

## 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.

Dans le modèle d'Ising, on a  $N$  spins  $S_i$ , pouvant prendre les valeurs  $\pm 1$ , 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 : Un calcul équivalent avec des "champs effectifs"

Nous allons maintenant redériver ce résultat d'une manière similaire, ce qui sera très utile pour la suite.

a) *Considérons un spin unique dans un certain champ magnétique  $h$  avec un Hamiltonien*

$$\mathcal{H} = -Sh \quad (2)$$

*Calculez la magnetisation  $m = \langle S \rangle$  du spin en fonction de  $\beta$  et de  $h$  et montrez que  $m = \tanh(\beta h)$ .*

b) *Considérons deux spins  $S_1$  et  $S_2$  avec l'Hamiltonien*

$$\mathcal{H} = -S_1 h - JS_1 S_2 \quad (3)$$

*Calculez la magnetisation moyenne de  $m_2$  et montrer qu'elle correspond à celle qu'aurait un spin unique dans un champ effectif*

$$h_{eff} = \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh}(\tanh(\beta J) \tanh(\beta h)) \quad (4)$$

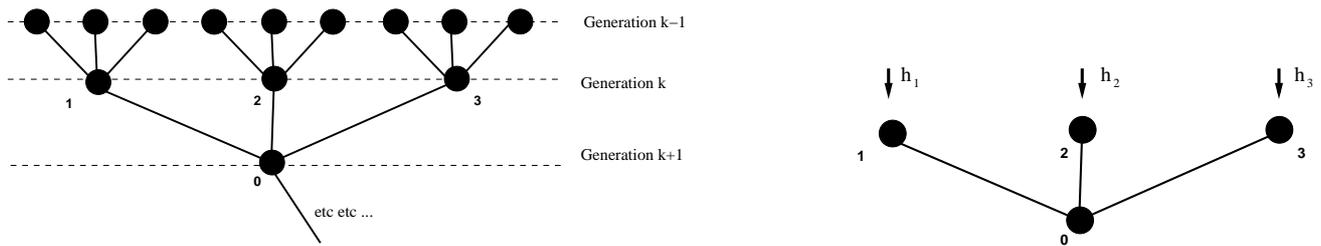
c) *Si l'on construit de façon recursive la chaîne, on aura donc un champ effectif sur le  $n + 1$ em spin qui vaut  $h_{i+1} = \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh}(\tanh(\beta J) \tanh(\beta h_i))$*

*Si l'on suppose que, pour un grand système ;  $h$  devient independant de  $i$ , il faut donc trouver le point fixe de cette equation. Montrez cependant qu'elle n'admet alors qu'une seulee solution  $h = 0$  pour toute temperature positive. En déduire, encore une fois, l'absence de phase ordonnée à  $T > 0$ .*

### 3 : Le modèle d'Ising dans l'approximation de Bethe

Vous avez déjà vu dans le cours l'approximation de champ moyen de "Curie-Weiss". Une approximation similaire, donnant pourtant de bien 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

$$P(s) = \frac{e^{\beta h s}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}} \quad (5)$$

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 du à l'influence du spin  $S_i$  sur le spin  $S_0$ .

a) *Montrer encore que*

$$\tanh \beta u_i = \tanh \beta J \tanh \beta h_i \quad (6)$$

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.

### 4 : Température critique en dimension 2

A deux dimensions, le modèle admet une solution exacte, mais un peu trop longue pour un tutorat ! Il existe heureusement tout un arsenal d'approximations et de méthodes pour aller plus loin.

*En utilisant les simulations Monte-Carlo sur <http://www.people.nnov.ru/fractal/perc/ising.htm> vérifiez qu'une transition de phase apparaît pour  $\beta_c J(2d) \approx 0.45$ . Des calculs similaires montrent que  $\beta_c J(3d) \approx 0.22$ . Comparez avec la température critique obtenue sur l'arbre. Que pensez vous de la performance de l'approximation de Bethe ?*