Tutorat N. 8: Introduction au modèle d'Ising
et à la transition férromagnétique

Le modèle d'Ising, imaginé en 1920 par le physicien allemand Wilhelm Lenz (Ernst Ising étant son étudiant), est une tentative de modélisation de la transition férromagnétique-paramagnétique qui se produit à une température dite *de Curie* dans des matériaux comme le fer. Cette transition est characterisée par le fait qu'au dessous de la temperature de Curie le système présente une aimantation non nulle même en absence de champ magnétique. Nous allons étudier ici ce modèle en dimension un, puis en champ moyen.

1. Modèle d'Ising en d=1 en absence de champ magnetique

On va trouver maintenant la solution exacte du modèle d'Ising en $d = 1$. Il s'agit donc de N spins S_i (avec $0 \leq i < N$) sur une chaîne avec conditions aux limites ouvertes. Le Hamiltonien est:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^{N-2} S_i S_{i+1} \tag{1}$$

a) Montrer que, quand on ajoute un spin, on obtient la relation suivante pour la fonction de partition: $Z_{N+1} = 2\cosh(\beta J) Z_N$.

b) En déduire la fonction de partition Z_N *du système, ainsi que l'énergie libre et l'énergie par spin.*

2. Modèle d'Ising en d=1 avec les matrices de transfert

Considérons (toujours à une dimension) le Hamiltonien avec un champ magnétique extérieur B. Avec condition aux limites ouvertes on a

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^{N-2} S_i S_j - B \sum_{i=0}^{N} S_i \tag{2}$$

et avec conditions aux limites périodiques on definit $S_N \equiv S_0$ et on a

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^{N-1} S_i S_j - B \sum_{i=0}^{N} S_i \tag{3}$$

a) Montrer que la fonction de partition avec condition aux limites périodiques peut s'écrire sous la forme:

$$Z_N = \sum_{S_0=\pm 1} \dots \sum_{S_{N-1}=\pm 1} f(S_0, S_1) f(S_1, S_2) \dots f(S_{N-1}, S_0) \tag{4}$$

et donner l'expression de f(x,y).

Nous allons maintenant utiliser une astuce de calcul qui va nous simplifier la tâche. Introduisons la matrice T (que l'on désigne sous le nom de *Matrice de Transfert*):

$$T = \begin{bmatrix} T_{++} & T+- \\ T_{-+} & T_{--} \end{bmatrix}, \quad avec \quad T_{\pm,\pm} = f(\pm 1, \pm 1) \tag{5}$$

b) Montrer que la fonction de partition peut s'écrire sous la forme:

$$Z_N = \sum_{S_0=\pm 1} T^N(S_0, S_0) = Trace(T^N) \tag{6}$$

avec

$$T = \begin{bmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-B)} \end{bmatrix} \tag{7}$$

Nous avons donc réduit le problème à un simple calcul de trace.

c) Calculer la fonction de partition et l'energie libre a N fixé en diagonalisant la matrice de transfert (à partir des deux valeurs propres λ_+ et λ_- de T, celles de T^N sont trivialement obtenues). Montrer que pour $N \to \infty$, seule la plus grande valeur propre compte et calculer Z_N et l'energie libre par spin,

$$f = \lim_{N\to\infty} -T/N \log Z_N \tag{8}$$

d) Démontrer l'identité suivante pour l'aimantation moyenne par spin $\overline{m} = N^{-1} \sum_{i=0}^{N-1} \langle S_i \rangle$: $\overline{m} = -\frac{\partial f}{\partial B}$. Calculer m dans la limite $N \to \infty$.

e) Répéter le calcul pour des conditions aux limites ouvertes. Montrer qu'au lieu de la trace on obtient $Z_N = v \cdot T^{N-1} v$ et donner l'expression du vecteur v. Montrer que dans la limite $N \to \infty$ on obient la même expression pour f en utilisant les conditions aux limites ouvertes ou périodiques.

f) Montrer que f et m sont des fonctions analytiques de B et T et que m s'annule pour $B = 0$ a toute temperature $T > 0$.

A cause de ce dernier point, Lenz et Ising ont conclu que leur modèle était trivial et non pertinent dans l'analyse de la transition férromagnétique. Nous savons aujourd'hui que la présence ou l'absence d'une transition de phase dépend crucialement de la dimension de l'espace.

3. Modèle d'Ising completement connecté

On considère maintenant un modèle d'Ising où chaque pair de spin est couplé. Le Hamiltonien est donc

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j}^{1,N} S_i S_j - B \sum_{i=0}^{N} S_i = -\frac{J}{2N} M^2 - BM \tag{9}$$

où $M = \sum_{i=0}^{N} S_i$.

a) Ecrire la fonction de partition du modèle. Noter que le nombre de configurations des spins qui donnent une aimantation M est $\binom{N}{(N-M)/2}$. En deduire que

$$Z_N = \sum_{M=-N}^{N} \binom{N}{(N-M)/2} e^{\frac{\beta J}{2N} M^2 + \beta BM} \tag{10}$$

b) Introduire l'aimantation par spin $m = M/N$. En utilisant la formule de Stirling, montrer que

$$Z_N \sim N \int_{-1}^{1} dm \, e^{-\beta N f(m)} \tag{11}$$

et donner l'expression de $f(m)$. En utilisant la méthode du point col[1], montrer que

$$f = \lim_{N\to\infty} -T/N \log Z_N = \min_{m\in[-1,1]} f(m) \tag{12}$$

c) Discuter la forme de la fonction $f(m)$. Montrer que pour $T > J$ et $B = 0$ le minimum de $f(m)$ est en $m = 0$, pendant que pour $T < J$ et $B = 0$ il y a deux minima en $m = \pm m^*$ avec $m^* \neq 0$. Montrer que l'equation qui permet de trouver la valeur de m correspondante au minimum de $f(m)$ a la forme

$$m = \tanh(\beta J m + \beta B) \tag{13}$$

Commenter cette relation.

d) En utilisant l'identité $\overline{m} = -\frac{\partial f}{\partial B}$, montrer que pour $B \neq 0$ l'aimantation moyenne $\overline{m}$ est la solution de l'equation (13), et montrer que $\lim_{B\to 0^\pm} \overline{m} = \pm m^*$.

On en deduit que ce système a une temperature de Curie $T_c = J$ et que au dessous de T_c l'aimantation reste non nulle même si on prend la limite de champ magnetique nul.

[1] http://fr.wikipedia.org/wiki/Méthode_du_point_col