

Le modèle d'Ising de la transition ferromagnétique

Le modèle d'Ising, imaginé en 1920 par le physicien allemand Wilhelm Lenz (Ernst Ising étant son étudiant), est une 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 dans plusieurs cas : tout d'abord en dimension un, puis dans une version champ moyen évoluée, et enfin en dimension deux.

Dans le modèle d'Ising, on a N spins S_i , pouvant prendre les valeurs ± 1 , sur un réseau (hyper-)cubique de dimension d . Le Hamiltonien, ou la somme porte sur les premiers voisins du réseau, est :

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

1 : La chaîne d'Ising en dimension un

La fonction de partition est simple à calculer en dimension $d = 1$. Il s'agit alors de N spins S_i (avec $0 < i < N+1$) sur une chaîne avec conditions aux limites ouvertes. La somme portant sur les premiers voisins, on peut donc réécrire le Hamiltonien sous la forme : $\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1}$.

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

b) En déduire, par récurrence, la fonction de partition Z_N du système.

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.

2 : Le modèle d'Ising dans l'approximation de Bethe

Vous avez déjà vu dans le cours l'approximation de champ moyen. Une approximation similaire, donnant de meilleurs résultats, est celle de l'arbre de Hans Bethe. Considérons un modèle d'Ising sur un réseau régulier en dimension d . Il est clair que le nombre de voisins est $c = 2d$.

Nous allons maintenant considérer le modèle sur un *arbre* tel que représenté par la figure suivante. Un arbre est un réseau sans boucle dans lequel chaque spin est connecté à $c = 2d$ autres spins, et qui peut être construit de manière itérative comme illustré. L'avantage des modèles sur arbres, c'est que l'on peut les résoudre par une méthode itérative similaire à celle utilisée en dimension une.

La méthode marche comme suit : On construit l'arbre jusqu'à la génération k . Imaginons que nous connaissons les champs effectifs h_1, h_2, h_3 sur les spin S_1, S_2, S_3 quand le spin S_0 n'est pas (encore) présent. Si la probabilité que un spin prenne la valeur s est $P(s)$, le champ effectif h est défini par

$$P(s) = \frac{e^{\beta h s}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}} \quad (2)$$

On rajoute maintenant les spins de la génération $k + 1$ (c'est à dire le spin S_0 dans notre cas, voir image) et on veut calculer le champ effectif h_0 sur S_0 . Puisqu'il s'agit de somme de contributions de chaque voisins, écrivons $h_0 = \sum_{i=1}^{c-1} u_i$, ou u_i est le champ due à l'influence du spin S_i sur le spin S_0 .

a) Montrer que

$$\tanh \beta u_i = \tanh \beta J \tanh \beta h_i \quad (3)$$

b) Dans un arbre infini, on s'attend à ce que h_i ne dépende pas de i . Montrez que cela permet d'écrire une équation auto-consistante pour sur les h_i . Montrez que cette équation n'admet de solution non triviale (non nulle) qu'en dessous d'une certaine température que l'on calculera

On voit apparaître ici un résultat tout à fait intéressant (on pourra par exemple comparer ces valeurs à celles trouvées dans les simulations . En particulier, cette approximation suggère la présence d'une transition de phase pour toute dimension supérieure ou égale à deux.

3 : Calcul exact de la température critique (Kramers-Wannier dualité)

Nous passons à présent à deux dimensions, et nous allons re-écrire la fonction de partition de deux manières différents, ce qui va nous permettre d'obtenir une expression exacte de la température critique.

- a) Développement basse température : Quelles sont les configurations qui contribuent le plus à la fonction de partition à basse température ? Quelles sont les premières corrections ? Re-écrivez de manière symbolique la fonction de partition en incluant toutes les corrections à l'aide d'une somme "abstraite".
- b) Développement haute température : Considérez l'identité :

$$e^{\beta J S_i S_j} = \cosh \beta J + S_i S_j \sinh \beta J \quad (4)$$

Exprimer la fonction de partition en utilisant cette identité. Développer la somme et montrer que seule certaines configurations sont autorisées (remarquez quand la somme $\sum_{\{s\}} S_1^{n_1} S_2^{n_2} \dots S_N^{n_N}$ est non nulle). Quelles sont les termes les plus important si la température est très haute ?

- c) Dualité : Remarquez la similarité dans les deux expressions. Si β est la température dans le développement à haute température, et β^* dans celui à basse température, quelle est la relation entre $Z(\beta)$ et $Z(\beta^*)$ quand $e^{-2\beta^* J} = \tanh \beta J$?

d) La transition de phase : elle est reliée à une non-analyticité dans l'énergie libre. Si l'énergie libre est non analytique à la température inverse β , que se passe-t-il à la température inverse β^* ? Si il n'y a qu'une seule non-analyticité, quelle est la température critique ?

Si l'on veut 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 l'on n'a pas vraiment fait beaucoup mieux depuis.

Il existe heureusement tout un arsenal d'approximations et de méthodes pour aller plus loin (simulations numériques, méthodes variationnelles, développements hautes et basses températures, renormalisation, théorie conforme etc...). Comparez par exemple votre température critique obtenue sur l'arbre avec celle exacte en $2d$, et avec $\beta_c J(3d) \approx 0.22$ obtenue par des simulations Monte-Carlo. Que pensez-vous de la performance de l'approximation de Bethe ?