

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.

d'énergie minimale, puisque toutes les paires de spins sont formées par des voisins parallèles. Si nous inversons maintenant chacun des 5 000 spins situés à droite du milieu de la rangée, l'aimantation moyenne s'annule puisque le nombre de spins qui pointent vers le haut est égal à celui des spins qui pointent vers le bas. Pourtant, le système a pratiquement la même énergie, puisque seule la paire centrale est antiparallèle ; les 9998 autres sont parallèles ! On en conclut que le couplage entre spins est trop faible, dans ce cas, pour vaincre l'agitation thermique, même la plus infime. En d'autres termes, l'état d'énergie minimale est si proche des autres états, que même les fluctuations thermiques les plus faibles empêchent le système de s'y stabiliser.

Il semble qu'Ising pensait qu'il n'existerait pas non plus de transition de phase aux dimensions supérieures. En cela, le pionnier du magnétisme avait tort.

Ouvrons une parenthèse sur sa vie. Son doctorat obtenu, Ising commença par enseigner la physique dans les lycées publics. Parce qu'il était juif, il fut licencié, en 1933, peu après la prise de pouvoir par Hitler. Après un court séjour en France, il retourna en Allemagne pour enseigner à Potsdam dans une école juive. Il en fut nommé directeur, mais l'établissement fut détruit au cours de la *Nuit de Cristal*, en 1938. Ising et son épouse fuirent alors leur patrie pour se réfugier au Luxembourg. Ils survécurent à l'occupation, et émigrèrent aux États-Unis en 1947. Ce n'est que deux ans plus tard, en 1949, qu'Ising prit

conscience de la portée de ses travaux. Aux États-Unis, il enseigna la physique et les mathématiques pendant presque 30 ans à l'Université de Peoria, dans l'Illinois. Il mourut dans cette ville à 98 ans.

Passé inaperçu, le modèle d'Ising fut redécouvert par le physicien britannique Rudolf Peierls dans les années 1930. Celui-ci comprit qu'un réseau de spins à deux dimensions a un tout autre comportement que celui d'un peigne. Une considération sur l'énergie indique pourquoi : imaginons 10 000 spins, tous pointés vers le haut (100 peignes de 100 spins alignés). Si nous en basculons 5 000 pour abolir l'aimantation, au minimum 100 paires de spins sont antiparallèles. Notons que l'état où exactement 100 paires sont antiparallèles est celui où la moitié des peignes, tous voisins, sont basculés (voir la figure 4). Dans tous les autres états, c'est-à-dire quand les 5 000 spins basculés sont répartis dans tout le système, beaucoup plus de 100 paires sont antiparallèles. Nous voyons donc que le «prix énergétique» à payer pour annuler l'aimantation d'un système d'Ising à deux dimensions est beaucoup plus grand que dans le cas unidimensionnel (il est supérieur à l'énergie d'interaction de 100 paires au moins !). Peierls eût l'intuition – juste – qu'au-dessous d'une certaine température, l'agitation thermique ne suffit plus à faire sortir le système de son état d'énergie minimale.

Le carré d'Ising

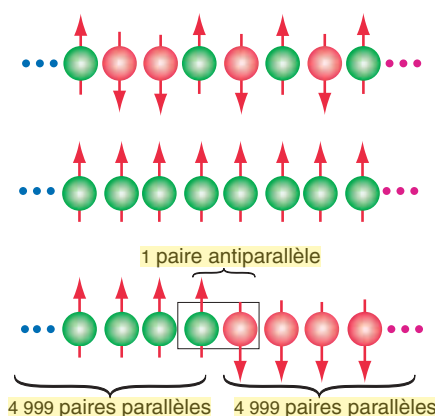
Pour s'en assurer, il fallait calculer la probabilité, à toutes les températures, de chacune des configurations possibles de spins. Prenons le cas simple du carré de spins. Considérons un système d'Ising à deux dimensions composé de quatre spins disposés aux sommets d'un carré. Puisque chacun des quatre spins prend deux valeurs, le système peut adopter 2^4 , c'est-à-dire 16 configurations possibles. Dans chaque cas, l'aimantation est égale à la différence entre le nombre de spins pointant vers le haut et le nombre de spins pointant vers le bas. Le calcul des états d'un tel système ne fait donc appel qu'à un peu d'arithmétique élémentaire. Comment en déduire la probabilité de chaque état à une température donnée ?

La réponse est donnée par le principe fondamental de la physique statistique selon lequel la probabilité que

le système se trouve dans un état donné est proportionnelle à la valeur donnée par la loi de distribution de Boltzmann. Cette dernière est définie par l'inverse de l'exponentielle de l'énergie du système E , divisée par sa température T , c'est-à-dire par la formule $e^{-E/T}$. Notons que si l'on veut exprimer l'énergie et la température dans le système international d'unités, c'est-à-dire en joules et en kelvins, il faut faire intervenir une constante dans cette définition. Celle-ci, la constante de Boltzmann, divise l'énergie du système. Ici, nous la négligeons.

La simple structure de la loi de distribution de Boltzmann est déjà riche d'enseignements. Si la température est élevée, $e^{-E/T}$ a une valeur proche de 1, quelle que soit l'énergie, et toutes les configurations ont la même probabilité d'exister. À basse température, au contraire, de minimes baisses d'énergie conduisent à une remontée du quotient E/T , ce qui suffit à faire considérablement augmenter l'exponentielle $e^{-E/T}$. Les états de basse énergie sont donc favorisés. Afin d'obtenir la probabilité exacte d'une certaine configuration, on doit normaliser la distribution de Boltzmann, c'est-à-dire diviser chaque valeur de $e^{-E/T}$ par la somme de toutes ses valeurs possibles ($\sum e^{-E/T}$, le symbole sigma, Σ , indiquant la sommation des exponentielles). Remarquons que la somme de toutes les valeurs possibles de la quantité $[e^{-E/T} / \sum e^{-E/T}]$ vaut 1, ce qui est normal puisque c'est la probabilité que le système soit dans l'une quelconque des configurations possibles. La quantité $Z = \sum e^{-E/T}$ est nommée fonction de partition. Elle joue un rôle essentiel dans la compréhension du système d'Ising et d'une manière générale de celle des systèmes à grand nombre de particules.

On détermine aisément la fonction de partition d'un système à quatre spins (voir figure 5). Pour ce faire, on calcule la valeur de $e^{-E/T}$ pour chacune des 16 configurations, puis on ajoute les résultats. Ainsi, pour une température égale à 2 (dans les unités du modèle), la somme des valeurs de la distribution de Boltzmann est égale à 27,05. À cette même température, la valeur donnée par la loi de Boltzmann pour la configuration où les quatre spins pointent vers le haut est d'environ 7,39 ; la probabilité de cette configuration est donc de $7,39 / 27,05$ soit environ 0,27. Cela signifie que l'état «aimanté» (à quatre spins pointés vers le haut) apparaît pendant un peu plus du quart du temps.



3. UN PEIGNE DE SPINS quelconque (en haut) avec ses nombreuses paires parallèles et antiparallèles. Au milieu, l'aimantation est maximale et l'énergie est minimale quand tous les spins sont parallèles. En bas, quand la moitié des spins ont été basculés, l'énergie du système est à peine supérieure à sa valeur quand tous les spins sont alignés, car il n'y a qu'une seule paire antiparallèle.