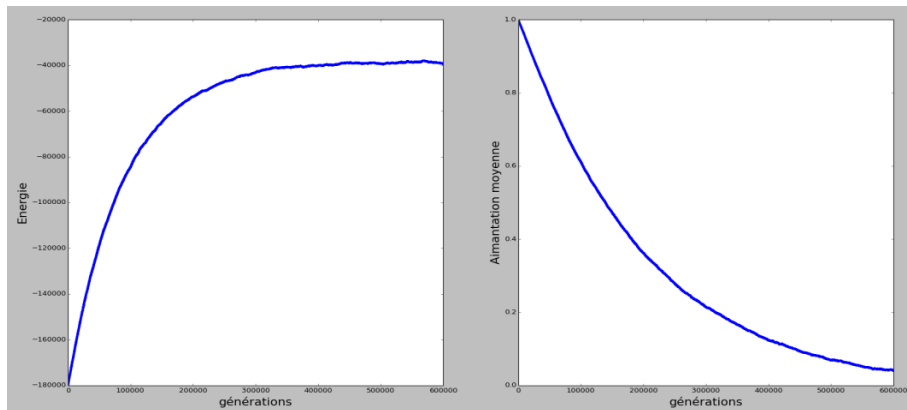
2 Evolution du système

Durant la dynamique, il faut modifier la configuration du système de façon modérée afin que la nouvelle configuration puisse être acceptée avec une probabilité raisonnable pour ne pas la piéger dans un puits de potentiel non optimal.

Pour réaliser cette condition, un seul spin, choisi de manière aléatoire, est possiblement modifié à chaque itération selon le principe de Monte-Carlo.

Soit E_n l'énergie du système à la $n^{ième}$ génération.

4. En supposant que le spin $S_{i,j}$ est retourné (passage de $+1$ à -1 ou de -1 à $+1$), Calculer la variation d'énergie ΔE telle que $E_{n+1} = E_n + \Delta E$. Calculer également Δm , telle que $m_{n+1} = m_n + \Delta m$.
5. A l'aide de la fonction `random()` de la bibliothèque `random` et de l'algorithme de Monte-Carlo, trouver une inégalité faisant intervenir ΔE qui, si elle est satisfaite, aboutit à un retournement du spin $S_{i,j}$ désigné aléatoirement et à une absence de modification du spin $S_{i,j}$ sinon.
6. Ecrire un script en important les modules nécessaires et en effectuant toutes les initialisations nécessaires permettant d'obtenir pour 600 000 générations (itérations) la liste des énergies E_n et la liste des aimantations m_n . *Attention à bien prendre garde aux conditions périodiques aux limites.*
7. Coder le tracé de l'énergie d'une part et de l'aimantation d'autre part en fonction des générations.
8. On obtient les évolutions ci-dessous. Commenter ces courbes. Pourquoi un temps de calcul si important ?



9. On fait évoluer la température de 5 K à 0,1 K par pas de 0,05 K. Le nombre de générations pour chaque température est de 10^6 . Pour éviter de remplir trop l'espace mémoire, les matrices concernant les valeurs de spins sont enregistrées (via la bibliothèque `pickle`) pour être rappelées ensuite et représentées graphiquement.

Pourquoi choisir 10^6 comme nombre de générations ?

10. On obtient les trois figures ci-dessous. Commenter précisément mais concisément chacune d'elles.

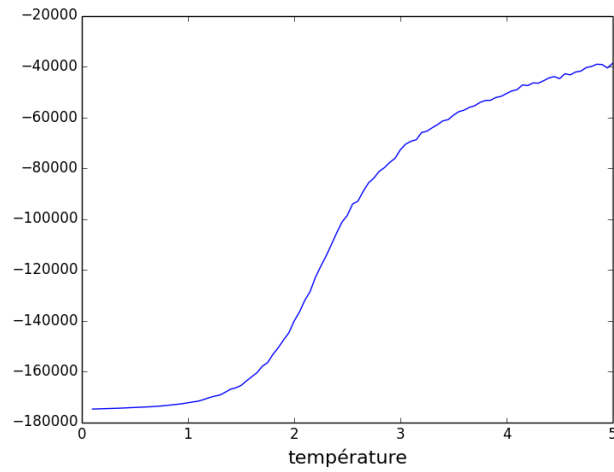


Figure A : Evolution de l'énergie en fonction de la température d'un réseau carré de 9.10^4 spins obtenu après 10^6 générations suivant l'algorithme de Monte-Carlo en partant initialement de spins tous égaux à $+1$.

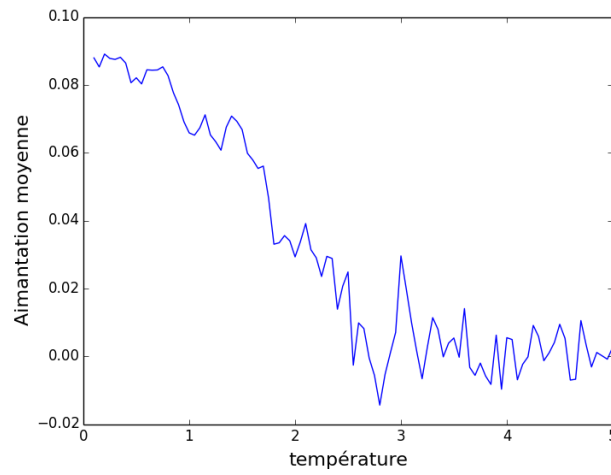


Figure B : Evolution de l'énergie en fonction de la température d'un réseau carré de 9.10^4 spins obtenu après 10^6 générations suivant l'algorithme de Monte-Carlo en partant initialement de spins tous égaux à $+1$.

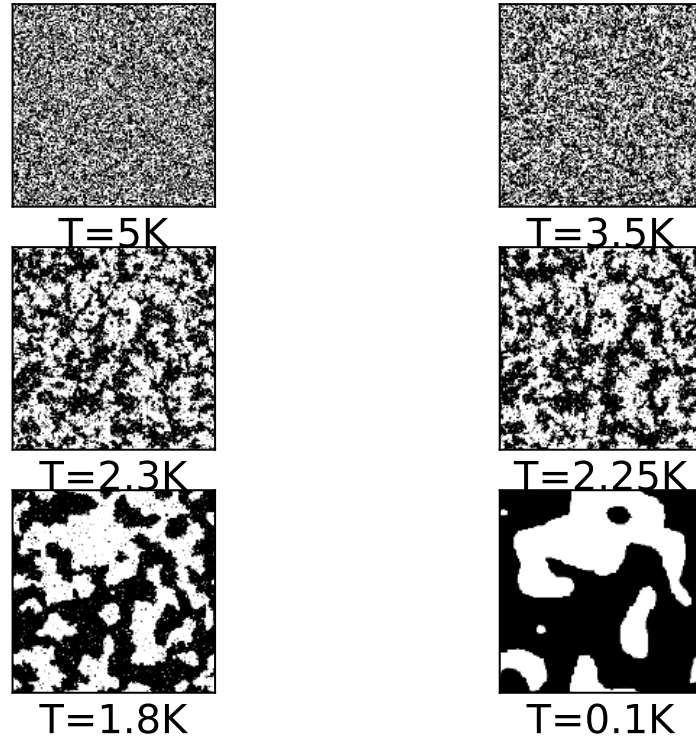


Figure C : Evolution en fonction de la température d'un réseau carré de 9.10^4 spins obtenu après 10^6 générations suivant l'algorithme de Monte-Carlo en partant initialement de spins tous égaux à $+1$.

Les zones noires correspondent aux spins haut de valeur $+1$ et les blanches aux spins bas de valeur -1 .

11. La résolution analytique du problème de la transition ferromagnétique-paramagnétique fait appel à des outils développés par la mécanique statistique. En 1944, Onsager a résolu ce problème à deux dimensions. Pour un réseau carré, il a montré qu'il existe une température de transition de phase et que sa valeur est :

$$T_c = J \cdot \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \simeq 2,27.J$$

Cette valeur est-elle en accord avec notre résolution numérique ?