

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

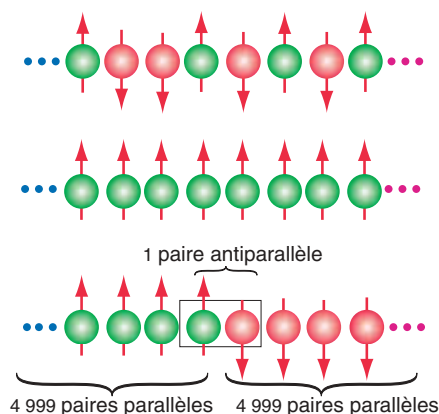
Pour s'en assurer, il fallait calculer la probabilité, à toutes les températures, de chacune des configurations possibles de spins. Prenons le cas simple du carré de spins. Considérons un système d'Ising à deux dimensions composé de quatre spins disposés aux sommets d'un carré. Puisque chacun des quatre 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 négligerons.

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.

Si un tel calcul est simple à quatre spins, à 40 spins, il y a déjà quelque mille milliards de configurations possibles, et même les ordinateurs les plus puissants calculent difficilement la fonction de partition correspondante. À 400 spins, il ne faut même pas y songer... Pourtant, ce sont bien les grands nombres de spins qui nous intéressent puisque nous souhaitons connaître la fonction de partition dans la «limite thermodynamique», c'est-à-dire quand le nombre de spins tend vers l'infini.

Le calcul exact de la fonction de partition du modèle bidimensionnel est certes difficile, mais pas impossible. En 1944, Lars Onsager, un chimiste de l'Université Yale, en publia le résultat, suscitant surprise et admiration. Onsager ne procède pas par dénombrement direct mais utilise avec maestria l'algèbre des opérateurs. Je ne me risquerai pas à expliquer ici son calcul, et me contenterai de souligner qu'il obtient une expression exacte de la fonction de partition du système à la limite thermodynamique. Toutes les propriétés macroscopiquement observables du modèle peuvent être déduites de ce résultat. La théorie d'Onsager décrit notamment l'apparition de l'aimantation à une température critique T_c . L'aimantation y est proportionnelle à la quantité $(T_c - T)^{1/8}$. Notons que $(T_c - T)^{1/8}$ prend des valeurs au-dessous de la température critique, mais n'est pas définie au-dessus de cette température parce que cette quantité cesse alors d'avoir des valeurs réelles. En d'autres termes, l'aimantation disparaît au-dessus de la température critique.

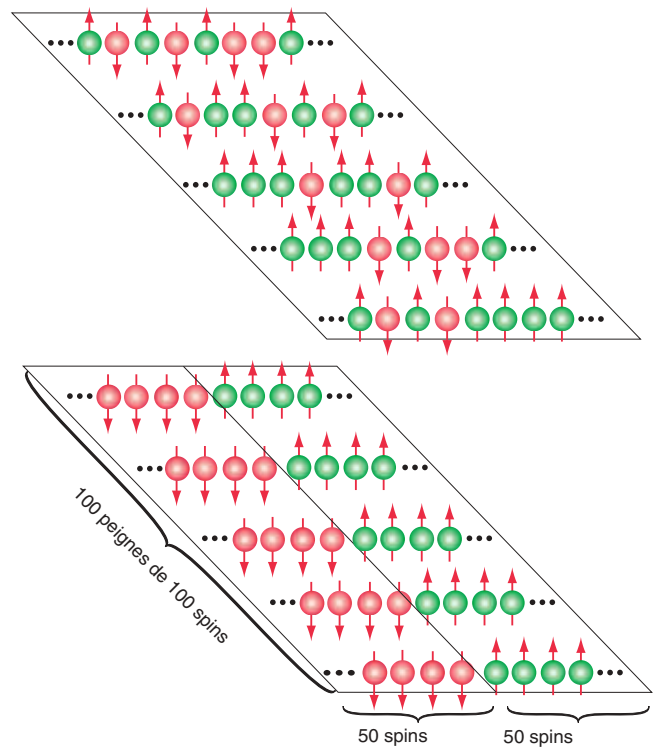
Le premier calcul exact

Une fois le chemin ouvert par Onsager, le modèle d'Ising à deux dimensions fut résolu par plusieurs méthodes. On a aussi fait des calculs dans le cas de systèmes à deux dimensions qui ressemblent à celui d'Ising, mais qui diffèrent par un aspect de leur géométrie ou par le type d'interaction des spins. Malheureusement, jusqu'à présent, le modèle d'Ising à trois dimensions n'a pas été résolu de manière exacte, ce qui frustre les physiciens.

Que change une dimension de plus? Certes, un modèle est plan, l'autre non. Pourtant la géométrie du réseau – les distances et les angles – ne joue aucun rôle dans la définition de la fonction de partition. Seule compte la topologie du

système, c'est-à-dire les connexions entre les sites les plus proches. Imaginons un système d'Ising tridimensionnel, un cube dont les arêtes renferment le même nombre de spins. Un tel système est constitué par l'empilement d'un certain nombre de carrés de spins. Nous pouvons les faire glisser, puis les disposer sur un plan. Le carré de spins de grande taille ainsi obtenu est-il un modèle d'Ising bidimensionnel? Non. La différence tient au fait que pour respecter la structure des interactions à trois dimensions, il faut admettre que de nombreux spins interagissent avec tous ceux qui leur sont proches à trois dimensions. Les anciens voisins participent donc à une série d'interactions à distance, que les spécialistes du modèle d'Ising qualifient de «liaisons non planes». Un système d'Ising tridimensionnel est donc l'équivalent d'un système d'Ising bidimensionnel, auquel on a ajouté un certain nombre de liaisons non planes, ce qui change... tout!

Tullio Regge de l'Institut Polytechnique de Turin et Riccardo Zecchina du Centre international pour la physique théorique de Trieste se sont récemment intéressés à la fonction de partition d'un réseau bidimensionnel, que l'on rend tridimensionnel en ajoutant des liaisons non planes, une à une. Ils espèrent ainsi explorer progressivement le territoire qui sépare les modèles d'Ising bidimensionnels des modèles tridimensionnels. Ils ont constaté qu'à chaque fois que l'on ajoute une liaison non plane, le volume du calcul nécessaire pour la fonction de partition double, quelle que soit la méthode utilisée. Les temps de calcul augmentent donc exponentiellement avec le nombre de liaisons non planes. C'est pourquoi le système d'Ising à trois dimensions est beaucoup plus difficile à résoudre que celui à deux dimensions. Curieusement, au-delà de trois dimensions, la situation se simplifie. Dans un réseau à quatre dimensions (et plus), les connexions sont assez denses pour qu'il soit possible de considérer que chaque spin est soumis à un



4. À DEUX DIMENSIONS (en haut), le modèle d'Ising présente un tout autre comportement qu'à une dimension. Le prix énergétique à payer pour faire sortir le système d'Ising à deux dimensions d'un état d'aimantation est beaucoup plus grand que dans le cas unidimensionnel. Ainsi, dans le cas d'un système de 10 000 spins composé de 100 peignes de 100 spins (en bas), le prix énergétique à payer pour faire passer le système de l'état de complète aimantation (10 000 spins parallèles) à celui où 5 000 spins ont basculé est au moins égal à l'énergie d'interaction de 100 paires.

champ magnétique moyen résultant de la combinaison des spins voisins.

Je ne voudrais pas laisser croire que l'on ignore tout du modèle d'Ising à trois dimensions. Certes, le calcul exact de sa fonction de partition reste à faire, mais la région proche du point critique a pu être étudiée par diverses méthodes approximatives. L'une de ces approches, le développement en séries, aurait plu à Laplace. On extrapole les solutions à basse et à haute température pour en déduire leur comportement dans la région des températures intermédiaires.

Une autre méthode d'approximation a un nom qui pourrait évoquer les pires moments du stalinisme : le groupe de renormalisation. Pour résumer, l'algorithme tiré de la théorie de la renormalisation consiste à réunir des sous-ensembles de spins par blocs (carrés de spins,...), puis à remplacer chaque bloc par un spin équivalent ; ensuite, les liaisons entre les spins ainsi redéfinies sont ajustées afin de compenser l'effet de la création des blocs.

Une dernière technique est très employée pour explorer de façon approchée le modèle d'Ising à trois dimensions : la méthode de Monte Carlo. Elle porte ce nom parce qu'elle