

## Notion de paramètre d'ordre

$$\eta = 2w_{Cu} - 1$$

Un paramètre d'ordre,  $\eta$  (éta), peut être défini

Où  $w_{Cu}$  est la fraction des sites  $(0, 0, 0)$  occupés par les atomes **Cu**.

$\eta = 0$  pour une distribution au hasard et  $\eta = 1$  pour une structure type **CsCl** complètement ordonnée

Du point de vue de la symétrie on a des éléments de symétrie présent dans le cas  $\eta = 0$  et oubliée pour  $\eta \neq 0$ , par exemple la translation  $(1/2, 1/2, 1/2)$  (c-à-d,  $(\vec{a}+\vec{b}+\vec{c})/2$ ) est une opération de symétrie uniquement quand  $\eta = 0$ .  
Expérimentalement, il a été vérifié que  $\eta$  varie donc avec la température. On définit donc un point critique qui sépare ces deux domaines de symétrie. C'est la température critique  $T_c$ .

La phase ordonnée, pour laquelle le degré d'ordre est différent de zéro est moins symétrique que la phase désordonnée : en effet, les deux sous-réseaux cubiques simples, équivalents dans la phase désordonnée ne le sont plus dans la phase ordonnée. On dit que la symétrie a été brisée ou encore qu'il y a eu violation de l'invariance par permutation des deux sous-réseaux. Le paramètre d'ordre est le paramètre physique nécessaire pour décrire l'ordre caractérisant la phase la moins symétrique, c'est à dire caractérisant la brisure de symétrie.

On peut citer d'autres exemples de processus ordre-désordre; l'ordre des lacunes dans la sous structure Sc du composé  $\text{Sc}_{1-x}\text{S}$  dans des plans alternés le long de la direction  $(1, 1, 1)$  des défauts de structure type-NaCl (changement de symétrie du  $Fm\bar{3}m$  au  $R\bar{3}m$  et l'ordre des lacunes de Cr dans l'alternance des plans des défauts  $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$  le long de l'axe c de défauts hexagonal ( $P6_3/mmc$ ) type-NiAs qui produit des défauts de structure type- $\text{CdI}_2$  ( $P\bar{6}m2$ ).

On peut aussi parfois définir un paramètre d'ordre (mais pas toujours) pour certaines transitions avec chaleur latente. C'est le cas par exemple du titanate de Baryum : le paramètre d'ordre de la transition para-ferroélectrique est la polarisation diélectrique. En effet, l'apparition d'une polarisation diélectrique dans la phase basse température brise la symétrie d'invariance par rotation de la phase haute température. Par contre, pour certaines transitions avec chaleur latente non nulle, il est impossible de définir un paramètre d'ordre. C'est le cas, par exemple, pour les transitions entre variétés polymorphes du soufre ou la transition liquide-gaz. Dans le premier cas, les symétries des deux phases sont différentes, mais on ne passe pas d'une phase à l'autre en perdant certains éléments de symétrie, ce qui est la condition nécessaire à la définition d'un paramètre d'ordre. Dans le deuxième cas, les symétries des deux phases sont identiques, et, là encore, il n'y a pas perte de certains éléments de symétrie quand on passe d'une phase à l'autre.

## Développement de l'énergie libre

Considérons une transition de phase avec changement de symétrie pour laquelle on peut définir un paramètre d'ordre  $m$ .

A une température donnée, l'état d'équilibre stable correspond à une valeur de  $m$  qui minimise l'énergie libre  $F(m, T)$ .

Au voisinage de la température de transition  $T_0$ , on peut développer  $F$

$$F(m, T) = F_0(T) + A_0(T)m + A(T)m^2 + B(T)m^3 + C(T)m^4 + \dots$$

- Pour  $T > T_0$ ,  $F$  doit être minimale pour  $m = 0$  et  $A(T) > 0$ .
- Pour  $T < T_0$ ,  $F$  doit être minimale pour  $m \neq 0$  et  $A(T) < 0$  (concavité).

Le choix le plus simple  $A(T) = a(T - T_0)$  avec  $a > 0$ .

Pour une transition du second ordre, on a  $B(T) = 0$  et  $C(T) = c > 0$  donc

$$F(m, T) = F_0(T) + a(T - T_0)m^2 + cm^4, a > 0, c > 0$$

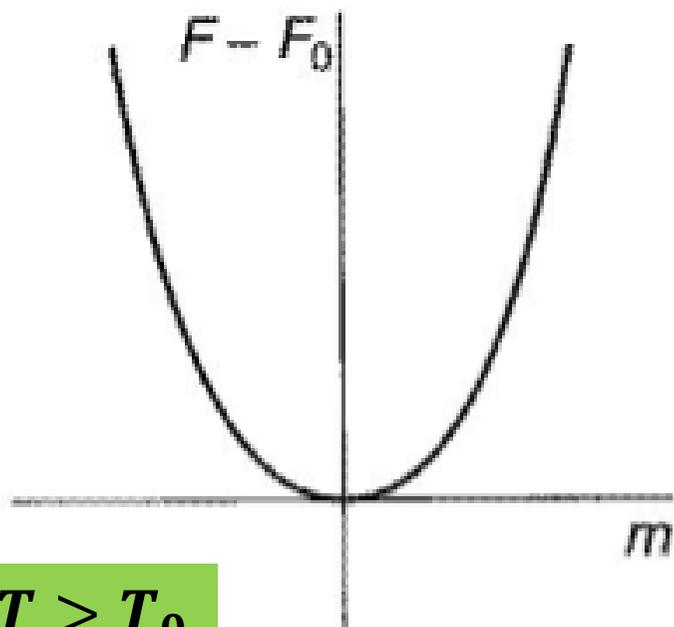
La valeur de  $m$  qui minimise  $F$  est solution de

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 2a(T - T_0)m + 4cm^3 = 0$$

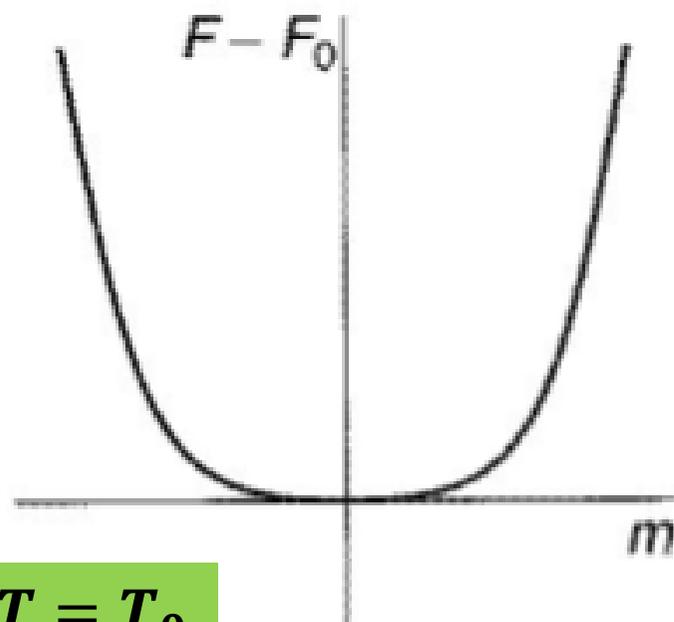
- Pour  $T > T_0$ , la seule solution est  $m = 0$

- Pour  $T < T_0$ , on a trois solutions: un maximum en  $m = 0$  et 2 minima  $m = \pm \sqrt{a(T - T_0)/2c}$ .

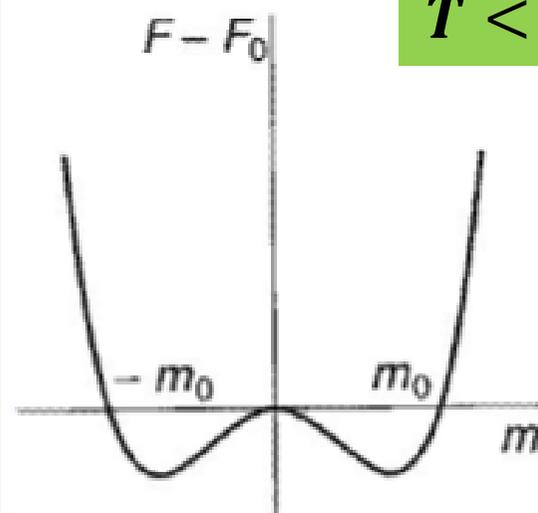
Au voisinage de  $T_0$ , le paramètre d'ordre se comporte comme  $\sqrt{T - T_0}$



$$T > T_0$$



$$T = T_0$$



$$T < T_0$$

## Comportement de la chaleur spécifique

$$C_p = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p$$

avec

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - am^2$$

- Au voisinage de  $T_0^+$ ,  $m = 0$  et  $C_p = -T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{T=T_0}$

- Au voisinage de  $T_0^-$ ,  $m \neq 0$  et  $C_p = -T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{T=T_0} + a^2 T_0 / 2c$

La chaleur spécifique est discontinu à la transition comme attendu pour une transition du second ordre.

## Comportement de susceptibilité

$$\chi = \left( \frac{\partial m}{\partial h} \right)_T$$

Où  $h$  est le champ conjugué à  $m$

On peut choisir le potentiel thermodynamique  $F^* = F(T, m) - mh$  dont l'équation de minimisation

$$\frac{\partial F^*}{\partial m} = 2a(T - T_0)m + 4cm^3 - h = 0$$

A pour solution  $m(T, h)$ . En dérivant par rapport à  $h$ ,

$$2a(T - T_0)\chi + 12cm^2\chi - 1 = 0$$

Dans la phase haute température,  $m = 0$  et

$$\chi = \frac{1}{2a(T - T_0)}$$

Dans la phase basse température, on montre

$$\chi = \frac{1}{4a(T - T_0)}$$

On remarque que  $\chi$  varie en  $1/|T - T_0|$  et diverge à la transition

L'énergie libre est donc singulière à la transition et le développement en puissance de  $m$  n'a pas de sens

## Exposants critiques

L'exposant critique décrit le degré de singularité ou de divergence des quantités physiques aux environs du point critique.

An d'étudier le comportement singulier des grandeurs physiques tels que la chaleur spécifique, la susceptibilité, ... au voisinage d'une transition du second ordre, on les représente comme des lois de puissance de  $|T - T_0|$

$$m \sim |T - T_0|^\beta$$

$$\Delta C_p \sim |T - T_0|^{-\alpha}$$

$$\chi \sim |T - T_0|^{-\gamma}$$

Où  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont des exposants critiques qui sont reliés par des lois d'échelle telles que **2**

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

## Transition du premier ordre

Lorsqu'on garde le terme d'ordre impair dans le développement de Landau on produit une transition du premier ordre

$$F(m, T) = F_0(T) + \frac{a}{2}m^2 - \frac{b}{3}m^3 + \frac{c}{4}m^4,$$

$$a > 0, b > 0, c > 0 \text{ et } a = a_0(T - T_0)$$

à l'équilibre

La fonction  $m(T)$  est solution de l'équation de minimisation de l'énergie libre  $F(T, m)$

$$\frac{\partial F}{\partial m} = am - bm^2 + cm^3 = 0$$

Soit deux minima en  $m = 0$  et un maximum si  $T < T_2 = T_0 + \frac{b^2}{4ac}$

La transition a lieu lorsque

$$F(m_0) = F(m = 0)$$

Qui correspond à la coexistence de phases les deux minimums sont à la même hauteur

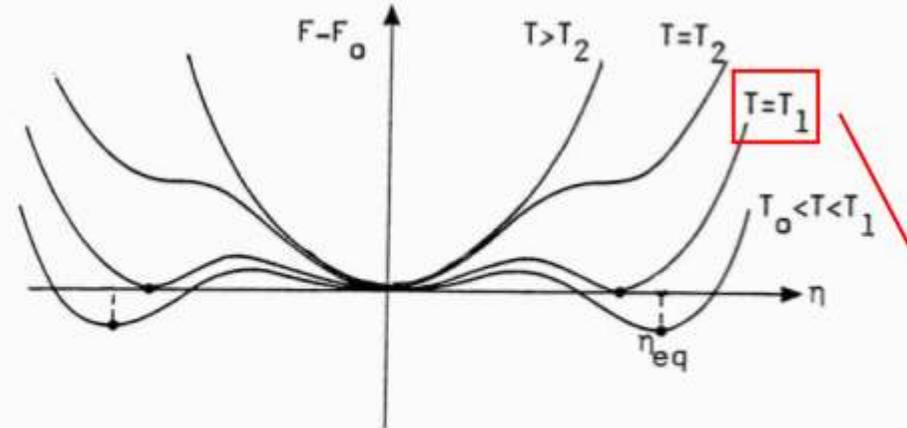
Des relations suivantes on peut déduire que

$$m_0 = \frac{2b}{3c}$$

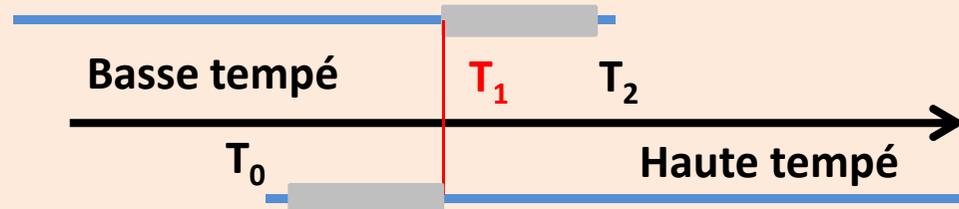
à la température de transition

$$T_1 = T_0 + \frac{2b^2}{9ca_0}$$

Pour des raisons cinétiques la phase  $m = 0$  peut perdurer jusqu'à  $T_0$



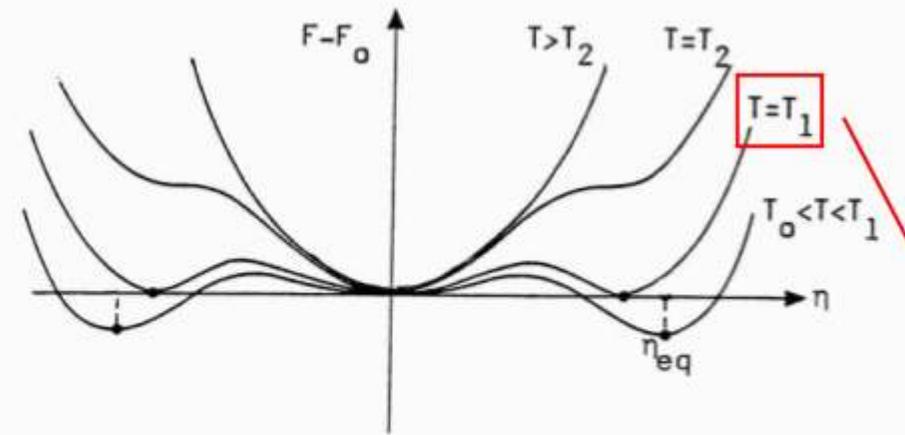
Transition du premier ordre  
Variation du potentiel thermodynamique  $F$  avec le paramètre d'ordre pour différentes températures.



Au dessous de la température critique  $T_c$ , la phase de basse symétrie est stable, tandis que la phase de haute symétrie est instable. Au dessus de  $T_c$ , seule la phase de haute symétrie est stable.

Pour  $T > T_c$ , le minimum le plus bas est à  $m = 0$ . Pour  $T = T_c$ , les deux minimums sont à la même hauteur et il y a **coexistence des deux phases**.

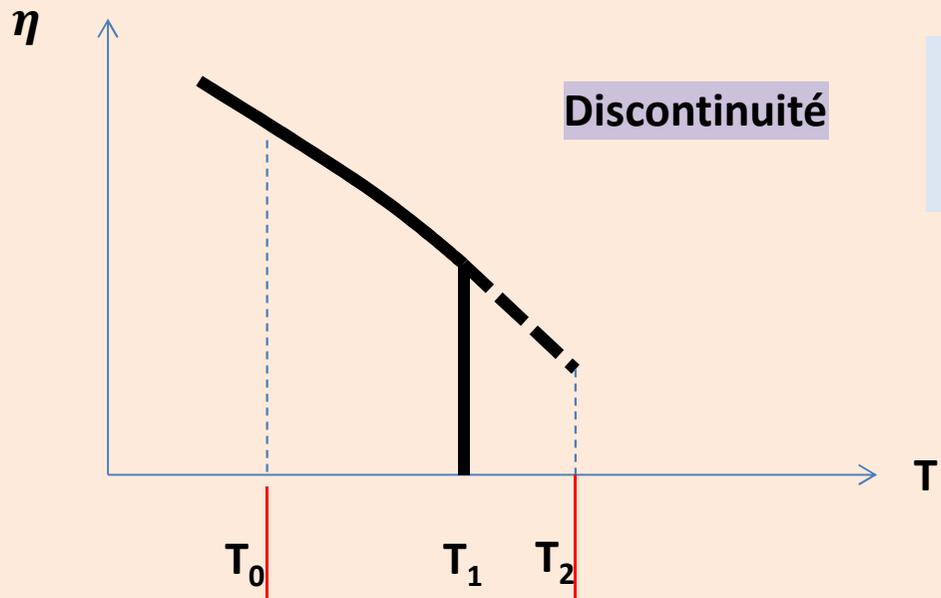
Cette propriété est caractéristique des transitions du premier ordre. Pour  $T < T_c$ , le minimum le plus bas est pour  $m$  fini. A  $T = T_c$ ,  $m$  passe donc de la valeur zéro à une valeur finie.



Transition du premier ordre  
Variation du potentiel thermodynamique  $F$   
avec le paramètre d'ordre pour différentes  
températures.

# Transition du premier ordre

Le paramètre est discontinu à la transition



L'entropie est discontinue a la transition et que la transition s'accompagne donc d'une chaleur latente  $L = T\Delta S$ .

$T_0$   
Limite d'existence  
d'une phase à BT

$T_2$   
Limite d'existence  
d'une phase à HT

## Cas particulier de l'hélium

L'hélium est un corps pur particulier. Sa configuration électronique fait qu'il ne se lie chimiquement à aucun corps, mis à part le fluor, qu'il est très difficilement ionisable, et qu'il n'interagit que très peu par liaison attractive à grande distance avec les autres molécules (du type des forces de van der Waals).

Les deux phases liquides He-I (liquide "normal") et He-II ("superfluide") sont en équilibre le long de la ligne  $\lambda$  entre  $\lambda_s$  et  $\lambda_g$ .

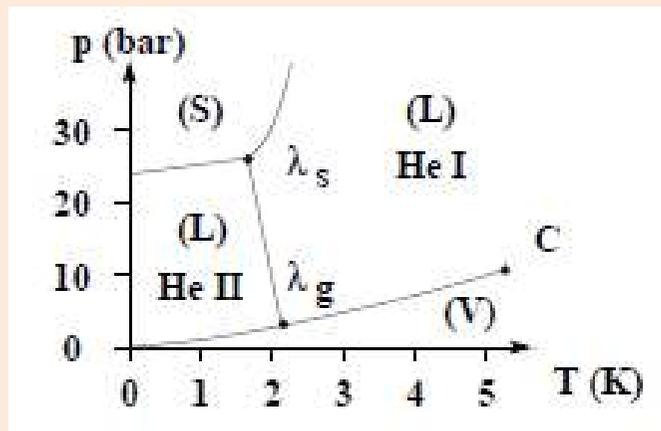


Diagramme (p, T) de l'hélium  $^4\text{He}$ .  
La ligne  $\lambda$  relie les deux points triples  $\lambda_s$  et  $\lambda_g$ .

L'hélium est le seul corps pur à exister sous deux phases différentes à l'état liquide. L'hélium  $^4\text{He}$  possède deux points triples  $\lambda_s$  et  $\lambda_g$  dont les coordonnées respectives sont :

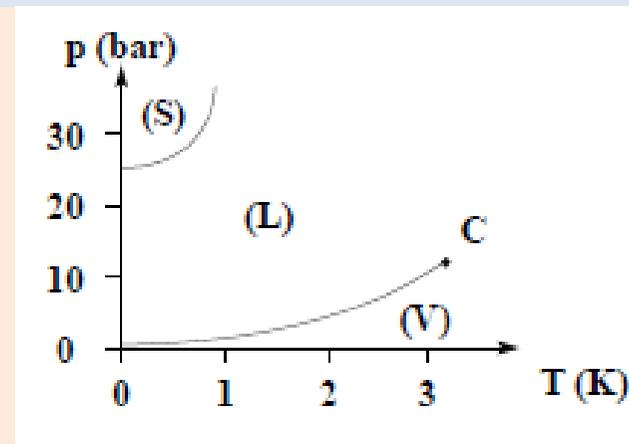
$$\lambda_s \begin{cases} T_s = 1,74 \text{ K} \\ p_s = 29,1 \text{ bar} \end{cases}$$

et

$$\lambda_g \begin{cases} T_g = 2,19 \text{ K} \\ p_g = 0,05 \text{ bar} \end{cases}$$

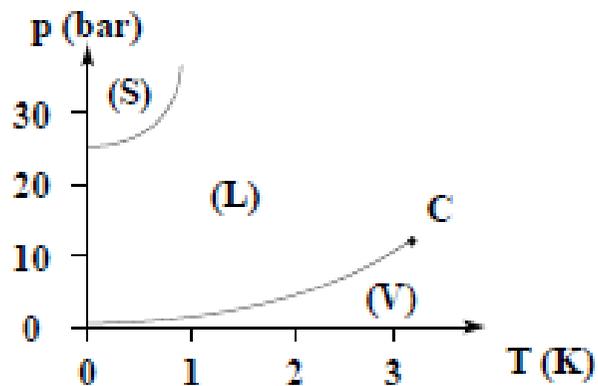
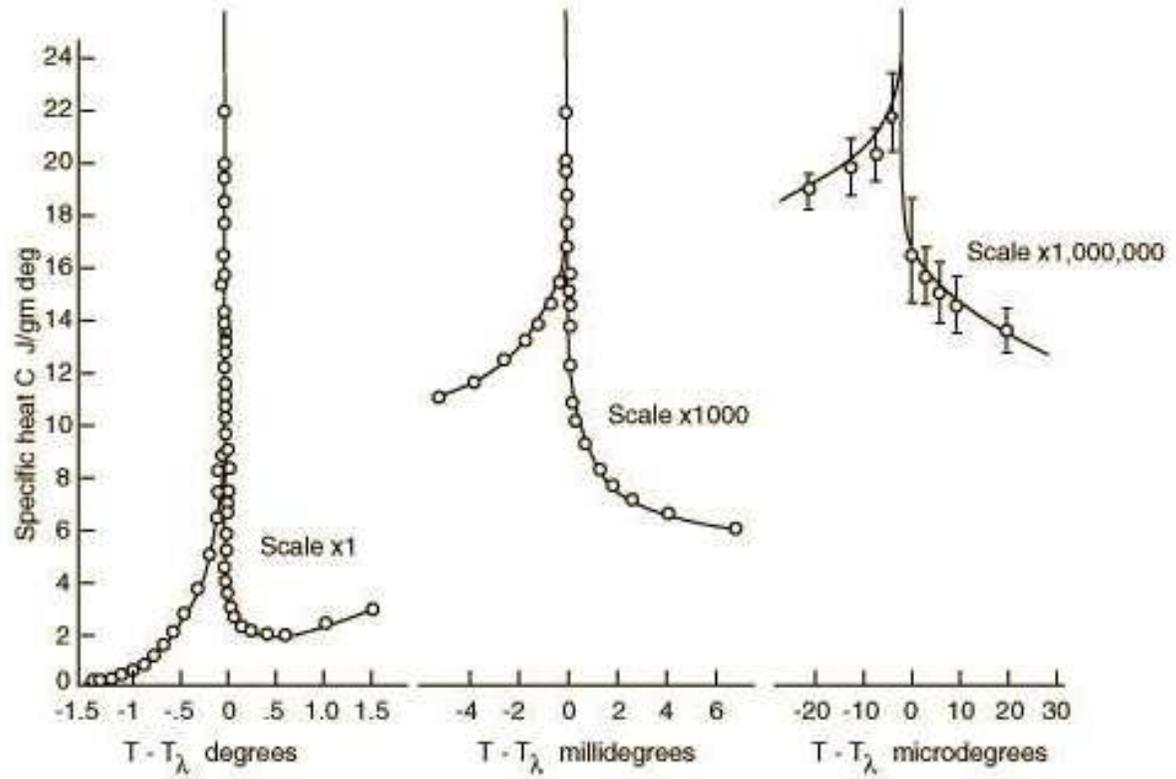
Les courbes de fusion et de vaporisation ne se rencontrent pas. L'hélium He-II a des propriétés très particulières (telle que l'absence de viscosité) qui résultent d'un phénomène d'origine quantique, la condensation de Bose-Einstein, se manifestant au niveau macroscopique.

Diagramme (p, T) de l'hélium  $^3\text{He}$



La capacité thermique massique  $c$  de **He-I** augmente considérablement aux alentours de  $T \approx 2,17 K$ . La courbe donnant  $c$  en fonction de  $T$  à l'allure de la lettre  $\lambda$ , d'où le nom donné au point triple correspondant : ce diagramme met en évidence une transition de phase de 2<sup>ème</sup> espèce entre **He-I** et **He-II**.

La phase solide n'existe qu'à très haute pression et n'est jamais en équilibre avec sa vapeur car il n'existe pas de point triple commun aux phases solide, liquide et gazeuse.



L'isotope  $^3\text{He}$  de l'hélium, beaucoup moins abondant, présente également une singularité en n'ayant pas non plus de point triple commun aux phases solide, liquide et gazeuse. En champ magnétique nul, il existe deux phases superfluides non représentées sur la figure car elles se situent en dessous de **3 mK**.

Pour un cristal paramagnétique parfait ( $N$  spins  $1/2$  indépendants dans  $V$ ) soumis à un champ magnétique extérieur  $\vec{B} = B\vec{e}_z$ , l'aimantation (moment magnétique total par unité de volume) est donnée par équation paramagnétique de Langevin :

$$M = \frac{N}{V} \mu \tanh\left(\frac{\mu B}{kT}\right)$$

où  $\mu = g\mu_B/2$ . En particulier, l'aimantation en champ nul  $M_0$  est nulle et la susceptibilité en champ faible suit la loi de Curie.

L'aimantation a comme unité l'Ampère par mètre:  $\mathbf{A}\cdot\mathbf{m}^{-1}$

Expérimentalement, on constate que le comportement ferromagnétique disparaît au profit d'un comportement paramagnétique pour  $T > T_C$  température de Curie (pour le fer,  $T_C = 1043 \text{ K}$ ).

En physique du solide, la **loi de Curie** énonce que la susceptibilité magnétique d'un matériau paramagnétique est inversement proportionnelle à la température.

$$\chi_m = C/T$$

- Paramètre d'ordre :  $M_0 = 0$  dans la phase désordonnée (para) et  $M_0 \neq 0$  dans la phase ordonnée (ferro).
- Brisure spontanée de symétrie quand on passe de para (phase la plus symétrique) à ferro (moins symétrique).

$C$  est une constante parfois appelée constante de Curie.

La transition ferro-para en champ nul est une transition de phase du second ordre  
Pas de coexistence de phase en  $T = T_C$ .

- Pas de variation d'entropie ni de chaleur latente.
- Continuité du paramètre d'ordre en  $T = T_C$ .
- Divergence des susceptibilités (i.e.  $C_V$  ou  $\chi$ ) en  $T = T_C$ .

Le point ( $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ ,  $T = T_C$ ) est appelé point critique. Au voisinage de ce point, les paramètres du système suivent des lois de puissance en fonction de  $T - T_C$ . On définit alors les exposants critiques  $\beta$  et  $\gamma$  tels que :

- Aimantation en champ nul :  $M_0(T) \sim (T_C - T)^\beta$  pour  $T \lesssim T_C \Rightarrow$  on mesure  $\beta \sim 0,36 \pm 0,02$
- Susceptibilité magnétique en champ faible :  
$$\chi(T) = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial B} \sim (T_C - T)^{-\gamma}$$
 pour  $T \lesssim T_C$  et  $\chi(T) \sim (T - T_C)^{-\gamma'}$  pour  $T \gtrsim T_C \Rightarrow$  on mesure  $\gamma \simeq \gamma' \simeq 1,35 \pm 0,05$

Au voisinage du point critique, les fluctuations ne sont plus négligeables (car les susceptibilités divergent).

Expérimentalement, on constate que les exposants critiques sont indépendants du matériau ferromagnétique considéré. Ces exposants sont donc caractéristiques de la transition de phase étudiée et du mécanisme physique sous-jacent. On peut alors définir des classes d'universalité pour les différentes transitions de phase. Tout l'enjeu consiste à modéliser la transition et à prédire les exposants critiques.

## Origine des interactions et modèles du ferromagnétisme

entre moments magnétiques : si on considère les interactions entre deux moments  $\mathbf{i}$  et  $\mathbf{j}$ , le hamiltonien d'interaction s'écrit  $H_{int} = \sum_{i>j} (-J_{ij} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j)$  où  $J_{ij}$  est une constante de couplage (qui dépend a priori de  $\mathbf{i}$  et  $\mathbf{j}$ ). Si on suppose de plus que  $J_{ij}$  décroît suffisamment vite avec la distance entre les moments  $\mathbf{i}$  et  $\mathbf{j}$ , alors on peut sommer uniquement sur les plus proches voisins (ppv) et supposer la constante de couplage indépendante de  $\mathbf{i}$  et  $\mathbf{j}$  soit :

$$H_{int} = \sum_{(i,j)ppv} (-J \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j)$$

Cette somme implique  $nN/2$  termes où  $N$  est le nombre total de moments dans le système et  $n$  le nombre de ppv.

**Justification** : on peut penser que le couplage entre moments résulte d'une interaction dipolaire. En fait, cette interaction est trop faible (voir exercice) et c'est l'interaction d'échange qui permet de justifier ce couplage. Cette interaction de forte intensité et à courte portée résulte des effets combinés de l'interaction électrostatique (répulsion coulombienne entre charges) et du principe d'exclusion de Pauli.

Par exemple, la fonction d'onde d'une paire d'électrons est le produit de la fonction d'onde de spin  $\chi_{spin}(1,2)$  par la fonction d'onde orbitale  $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  ( $\sim r_1, \sim r_2$ ). Cette fonction d'onde doit être antisymétrique. On peut alors distinguer deux cas :

- spins parallèles  $\Rightarrow \phi$  est antisymétrique et les électrons restent éloignés l'un de l'autre (exclusion)  $\Rightarrow$  énergie électrostatique faible.
- spins antiparallèles  $\Rightarrow \phi$  est symétrique et les électrons peuvent s'approcher l'un de l'autre  $\Rightarrow$  énergie électrostatique forte.

La différence d'énergie associée à ces deux cas est de l'ordre de **1 eV** ce qui conduit à des énergies compatibles avec les températures de transition ferro-para observées expérimentalement.

J, appelée intégrale d'échange, est positive : l'énergie d'une paire d'électrons de spins parallèles est plus faible que lorsque les spins sont antiparallèles.

**Hamiltonien de Heisenberg** : en ajoutant le hamiltonien des **N** moments magnétiques dans  $\vec{B}$  quelconque, on obtient :

$$H = - \sum_{j=1}^N \vec{\mu}_j \cdot \vec{B} - J \sum_{(i,j)ppv} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j$$

Ce hamiltonien couple les différentes composantes des moments magnétiques  $\Rightarrow$  compliqué !  
On peut rendre le problème soluble grâce à une approximation de champ moyen.

Certains matériaux dit ferromagnétiques présentent la propriété de présenter une aimantation permanente (en l'absence de champ magnétique extérieur) en dessous d'une température  $T_c$  appelée température de Curie.

En mécanique quantique, une particule de spin  $\mathbf{s}$  est porteuse d'un moment magnétique

$$\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B\mathbf{S}$$

ou  $g$  est le facteur gyromagnétique et  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$  est le magneton de Bohr.

**Interaction dipolaire**

**Interaction d'échange**

$$H_E = -J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}$$

Les plus connus sont le fer, le nickel et le cobalt mais aussi certains oxydes

Matériau	$T_c$ (K)
Fe	1043
Ni	627
Co	1388
Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	858

Heisenberg

## Le modèle d'Ising

Le modèle d'Ising (et ses variantes) est certainement le modèle le plus utilisé de la physique statistique. Son Hamiltonien, tout en étant très simple, possède les propriétés essentielles de l'interaction à deux corps de courte portée avec cœur répulsif. Aussi, bien que créé pour expliquer le problème de la magnétisation spontanée, il sera utilisé bien au-delà, dans les fluides de Lennard-Jones, les alliages binaires, la gélification, voire en sciences humaines (avec ou sans précaution).

Il s'agit d'un modèle de  $N$  spins disposés sur un réseau. Chaque spin peut prendre les valeurs  $\pm 1$ . On qualifie souvent cette variable de spin par abus de langage car on applique le modèle de Ising au ferromagnétisme. Dans ce cas, la variable  $S_i$  est liée à l'orientation du spin de la particule. Il y a donc  $2^N$  micro-états possibles.

On suppose que l'interaction de chaque particule avec ses proches voisins est de la forme :

$$V = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$

où la constante  $J > 0$  caractérise l'intensité de l'interaction. La somme est prise sur tous les couples  $\langle i, j \rangle$  correspondant aux proches voisins de  $i$  (2, 4 et 6 respectivement dans le cas du réseau linéaire 1D, carré 2D et cubique 3D). Cette interaction favorise l'alignement des spins. En effet,  $V$  est négatif lorsque  $S_i$  et  $S_j$  sont de même signe. Il est positif lorsqu'ils sont opposés. Cette interaction entre deux spins se superpose à celle correspondant au champ magnétique extérieur appliqué :

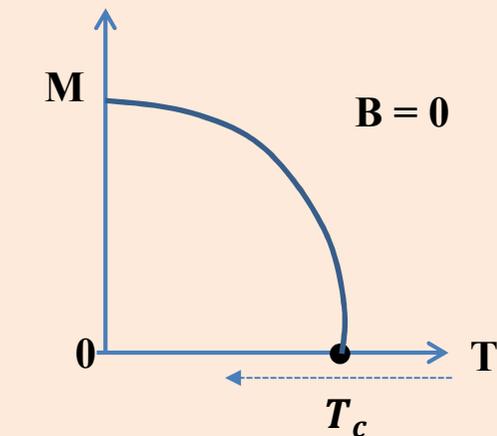
$$U = -B \sum_{i=1}^N S_i$$

où  $B$  est l'induction magnétique

## Le modèle d'Ising

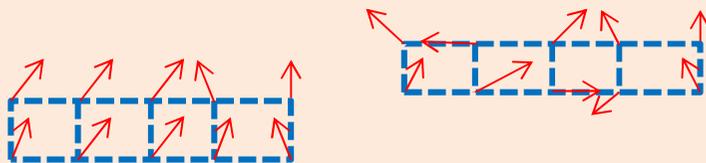
Le modèle d'Ising tient compte des interactions entre sites et éventuellement entre les sites et un champ extérieure. Caractérisé par un Hamiltonien, son étude s'inscrit dans le cadre de la mécanique statistique. Son titre de gloire est de décrire, à l'aide d'hypothèses simples, les comportements associés aux transitions de phases thermodynamiques. Et davantage qu'une description, le modèle d'Ising permet une compréhension fine des transitions de phases continues et de leurs propriétés universelles.

A l'origine, le modèle d'Ising a été proposé par Wilhelm Lenz en 1925 pour étudier les propriétés ferromagnétiques de la matière. Certains corps sont capables de s'aimanter sous l'effet d'un champ magnétique  $\mathbf{B}$  extérieur et de conserver une aimantation spontanée,  $\mathbf{m}$ , en l'absence de champ, à condition que la température du système soit inférieure au point de Curie.



L'aimantation macroscopique d'un matériau est due à la contribution des moments magnétiques de chaque atome.

Comme le montre le modèle d'Ising, l'aimantation spontanée en l'absence de champ magnétique ne peut se comprendre qu'en terme de phénomène collectif basé sur les interactions entre moments magnétiques des atomes



Aimantation spontanée, en l'absence de champ magnétique ( $\mathbf{B} = 0$ ) en fonction de la température et comportement des moments magnétiques des atomes à basse (gauche) et haute (droite) température.

## Le modèle d'Ising

Tant que  $T < T_c$ , les interactions tendent à orienter les moments magnétiques dans la même direction. Le système est alors dans une phase ordonnée qui présente une aimantation globale non nulle. Mais lorsque la température augmente, l'agitation thermique entre en compétition avec les interactions locales entre moments magnétiques.

Et lorsque  $T \geq T_c$ , le système devient brusquement désordonné et perd son aimantation :  $m = 0$  (phase paramagnétique).

A haute température l'agitation thermique implique que tous les états sont équiprobables, ce qui implique pour la magnétisation moyenne  $\langle m \rangle = 0$  (état paramagnétique). Il est immédiat de se convaincre que à basse température l'interaction conduit à une brisure spontanée de la symétrie rotationnelle même en l'absence du champ magnétique, en favorisant les états où les spins sont alignés (si  $J > 0$ , cas ferromagnétique), ou les états où les spins sont alternés (si  $J < 0$ , cas antiferromagnétique).

## Le modèle

Considérons  $N$  sites placés au nœuds d'un réseau (dimension  $d$ , maille donnée) et occupés par des "spins" ne prenant que deux valeurs possibles  $S_i = \pm 1$ . Si. Selon le contexte, cette variable binaire pourra décrire :

le moment magnétique de l'atome  $i$  : "up/down",

le modèle d'Ising prend en compte l'interaction  $J$  entre spins (par exemple entre plus proches voisins) et l'interaction avec un champ extérieur  $B$  qui impose une direction privilégiée au système (up ou down). Par convention, si  $J > 0$  (interaction ferromagnétique), des spins interagissant auront tendance à partager la même valeur. Le rôle de cette interaction est donc d'influencer localement le voisinage d'un site. Selon les cas :

- deux spins voisins dans un système magnétique auront tendance à s'aligner dans le même sens, up ou down,

Certains systèmes sont au contraire décrits par une interaction antiferromagnétique ( $J < 0$ ) les spins voisins prennent alors des valeurs opposées.

## Le modèle d'Ising

L'interprétation du champ extérieur  $B$  dépend une fois de plus du contexte :

Un champ magnétique qui tendra à aligner les spins du système dans sa direction, ,

"up" si  $B > 0$

"down" si  $B < 0$ ,

Pour des interactions ( $J$ ,  $B$ ) et une température  $T$  données, l'état microscopique du système est caractérisé par les  $N$  valeurs d'une configuration de spins  $\{S_i\}$ . L'énergie d'interaction de cette configuration est appelée Hamiltonien, c'est cette quantité qui permet de décrire la dynamique et les propriétés thermodynamiques du système à l'équilibre :

$$H(\{S_i\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i$$

Le premier terme décrit l'interaction entre spins plus proches voisins. Le paramètre  $J$  est appelé aussi énergie d'échange, car il mesure (à un facteur 2 près) la différence entre les énergies de paires de spins alignés et antialignés. Puisque  $J > 0$ , les spins ont tendance à prendre la même valeur pour minimiser leur énergie d'interaction (ferromagnétique).

Le second terme de l'équation prend en compte l'interaction de chaque spin avec un champ extérieurs. Les spins auront donc tendance à s'aligner avec le champ  $B$  pour minimiser l'énergie.

Le modèle étant posé (choix du réseau et du Hamiltonien), on ne cherche pas à connaître l'état microscopique du système. Notons qu'avec  $N \sim 10^{24}$  atomes, il y a un nombre gigantesque de configurations possibles (a priori  $2^N$ ). En revanche, on s'intéressera à son état macroscopique défini par quelques grandeurs thermodynamiques comme l'énergie moyenne par spin

$$e = \frac{\langle H \rangle}{N}$$

et l'aimantation moyenne par spin

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle$$

## Le modèle d'Ising

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle$$

Cette quantité, qui varie entre  $-1$  et  $1$ , donne une information globale sur l'état d'aimantation du système. Il s'agit selon les cas de : l'aimantation moyenne du système telle qu'elle est mesurée dans un système magnétique (c'est aussi la différence entre les nombres moyens de spins up et de spins down),

Dans la pratique, un système est souvent en contact avec un thermostat qui impose une certaine température  $T$ .

Dans ce cas, l'énergie et l'aimantation du système fluctuent autour d'une valeur moyenne définissant l'état macroscopique ou thermodynamique du système.

voions comment évolue le comportement du système magnétique en fonction de la température. Trois énergies sont en jeu : l'énergie d'interaction  $J$  entre les spins, l'interaction avec le champ  $B$  et l'énergie thermique.

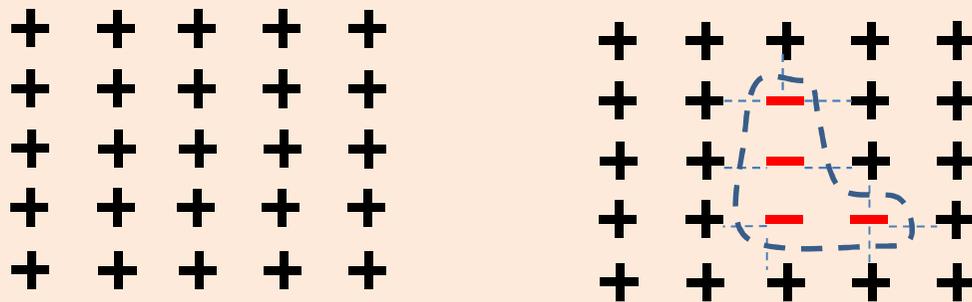
1. A température nulle, aucune énergie thermique supplémentaire n'est apportée au système, l'état d'équilibre sera donc celui qui minimise l'énergie  $H$  du système. Le premier terme du Hamiltonien est minimal lorsque tous les spins sont alignés, le second lorsqu'ils ont la même orientation que le champ  $B$ . L'état fondamental du système est donc, pour un champ  $B > 0$  :  $S_i = 1$  pour tout  $i$ . L'aimantation vaut alors  $m = 1$  et l'énergie de l'état fondamental est donnée par :

$$E_0 = -JN_p - BN$$

où  $N_p$  est le nombre de paires de spins plus proches voisins. Cette quantité dépend du réseau. Dans le cas d'un réseau de coordinnence  $z$ ,  $N_p = Nz/2$  (en négligeant les effets de bord, chacun des  $N$  spins à  $z$  voisins, le facteur  $1/2$  évite le double comptage).

## Le modèle d'Ising

2. A la température  $T > 0$ , de l'énergie thermique,  $kT$ , où  $k$  est la constante de Boltzmann, est disponible pour renverser des spins. A basse température, seuls quelques spins pourront se retourner. Chaque spin retourné augmentera l'énergie de  $2B$  et l'aimantation par spin diminuera de  $2/N$ . Mais lorsqu'un spin se retourne, les interactions avec ses voisins sont modifiées : chaque nouvelle paire de spins  $(+, -)$  augmentera l'énergie de  $2J$ .



Configurations de spins du modèle d'Ising sur réseau carré à  $T = 0$  (à gauche) et à  $T > 0$  (à droite). Les “+” correspondent aux spins  $+1$  orientés dans le sens du champ magnétique et les “-” aux spins  $-1$ .

3. A très haute température, ( $kT \gg J$  et  $kT \gg B$ ), les interactions entre spins d'une part et entre les spins et le champ extérieur d'autre part deviennent négligeables devant l'énergie thermique. On retrouve la percolation aléatoire, où chaque spin vaut  $\pm 1$  avec la même probabilité et indépendamment de ses voisins. Dans ce cas, l'énergie et l'aimantation sont nulles.

La question est bien sûr de trouver le comportement du système pour des températures intermédiaires afin de décrire la transition de phase et le passage d'une aimantation nulle à une valeur finie pour une certaine température  $T_c$ .