

### 3. HAMILTONIEN DU MODÈLE D'ISING

*J'introduis ici un concept majeur dans le cadre du modèle d'Ising : la grandeur physique qui mesure l'énergie du système. L'expression de celle-ci constitue, en effet, le point de départ de toute théorie. On l'appelle le hamiltonien du système. Cet hamiltonien modélise deux interactions à la fois. Les spins ont effectivement tendance à s'aligner entre eux ; c'est ce que l'on désigne par interaction ferromagnétique. Cependant, en présence d'un paramètre champ extérieur contrôlé par l'expérimentateur, les spins souhaiteront également s'aligner avec ce dernier ; c'est l'interaction paramagnétique. Finalement, une grande partie de cette note est consacrée à l'étude de ce qui est dit état fondamental du système : c'est la configuration des spins qui rend l'énergie la plus petite possible. L'état fondamental joue, en effet, un rôle majeur : à température nulle ou quasi nulle (je signifie par là que si l'on néglige les fluctuations dues à l'agitation thermique), cette configuration représente la solution d'équilibre du système. En d'autres termes, c'est la solution du problème de la physique à température nulle.*

*Maxime Baczyk, 2023*

A une configuration du système  $\mathcal{C} = (S_1, \dots, S_N)$  donnée, on associe l'énergie suivante :

$$(1) \quad \mathcal{H}(\mathcal{C}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

Cette fonction mathématique des degrés de liberté joue un rôle fondamental et est appelée hamiltonien du système.

Les paramètres  $h$  et  $J$  intervenant dans l'expression ci-dessus sont des paramètres extérieurs fixés qui traduisent l'intensité des interactions tandis que la notation  $\langle i, j \rangle$  sous la première somme désigne les sites  $(i, j)$  étant plus proches voisins sur le réseau.<sup>A</sup>

Traditionnellement, on parle de modèle ferromagnétique lorsque  $J$  est choisi positif et, dans ce cas, ce paramètre traduit l'intensité de l'interaction qui tend à aligner les spins entre voisins sur le réseau. En effet, un système physique a tendance à vouloir minimiser son énergie totale.<sup>B</sup> Or, le terme  $-J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$  du hamiltonien est minimal si le produit de deux spins voisins  $S_i S_j$  est le plus

---

<sup>A</sup>Par exemple, pour une chaîne de spins, chaque site excepté ceux aux extrémités admet deux plus proches voisins sur le réseau. Pour les réseaux bidimensionnel carré et tridimensionnel cubique, il y a respectivement quatre et six plus proches voisins pour un site donné n'étant pas au bord du réseau.

<sup>B</sup>Plus précisément, à température non nulle, le système atteint son équilibre en minimisant son énergie libre et celle-ci possède une composante entropique en plus de la partie énergétique. Ceci sera abordé dans la suite du cours et démontré dans la note 6.

grand possible, c'est à dire, si ce produit est égal à 1, et donc, si les spins sont de mêmes signes. On appelle interaction ferromagnétique le premier terme du hamiltonien dans l'Eq. (1).

Le second terme dans l'expression du hamiltonien ci-dessus est quant-à lui dit terme paramagnétique et la quantité  $h$  peut s'interpréter comme un champ magnétique extérieur. La somme  $-h \sum_i S_i$  est minimale quand le produit  $h S_i$  est maximal pour tous les spins. Ces derniers doivent donc être du signe de  $h$  pour minimiser l'énergie.

Ainsi, en général, le hamiltonien décrit à la fois le ferromagnétisme et le paramagnétisme.<sup>C</sup>

On peut également noter que le premier terme du hamiltonien de l'Eq. (1) est simple en dimension 1. En effet, concernant une chaîne rectiligne de spins, il prend la forme qui suit

$$(2) \quad \mathcal{H}(\mathcal{C}) = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - h \sum_{i=1}^N S_i$$

En développant les sommes formelles, cela se réécrit :

$$(3) \quad \mathcal{H}(\mathcal{C}) = -J(S_1 S_2 + \dots + S_{N-1} S_N) - h(S_1 + \dots + S_N)$$

Cet hamiltonien sera considéré dans un futur chapitre lorsqu'on étudiera le modèle d'ISING à basse dimension.

Sur le plan purement énergétique, une caractéristique très importante du système est son état fondamental : c'est la configuration qui minimise l'énergie. Comme cela sera justifié dans la suite,<sup>D</sup> cette configuration particulière correspond à la solution d'équilibre du système à température nulle. Bien-sûr, la cas d'une température finie différente de zéro sera envisagé ultérieurement.

On parle d'état fondamental pour cette configuration d'énergie minimale et de niveau fondamental pour la valeur de l'énergie associée.

Par exemple, en s'intéressant à la situation  $h = 0$ , le minimum du hamiltonien

---

<sup>C</sup>Le modèle peut se généraliser à des couplages entre spins différents selon le site considéré  $J \mapsto J_{ij}$  et, aussi, avec un champ externe variable dans l'espace  $h \mapsto h_i$ . Le hamiltonien de l'Eq. (1) prend alors la forme suivante :

$$\mathcal{H}(\mathcal{C}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i$$

avec  $J_{ij}, h_i \in \mathbb{R}$  quels que soient  $i$  et  $j$ . Lorsque  $J_{ij} \geq 0$  pour tout  $(i, j)$ , on parle de modèle ferromagnétique. Au contraire, si  $J_{ij} \leq 0$  quels que soient  $i$  et  $j$ , on dira que le modèle est anti-ferromagnétique.

<sup>D</sup>La démonstration se trouve dans la note 5.

s'identifie aux deux configurations où tous les spins sont dans le même sens.

$$(4) \quad \mathcal{C}_{0\pm} = \pm(1, \dots, 1)$$

On dit alors que l'état fondamental est dégénéré deux fois.<sup>E</sup> Le niveau fondamental est égal à

$$(5) \quad \mathcal{E}_0 = \mathcal{H}(\mathcal{C}_{0\pm}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} 1 = -J N_L$$

où  $N_L$  dénote le nombre de liens en interaction sur le réseau.<sup>F</sup> La valeur de  $N_L$  dépend évidemment de la géométrie du réseau ; par exemple, pour une chaîne rectiligne de spins, on obtient

$$(6) \quad N_L = N - 1$$

et donc

$$(7) \quad \mathcal{E}_0 = -J(N - 1)$$

En dimension quelconque, il est pratique d'utiliser des conditions aux limites périodiques pour le réseau. Dans ce cas, il n'y a plus de bord et la géométrie est équivalente pour tous les sites du réseau.<sup>G</sup> On peut, de cette manière, relier le nombre de liens en interaction au nombre de plus proches voisins d'un site quelconque du réseau, que l'on notera  $\nu$ .

$$(8) \quad N_L = \frac{N\nu}{2}$$

Et, pour le réseau hypercubique en dimension  $d$ , on a

$$(9) \quad \nu = 2d$$

Il est, de cette manière, possible d'exprimer le niveau fondamental du modèle en l'absence de champ extérieur pour un réseau hypercubique avec des conditions de bord périodiques quelle que soit la dimension  $d$ . On précise que, pour l'anneau d'ISING, on retrouve bien une expression similaire à l'Eq. (7) mais avec un lien en plus :

$$(10) \quad \mathcal{E}_0 = -JN$$

Ainsi, le système à l'équilibre et à température nulle est parfaitement ordonné

<sup>E</sup>D'une manière générale, le système possède  $N_E$  niveaux d'énergie  $\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_{N_E-1}$  et la dégénérescence d'un niveau  $\mathcal{E}_k$  s'identifie au nombre de configurations ayant pour énergie  $\mathcal{E}_k$ .

<sup>F</sup>Un lien relie deux spins plus proches voisins sur le réseau.

<sup>G</sup>En dimension  $d = 1$ , choisir des conditions aux limites périodiques revient à imposer un lien supplémentaire entre le dernier spin de la chaîne  $S_N$  et le premier spin  $S_1$  ; on interprète alors géométriquement le réseau comme un anneau. Ce modèle porte le nom d'anneau d'ISING.

en l'absence de champ magnétique extérieur.<sup>H</sup> L'état fondamental correspond en effet à une configuration où tous les spins pointent dans le même sens.

Pour un champ magnétique  $h \neq 0$ , la dégénérescence  $g_0 = 2$  de l'état fondamental est levée.

L'aspect énergétique du modèle a été discuté dans cette section à travers la présentation du hamiltonien. Les notions d'état fondamental et de niveau fondamental du système ont aussi été introduites en insistant sur le fait que ce sont ces caractéristiques qui gouvernent la physique à température nulle.

---

<sup>H</sup>La compétition entre l'ordre et le désordre à température non nulle est discutée dans les cours suivants.