

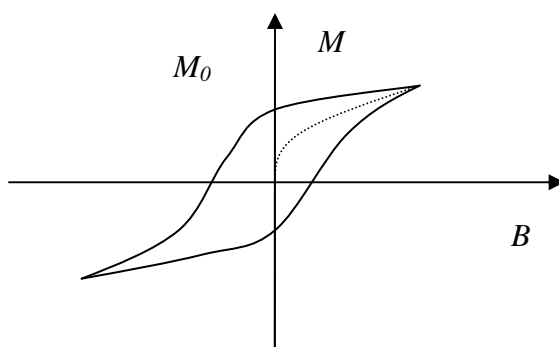
Modèle d'Ising

Tutoring 6 de Thermodynamique statistique/avril 2002

Jusqu'à présent, nous ne nous sommes intéressés qu'à des systèmes de particules indépendantes. La conséquence immédiate est que de tels systèmes présentent des fonctions de partition factorisables. Dans ce tutorat, nous allons nous intéresser à un système pour lequel les interactions entre les sous parties du système sont importantes. Plus précisément, nous nous intéresserons à la transition paramagnétique-ferromagnétique.

Le fait expérimental suivant est bien connu : un aimant attire un clou en fer, il est sans action sur un clou en laiton. Dans les deux cas, le champ magnétique induit une aimantation à l'intérieur du clou mais l'effet sur le fer est beaucoup plus important que sur le cuivre. Les corps qui se comportent comme le fer sont dit *ferromagnétiques*. Cependant, on sait que si on chauffe le clou au rouge, celui-ci ne sera plus attiré par l'aimant. Pour chaque corps ferromagnétique, il existe une température appelée température de Curie T_c , ou température critique, au-delà de laquelle le fer passe de ferromagnétique ($T < T_c$) à paramagnétique ($T > T_c$).

On peut étudier quantitativement le ferromagnétisme en mesurant l'aimantation M d'un barreau de fer en fonction du champ magnétique appliqué B_0 (uniforme et dirigé suivant l'axe du barreau). En général, l'aimantation du barreau est initialement nulle pour $B_0 = 0$. Lorsqu'on fait croître le champ, M augmente, lentement au départ, puis plus rapidement, pour finalement atteindre une valeur M_s appelé *aimantation à saturation*. On a ainsi fait décrire au matériau sa courbe de première aimantation. Si on diminue ensuite B_0 alors l'aimantation décroît par un autre chemin et on décrit un cycle d'hystérésis. En particulier l'aimantation ne s'annule pas lorsque le champ magnétique devient nul. La valeur de M qui subsiste M_0 est appelée *aimantation rémanente* ; c'est seulement pour une valeur du champ dirigé en sens inverse appelé *champ coercitif* que l'aimantation s'annulera à nouveau. Au dessus de la température de Curie, on n'observe pas de cycle d'hystérésis et la courbe aimantation en fonction du champ magnétique est celle que nous avons déjà étudiée.



En fait, pour expliquer cette courbe d'aimantation sur un barreau, P. Weiss a mis en évidence l'existence de domaines magnétiques qui existent en dessous de la température de Curie. Ces domaines ont la propriété essentielle de présenter une aimantation spontanée M_0 en dessous de la température de Curie et quand le champ magnétique augmente, les domaines dans le sens du champ croissent. Nous allons nous intéresser uniquement à la possibilité de création de ces domaines, c'est-à-dire que nous allons montrer pourquoi il est possible d'avoir une brisure de symétrie dans un cristal ferromagnétique, c'est-à-dire, pourquoi il est possible de faire apparaître

une aimantation spontanée en l'absence de champ magnétique. Nous allons montrer que ceci n'est possible qu'en dessous d'une température appelée température de Curie. Cette température caractérise une température de transition de phase entre une phase ordonnée (la phase ferromagnétique) et une phase désordonnée (la phase paramagnétique). La transition paramagnétique - ferromagnétique s'accompagne d'un changement de symétrie, qui peut être mesuré à partir de l'aimantation spontanée qui est donc le *paramètre d'ordre de cette transition de phase*.

De nombreuses propriétés macroscopiques des cristaux ferromagnétiques ont des comportements singuliers au voisinage du point critique. Il semble que ces singularités puissent s'écrire comme des puissances fractionnaires de l'écart $|T-T_c|$ à la température critique. En particulier il semble qu'au voisinage de la température critique, on puisse écrire des développements en loi de puissance fractionnaire pour l'aimantation spontanée, la capacité calorifique en champ nul, et la susceptibilité magnétique. Nous montrerons comment les modèles numériques où analytique peuvent reproduire ces exposants qui ne dépendent que très peu de la nature des matériaux utilisés.

1. Le problème à résoudre.

Considérons un ensemble de N particules occupant les N sites d'un réseau maintenu à la température T . L'ensemble occupe un volume V fixé et est soumis à un champ magnétique supposé uniforme \mathbf{B}_0 . \mathbf{B}_0 , T , V et N constituent l'ensemble des paramètres extérieurs, à partir desquels on cherche à déterminer les propriétés magnétiques du cristal : énergie magnétique moyenne, capacité calorifique associée, entropie... Dans le modèle que nous adoptons, nous supposons que le seul paramètre décrivant l'état d'une particule est son spin \mathbf{s} , et qu'il ne peut exister que dans deux $s = \pm \frac{1}{2} \mathbf{z}$. L'axe \mathbf{z} étant défini arbitrairement lorsque le champ magnétique extérieur est nul et porté par ce champ lorsque celui-ci est non nul (axe de quantification). Nous modélisons l'énergie d'interaction entre deux particules i et j de spin \mathbf{s}_i et \mathbf{s}_j selon la relation :

$$H_{ij} = -J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j$$

Où J_{ij} est un paramètre de couplage, qui est positif dans le cas du ferromagnétisme. C'est ici qu'on introduit une différence entre le paramagnétisme étudié précédemment et le ferromagnétisme. Nous supposons de plus que le couplage est isotrope $J_{ij} = J$ et, les interactions considérées étant de courte portée, nous les limiterons aux plus proches voisins. Nous notons γ le nombre de plus proches voisins d'une particule.

1. Sachant expérimentalement que la température critique du fer est de l'ordre de 1000K, montrer que l'interaction de spin, dite interaction d'échange, n'est pas une interaction dipolaire magnétique.

2. Modèle d'Ising en champ moyen, approximation de Bragg - Williams

Parmi les N sites du réseau, $N^+ = xN$ sont occupés par des particules de spin up, et $N^- = (1-x)N$ par des particules de spin down. Nous interprétons le paramètre x comme la probabilité qu'un site soit occupé par une particule de spin up. Dans cette approche macroscopique, nous admettons que le seul paramètre x définit complètement l'état du système. Dans cette approximation qui s'appelle approximation de Bragg - Williams, on néglige les corrélations entre sites. L'approximation de Bragg - Williams est donc une approximation de champ

moyen.

A. En champ nul

1. Calculer l'entropie $S(x)$ du système.
2. Calculer N^{++} le nombre de paires *up* - *up* de plus proches voisins, N^{+-} le nombre de paires *up* - *down* de plus proches voisins et N^{--} le nombre de paires *down* - *down* de plus proches voisins.
3. En déduire l'énergie $U(x)$ du système.
4. En déduire l'expression de l'énergie libre $F(x)$ du système. La valeur d'équilibre x_{eq} de x est celle qui minimise F . En déduire une équation intrinsèque vérifiée par x .
5. Montrer graphiquement, que ce modèle prévoit une température T_c en dessous de laquelle l'échantillon ne peut pas présenter une aimantation spontanée.
6. Représenter graphiquement et commenter les évolutions de F avec T pour $T < T_c$ et $T > T_c$.
7. Au voisinage du seuil, c'est-à-dire pour $T \sim T_c$, on a $x = \frac{1}{2} (1 + \epsilon)$, avec ϵ petit. Montrer grâce à un développement limité à l'ordre 4 que $\epsilon \sim \pm (1 - T/T_c)^{1/2}$. Tracer et étudier l'allure de la capacité calorifique C_0 à champ nul, de l'aimantation spontanée en fonction de T/T_c .
8. Montrer que $C = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)/kT^2$. En déduire qu'il y a bien une divergence des fluctuations d'énergie au voisinage de la température critique.

B. En présence d'un champ magnétique

On suppose qu'on ajoute un champ extérieur B_0 qui conduit à l'existence d'un champ B à l'intérieur de l'échantillon.

9. Exprimer l'énergie libre $F(x, B)$.
10. Représenter graphiquement les évolutions de F avec T , on supposera $B > 0$. Analyser à partir de ce graphique les conditions d'équilibre du système.
11. Calculer l'évolution de la susceptibilité magnétique avec la température.

3. Simulation Numérique de Type Monte Carlo du modèle d'Ising

Les problèmes posés par la physique statistique en général et le problème précédent sont bien trop compliqués pour être traités de façon analytique. Par exemple, dans le cas précédent, nous avons fait une approximation très forte dans laquelle nous avons dit que l'entropie du système était uniquement une entropie de mélange. Nous avons négligé les interactions spin – spin. Il est, en général, impossible de calculer la fonction de partition d'atomes en interaction. Pour obtenir des résultats numériques précis, il est souvent nécessaire d'avoir recours à des *simulations numériques*. Deux méthodes de simulation sont fréquemment utilisées:

- La dynamique moléculaire

Dans ce cas, on intègre numériquement les équations du mouvement de Newton, ce qui permet d'obtenir la trajectoire exacte du système considéré dans l'espace des phases. Cette méthode est utilisée quand on a besoin d'informations à la fois sur la thermodynamique et sur la dynamique du système (par exemple, pour déterminer

les coefficients de diffusion ou de transport ...) Toutefois, nous ne discuterons pas plus ce type de méthode.

- Les méthodes de Monte-Carlo

Dés lors que nous sommes intéressés uniquement par les quantités thermodynamiques (aimantation, densité, énergie...), nous pouvons inventer la dynamique de notre choix, dans la mesure où les différentes configurations de l'espace des phases sont correctement prises en compte. Dans les méthodes de Monte-Carlo, au lieu d'utiliser les équations du mouvement de Newton pour explorer l'espace des phases de façon déterministe, on utilise un algorithme *statistique* reposant sur le générateur de nombres aléatoires fourni par l'ordinateur. (La méthode doit son nom au fait que Monte-Carlo est un générateur réputé de nombres aléatoires). Ce faisant, on *perd la dynamique* du système réel ; toutefois cette méthode est beaucoup plus facile à implanter dans un programme que celle de la dynamique moléculaire.

Remarque: évidemment, un ordinateur ne produit pas vraiment des nombres *aléatoires* mais certaines méthodes permettent de produire des séries de nombres qui *semblent* aléatoires vis-à-vis des tests statistiques courants.)

Nous souhaiterions que vous essayiez d'utiliser un ordinateur pour réaliser une simulation numérique du système précédent. Dans un premier temps cherchez à comprendre la méthode de simulation dite de Monte-Carlo en lisant cet énoncé, puis cherchez un ordinateur type compatible PC, n'hésitez pas à mettre à contribution votre précepteur. Nous vous fournissons un exemplaire du programme en en Pascal, ces programmes vous permettent d'étudier une transition de phase dans le modèle d'Ising.

Vous avez une certaine liberté dans cette étude, vous pouvez par exemple

- réécrire un programme dans le langage de votre choix en incorporant l'effet d'un champ magnétique.
- faire une simulation à haute température, sauvegarder la configuration de spin et voir son évolution quand on baisse la température. (Ceci revient à faire une : trempe sur un alliage)
- Déterminer les corrélations spatiales des configurations de spins pour : différentes températures en dessous et au dessus de la transition...

Considérons l'équation maîtresse d'un système thermodynamique :

$$P_i(t+1) - P_i(t) = \sum_{j \neq i} W_{ij} P_j(t) - \sum_j W_{ji} P_i(t)$$

Où $P_i(t)$ est la probabilité que le système soit dans l'état i à l'instant t . W_{ij} peut être considéré comme une matrice agissant sur le vecteur P_i pour décrire l'évolution temporelle du système. Nous devons faire un choix pour le *taux de transition* W_{ij} pour que le système évolue aux temps longs vers la distribution de probabilité attendue. C'est-à-dire :

$$P_i(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \exp(-E_i / kT)$$

1. À l'équilibre, on a $P_i(t+1) = P_i(t)$. Montrer que si l'on choisit la condition de la balance détaillée $W_{ij} / W_{ji} = \exp(-(E_i - E_j) / kT)$, on retrouve bien la distribution de Boltzmann.
2. Avec cette énoncé, vous trouverez un listing d'un programme écrit en Pascal. Juste après le commentaire: *debut de la Simulation proprement dite* vous trouverez une boucle commençant par :

```
while count < nmt begin end
...
end
```

Cette *boucle* est effectuée nmt fois. Montrez que cette boucle est une implantation de la méthode de Metropolis, et que la distribution d'équilibre est donnée correctement. Montrer

aussi que les variables `energy` et `magnet` correspondent à l'énergie divisée par kT et à l'aimantation du système.

Faites marcher ce programme pour différentes valeurs de la variable ' $j_t = J / kT$ '. Historiquement ce système a eu une grande importance comme un exemple simple d'un système présentant une transition de phase du second ordre. Il est connu que cette transition se produit lorsque $j_t = \ln(2^{1/2} - 1)/2 = 0.440$. Dans le programme, la fonction `random(n)` est un générateur de nombre aléatoire, elle retourne un nombre entier uniformément distribué entre 0 et n .

Note : Pour faire une simulation, on utilise des conditions aux limites périodiques de telle façon que l'échantillon présente la géométrie du tore.