4. Symétrie $\mathbb{Z}_2$ et généralisations du modèle

Je discute dans ces notes la notion de symétrie qui est primordiale pour comprendre les phénomènes de transitions de phases d'un point de vue fondamental. Un concept important est le paramètre champ magnétique extérieur (c'est à dire, contrôlé par l'expérimentateur) h introduit dans le cours précédent. On remarque, en effet, qu'en l'absence de celui-ci, le modèle d'Ising présente une symétrie par renversement de tous les spins i.e. en prenant la valeur opposée pour chaque spin. Cette symétrie est extrêmement fondamentale dans le modèle d'Ising et est, en réalité, brisée spontanément lors de la transition de phases lorsqu'on entre dans la phase de basse température. A contrario, si le paramètre champ extérieur h est non nul, cette symétrie sera brisée explicitement dès le départ. En conclusion, une symétrie peut être brisée explicitement par la présence d'un paramètre extérieur ou spontanément en l'absence de ce paramètre lors d'une transition de phases. La suite de cette section est plus technique et concerne la présentation de deux axes de généralisation possibles pour le modèle et la symétrie.

Maxime Baczyk, 2023

Une symétrie du système correspond à une transformation des degrés de liberté, en l'occurrence les spins, qui laisse invariant le hamiltonien.

On rappelle le hamiltonien du modèle d'Ising en champ magnétique nul $h = 0$.

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

Le système est, dans ce cas, symétrique sous renversement des spins. En effet, l'opération $S_i \mapsto -S_i$ pour tout i laisse invariant le hamiltonien ci-dessus. Cette transformation accompagnée de l'identité[A] forment un groupe au sens mathématique du terme : c'est le groupe cyclique à deux éléments[B] noté $\mathbb{Z}_2$.

Le modèle d'Ising en champ extérieur nul présente donc la symétrie $\mathbb{Z}_2$. Cette caractéristique du modèle est fondamentale ; c'est cette symétrie qui est spontanément brisée lors de la transition ferromagnétique à basse température. Ce mécanisme de brisure de symétrie sera détaillé dans les cours suivants. On peut d'ores et déjà noter que la présence d'un champ magnétique $h \neq 0$ dans le hamiltonien brise explicitement la symétrie.

[A] L'identité est l'opération triviale $S_i \mapsto S_i$ pour tout i ; elle ne traduit aucune modification.

[B] C'est le groupe non trivial, c'est à dire non réduit à un unique élément, le plus simple. L'élément neutre du groupe est la transformation identité et le second élément, ici l'opération de renversement, renvoie le neutre lorsqu'il est composé deux fois.

On s'attache désormais à construire des modèles plus généraux que le modèle d'Ising tout en discutant les symétries.

Un axe de généralisation possible pour le modèle consiste à remplacer les spins d'Ising par des vecteurs : on considère que les degrés de liberté sont des grandeurs vectorielles dans un espace à $n \geqslant 1$ dimensions avec une norme, c'est à dire, une longueur égale à 1.[C] Il ne faut pas confondre l'espace de dimension n dans lequel varient les spins et l'espace de dimension d associé au réseau ; le premier est appelé espace interne et le second espace physique. Les entiers n et d peuvent être, à priori, différents. Pour ce nouveau modèle, le hamiltonien prend la forme qui suit

$$\mathcal{H}(\mathcal{C}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i \tag{2}$$

où le point entre les vecteurs dénote le produit scalaire. Le modèle ci-dessus est appelé modèle vectoriel $O(n)$. Ce nom est à relier à la symétrie présentée par le système en champ magnétique nul $\vec{h} = \vec{0}$; le hamiltonien est alors invariant sous toute isométrie, c'est à dire, sous toute transformation préservant les longueurs dans l'espace interne. Le groupe de symétrie associé est noté $O(n)$ en mathématiques et celui-ci contient notamment les rotations. Dans la transition de phases décrite par ce modèle, c'est bien cette symétrie qui est spontanément brisée dans la phase de basse température.

Les cas particuliers $O(2)$ et $O(3)$ constituent des versions intéressantes du modèle et s'appellent respectivement modèle XY et modèle classique de Heisenberg.

On insiste sur le fait que le modèle $O(1)$ correspond exactement au modèle d'Ising : la symétrie $O(1)$ s'identifie à $\mathbb{Z}_2$. Les variables sont discrètes, et même binaires, pour $n = 1$ tandis qu'elles adoptent un caractère continu lorsque $n \geqslant 2$.

On peut également généraliser le modèle d'Ising à l'aide d'une autre approche qui préserve la nature discrète des spins. Pour cela, on présente tout d'abord une seconde écriture équivalente pour le hamiltonien du modèle à l'aide du symbole de Kronecker δ_{ab}.[D] Le hamiltonien d'Ising prend la forme

$$\mathcal{H}(\mathcal{C}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(2\,\delta_{S_i S_j} - 1\right) - h \sum_i \left(2\,\delta_{S_i 1} - 1\right) \tag{3}$$

Il est possible d'étendre cette expression dans un modèle général pour lequel les spins ne sont plus nécessairement binaires mais possèdent q valeurs distinctes

[C] Pour un tel spin $\vec{S}$, on a donc $\vec{S} \in \mathbb{R}^n$ et $\|\vec{S}\| = 1$. Ainsi, les spins varient sur la sphère unité. Cette dernière est une variété différentielle de dimension $n - 1$ plongée dans l'espace vectoriel réel de dimension n.

[D] Le symbole de Kronecker est défini par $\delta_{ab} = 1$ si $a = b$ et $\delta_{ab} = 0$ sinon.

où q est un entier supérieur ou égal à 2.

$$S_i \in \Big\{1; 2; \cdots; q\Big\} \text{ pour tout } i \tag{4}$$

Cette extension porte le nom de modèle de POTTS à q états et le hamiltonien associé s'écrit

$$\mathcal{H}(\mathcal{C}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \big(q\, \delta_{S_i S_j} - 1\big) - h \sum_i \big(q\, \delta_{S_i 1} - 1\big) \tag{5}$$

Le système présente alors une invariance par permutation des q états pris par les spins. Mathématiquement, le groupe de symétrie qui entre en jeu est le groupe des permutations de l'ensemble $\{1; \cdots; q\}$; il est noté $\mathfrak{S}_q$.[E] Les cas $q = 3$ et $q = 4$ ont beaucoup été étudiés ; la version à quatre états est souvent appelée modèle de ASHKIN-TELLER.

On a discuté, dans cette section, la symétrie fondamentale du modèle d'ISING et deux voies de généralisation possibles ont été présentées. Alors que la première fait intervenir des vecteurs et des degrés de liberté continus, la seconde approche conserve le caractère discret du spin d'ISING. Dans les cas simples du modèle vectoriel $O(1)$ et du modèle de POTTS à deux états, on retombe bien sur le modèle d'ISING étudié principalement ici.[F]

[E] $\mathfrak{S}_q$ est un groupe bien connu en mathématiques. Il est d'ordre $q\,!$ et non commutatif dès que $q \geqslant 3$.

[F] Les groupes $O(1)$ et $\mathfrak{S}_2$ sont isomorphes à $\mathbb{Z}_2$, c'est à dire que l'on peut les identifier.