

Introduction au modèle d'Ising et à la transition ferromagnétique

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 ferromagnétique-paramagnétique qui se produit à une température dite *de Curie* dans des matériaux comme le fer. Nous allons étudier ici ce modèle en champ moyen, puis en dimension un, et discuter ensuite brièvement le cas des dimensions supérieures.

Partie 1 : Modèle d'Ising dans l'approximation champ moyen

Considérons le modèle d'Ising. Il s'agit donc de N spins S_i sur un réseau (hyper-)cubique de dimension d . Le Hamiltonien est de la forme :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} S_i S_j \quad (1)$$

La somme porte sur les premiers voisins du réseau. Dans l'approximation champ moyen, on suppose que l'on peut remplacer le Hamiltonien par

$$\mathcal{H}_{CM} = -\frac{J}{2} \sum_i c S_i \bar{m} \quad (2)$$

où c est le nombre de voisins et \bar{m} l'aimantation moyenne d'un spin (d'où le nom de la méthode).

- a) Montrez que le nombre de voisins est $c = 2d$.
- b) Calculez l'aimantation \bar{m} d'un spin. Montrez que l'on obtient alors une équation auto-cohérente $\bar{m} = f(\bar{m})$.
- c) Montrez —graphiquement— que cette équation n'a de solutions non nulles qu'en dessous de $T_c = dJ/k$ que l'on appelle température de Curie.
- d) Montrez que si $T < T_c$, le cristal a une aimantation non nulle alors que si $T > T_c$, l'aimantation est nulle : le système subit une transition de phase. Donnez l'allure de l'aimantation en fonction de la température pour $T \leq T_c$ puis pour T proche de T_c . Tracez l'allure de cette aimantation en fonction de la température.

Partie 2 : Modèle d'Ising en $d=1$

Passons maintenant à la solution exacte du modèle en $d = 1$. Il s'agit donc de N spins S_i (avec $0 < i < N + 1$) sur une chaîne avec conditions aux limites ouvertes. Le Hamiltonien est toujours :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} S_i S_j \quad (3)$$

La somme portant sur les premiers voisins, on peut le réécrire sous la forme : $\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1}$.

- 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.
- c) L'énergie libre — ou ses dérivées — présentent-elles des singularités à température finie ? Qu'en déduisez-vous sur la présence ou l'absence d'une transition de phase ?

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 ferromagnétique. Nous savons aujourd'hui que la présence ou l'absence d'une transition de phase dépend crucialement de la dimension de l'espace. Nous voyons aussi ici que l'approximation champ moyen peut de phase être complètement fautive en basse dimension !

Partie 3 : Modèle d'Ising en dimension $d > 1$: l'argument de Peirls

Considérons maintenant le Hamiltonien précédent en toute généralité en dimension d . À $T = 0$, le système se trouve seulement dans son état fondamental, c'est à dire que les seuls états autorisés (dont les poids de Boltzmann sont non nuls) sont ceux où tous les spins sont dirigés vers le haut, ou bien vers le bas. Nous allons nous poser la question suivante : comment cela est t-il modifié quand nous avons une température non nulle, si petite soit-elle ? Ou plus précisément :

a) Étant donnée une configuration dans un (hyper-)cube de dimension d où tous les spins pointent dans la même direction, combien d'énergie cela coûte-il de retourner un spin ? et deux spins ? Si l'on retourne maintenant un gros amas compact (on dit aussi une gouttelette) d'un volume d'environ $\approx (a\ell)^d$ spins — et de taille caractéristique la où a est la maille du réseau — combien d'énergie faut-il payer en fonction de ℓ et d ?

On notera la dépendance de cette énergie avec ℓ par $E(\ell) \propto \ell^{\theta(d)}$. Si $\theta(d) > 0$, l'énergie nécessaire pour retourner une gouttelette de spins de taille ℓ augmente avec ℓ , mais pas si $\theta(d) \leq 0$.

b) Que vaut θ en $d = 1$? Comment pensez-vous que la valeur de θ et la présence d'une phase avec aimantation non nulle soient reliées ? Y a-t-il selon vous une phase avec aimantation non nulle en $d = 2$? Et en $d = 3$?

Ces arguments sont heuristiques, mais peuvent être rendus rigoureux mathématiquement : cela fut fait par Rudolf Peirls en 1937. Si l'on veut cependant calculer exactement Z , il est malheureusement très difficile d'aller plus loin en dimension finie. En 1949 Lars Onsager a résolu le modèle d'Ising en $d = 2$ en champ magnétique nul (et a démontré la de phase présence d'une transition de phase à température finie) et l'on pas pas vraiment fait beaucoup mieux depuis.

Il existe heureusement tout un arsenal d'approximations et de méthodes pour aller plus loin dans l'étude des transitions de phase magnétique (simulations numériques et méthodes monte-carlo, calculs de champ moyen, méthodes variationnelles, développements hautes et basses températures, théorie de la renormalisation, invariance d'échelle, théorie conforme etc...)

Pour aller plus loin : Modèle d'Ising en d=1 avec les de phase matrices de transferts

Passons enfin à un calcul un peu moins trivial et considérons (toujours à une dimension) le Hamiltonien avec un champ magnétique extérieur B :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} S_i S_j - B \sum_i S_i \quad (4)$$

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

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} f(S_1, S_2) f(S_2, S_3) \dots f(S_N, S_1) \quad (5)$$

et donner l'expression de $f(x,y)$. On supposera des conditions aux limites périodiques et les spin sur une chaîne fermée.

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*) :

$$T = \begin{bmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{bmatrix}, \quad \text{avec} \quad T_{\pm,\pm} = f(\pm 1, \pm 1) \quad (6)$$

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

$$Z_N = \sum_{S_1=\pm 1} (T^N) = \text{Trace}(T^N) \quad (7)$$

avec

$$T = \begin{bmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta J} \\ e^{\beta J} & e^{\beta(J-B)} \end{bmatrix} \quad (8)$$

Nous avons donc réduit le problème à un simple calcul de trace! En diagonalisant la matrice de transfert, il est maintenant possible de calculer l'énergie libre du système puisqu'à partir des deux valeurs propres λ_+ et λ_- de T , celles de T^N sont trivialement obtenues. De plus, pour $N \rightarrow \infty$, seule la plus grande valeur propre compte et donc $Z = \lambda_{max}^N$.

c) Montrer pourquoi cette dernière assertion est vraie. Calculez Z et F . Démontrer l'identité suivante pour M , l'aimantation moyenne par spins $M = \langle S \rangle / N$: $M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \log Z$. Vérifiez que pour $B = 0$, il n'y a pas de transition de phase.

Étudions à présent les effets de taille finie, c'est à dire le comportement du système quand la taille N est finie et comment la limite $N \rightarrow \infty$ est atteinte.

e) En tenant compte cette fois des deux valeurs propres, montrer que l'on peut écrire l'énergie libre $F_N = N f_\infty + g(N/\xi)$, où f_∞ est l'énergie libre par spins quand $N \rightarrow \infty$ et où $\xi = 1/\log \frac{\lambda_+}{\lambda_-}$. Calculer explicitement la fonction $g(x)$ ainsi que ξ quand $B = 0$.

Il apparaît une longueur dépendante de la température $\xi(\beta)$. On appelle ξ la longueur de corrélation. La formule précédente montre bien que les effets de taille finie disparaissent quand $N \gg \xi$.

f) Calculer la susceptibilité magnétique $\chi = \partial M / \partial B$ à champ nul. Montrer qu'elle est reliée à la longueur de corrélation à grand β par $\chi(\beta) = 2\beta \xi(\beta)$.

Ainsi la divergence de la susceptibilité est associée à celle de la longueur de corrélation. Ces résultats sont en fait tout à fait généraux et très représentatifs des transitions de phase continue (on dit aussi de second ordre).