

Un monde de spins

BRIAN HAYES

Tout au long du XX^e siècle, les physiciens ont étudié le modèle d'Ising, une représentation simplifiée de l'aimantation. Après de francs succès à une et deux dimensions, ils simulent le modèle à trois dimensions sur ordinateur...

Pierre-Simon de Laplace, mécanicien céleste, pensait que l'Univers est entièrement régi par les forces que les particules exercent les unes sur les autres. Il avait donc conçu un projet d'une ambition immense, qu'il pensait réaliser à l'aide d'un plan d'une extrême simplicité : il voulait mesurer toutes les forces et toutes les vitesses à un certain instant, puis reconstituer, par le calcul, l'évolution complète de l'Univers – passée, présente et future. Deux siècles de progrès scientifiques plus tard, le projet de Laplace n'a toujours pas abouti ; au contraire, la mécanique quantique, puis la théorie du chaos, l'ont rendu caduc. Pourtant, il existe des situations où le projet de Laplace semble réalisé : la modélisation des phénomènes physiques. Quand nous étudions un modèle plutôt que l'Univers réel, nous pouvons, en principe, suivre toutes les forces et tous les mouvements, inven-

ter et imposer des lois physiques. Pourtant, notre compréhension d'un tel modèle n'est souvent que partielle. Même si, avec ce modèle, nous parvenons à suivre les particules une à une, nous ignorons comment elles interagissent quand elles sont des millions. En d'autres termes, nous sommes alors incapables de prévoir des phénomènes thermodynamiques aussi élémentaires que l'ébullition ou le gel.

Un tel modèle, fut élaboré dans les années 1920 par les physiciens Wilhelm Lenz et Ernst Ising pour établir une théorie simplifiée du ferromagnétisme expliquant l'aimantation des barreaux de fer. Cette théorie est nommée modèle d'Ising, parce qu'Ernst Ising en fit le sujet de la thèse de doctorat, dirigée par Lenz, qu'il obtint à l'Université de Hambourg. S'il est une situation où le projet de Laplace avait un sens, c'est bien le ferromagnétisme décrit à la façon d'Ising!

Tout au long du XX^e siècle, les physiciens se sont passionnés pour ce modèle. Après le travail de pionnier d'Ising en 1925, Rudolf Peierls réalisa son importance en 1936 et Lars Onsager parvint en 1944 à déterminer par un calcul exact la transition de phase du système à deux dimensions, c'est-à-dire la température à laquelle il s'aimante brusquement. Une transition de phase est une transformation drastique d'un matériau, comme la solidification de l'eau à 0 °C. Le modèle d'Ising à trois dimensions a résisté, en revanche, aux efforts intenses entrepris pour l'explorer ; aujourd'hui, les physiciens s'évertuent toujours à le comprendre et à y identifier la transition de phase. Comme les calculs exacts demeurent hors de portée, les physiciens tentent aussi de réaliser le projet de Laplace... à l'ordinateur. Simuler ainsi le monde sur ordinateur est une gageure, car les résultats

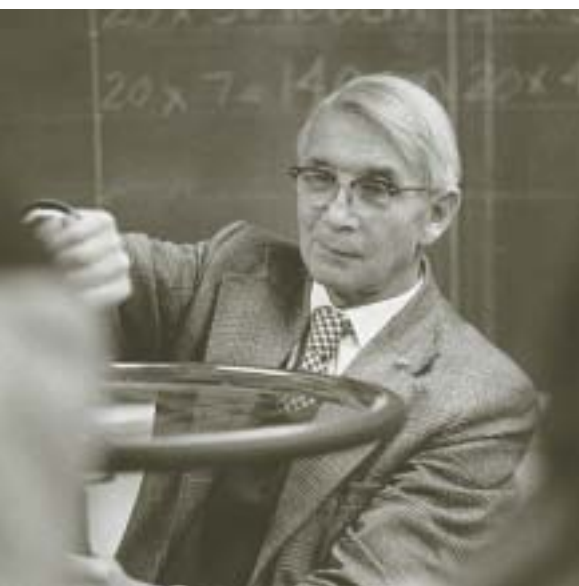
obtenus peuvent être une propriété réelle, mais aussi un artefact de calcul.

Le modèle d'Ising est une description naïve d'un réseau cristallin d'atomes de fer. Les éléments de base du modèle sont symbolisés par des flèches qui pointent, soit vers le haut, soit vers le bas ; elles représentent les spins, c'est-à-dire les moments cinétiques des atomes. Ces spins d'Ising sont disposés sur un réseau dont la maille élémentaire est carrée (ou rectangulaire). Des spins voisins «préfèrent» pointer dans la même direction, ce qui traduit le fait que l'énergie du système est petite lorsque des spins adjacents sont parallèles et grande lorsqu'ils sont antiparallèles ; dans ce modèle, les spins n'interagissent qu'avec leurs voisins les plus proches. Les spins ne sont pas tous orientés parallèlement à cause de la température : l'énergie thermique perturbe l'arrangement parfait de spins parallèles. Enfin, les spins sont soumis à une contrainte supplémentaire : un champ magnétique extérieur tend à les aligner dans sa direction.

Un modèle simple d'aimant

Ce modèle d'Ising est l'un des plus simples inventés par les physiciens pour décrire un grand nombre de particules qui ont un comportement «solidaire». Toutefois, il induit des calculs redoutables, et ce, même avec toute la puissance des calculateurs modernes.

Le modèle d'Ising reproduit bien les principaux aspects de la réalité. Les spins d'Ising correspondent à ceux des électrons en rotation autour des atomes de fer, lesquels sont rangés suivant un réseau cristallin dont la maille est cubique centrée ou cubique à face centrée. La disposition des spins d'Ising sur un réseau régulier à maille carrée ou cubique reproduit cette propriété.



Bradley University, Peoria, IL

1. ERNST ISING (1900–1998) était passionné par l'enseignement de la physique. Originaire d'Allemagne, il fut nommé «meilleur professeur de l'année aux États-Unis», en 1971.

Les interactions des spins voisins représentent le chevauchement des nuages électroniques entourant les noyaux. Au final, un seul élément n'a pas vraiment son pendant dans le monde réel : le fait que les spins d'Ising ne s'orientent que selon deux directions.

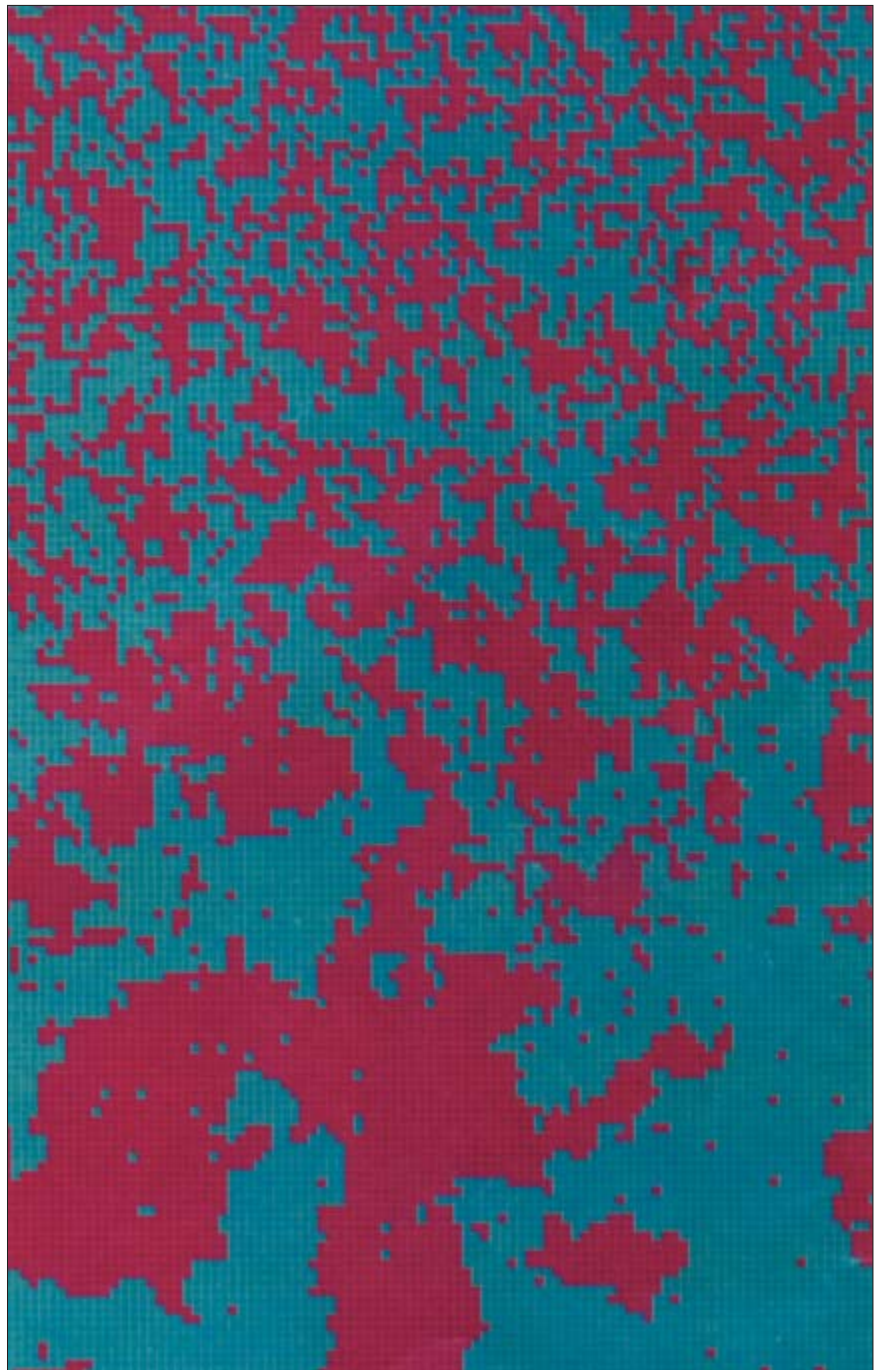
L'aimant ainsi modélisé est-il aimanté? Ses spins s'alignent-ils en parallèle comme dans un vrai ferromagnétique? Avant de répondre à ces questions, rappelons le principe de base du physicien : les systèmes tendent à évoluer vers des états d'énergie inférieure (ou d'énergie libre inférieure). C'est en appliquant cette idée que les physiciens ont remporté tant de succès dans leurs efforts pour décrire la nature. Dans le cas du modèle d'Ising, un modèle de la physique statistique, ce principe doit être appliqué de façon probabiliste. Parce qu'ils sont plus probables, les états de moindre énergie du modèle d'Ising sont ceux vers lesquels le système évolue, malgré les fluctuations thermiques qui le poussent en permanence à changer d'état. Lorsque la température est très grande, ces fluctuations thermiques sont incessantes. Chaque spin bascule continuellement et aléatoirement d'une orientation à l'autre, de telle sorte que l'aimantation moyenne reste nulle. Au contraire, lorsque la température est proche de zéro, les fluctuations thermiques tendent à disparaître. Le système est dans un état d'énergie minimale, celui où tous les spins sont alignés. Notons qu'en l'absence de champ magnétique extérieur, l'état où tous les spins sont alignés vers le haut est aussi probable que celui où ils sont alignés vers le bas.

La transition de phase

Supposons maintenant que nous réduisons continûment la température d'un système d'Ising de l'infini à zéro. Initialement désordonné, tous les spins finissent par s'aligner. Ce changement est-il continu, ou brusquement déclenché à une température donnée? Cette question est centrale, car un système à un grand nombre de particules adopte des phases différentes, c'est-à-dire des comportements différents en fonction des conditions extérieures. Parce qu'elles séparent ces comportements, les discontinuités – appelées transitions de phase – sont des repères essentiels dans l'analyse du comportement de la matière. Cette transition de phase apparaît dans les aimants réels. Refroidis-

sons lentement du fer en fusion et mesurons son aimantation : elle reste nulle jusqu'à une température nommée point de Curie ; là, à environ 1 040 kelvins, elle augmente brusquement. Si le modèle d'Ising décrit vraiment le ferromagnétisme, il doit présenter ce type de discontinuité. En d'autres termes, il existe une température (un niveau d'agitation thermique) au-dessous de laquelle le système passe brusquement dans son état aimanté.

C'est cette question qu'Ising a étudiée dans son travail de pionnier. Il s'est limité au «peigne de spins», c'est-à-dire à des alignements de spins. Existe-t-il, dans le cas du peigne, une température critique au-dessous de laquelle l'agitation thermique n'empêche plus les spins de s'aligner? Déçu, il est obligé d'admettre que ce n'est pas le cas. Voyons pourquoi. Considérons une rangée de 10 000 spins qui pointent tous vers le haut. Une telle configuration est un état



2. LE MODÈLE D'ISING à deux dimensions est un réseau de spins pointant vers le haut (en rouge) ou vers le bas (en vert). Dans l'état représenté ici, la température varie du haut vers le bas, ce qui conduit à un mélange de spins plus désorientés en haut qu'en bas, où les interactions dominant la désorganisation thermique édifient de grands domaines d'orientation uniforme.