## Chapitre 3

# Transitions de phase

De nombreux modèles économiques reposent sur l'hypothèse de l'homo œconomicus : l'agent économique serait rationnel, individualiste et capable d'analyser et d'anticiper les événements afin de maximiser sa satisfaction. A condition bien sûr d'avoir une information complète sur la situation d'un marché... Au contraire, des économistes et des psycho-sociologues mettent en évidence le *comportement collectif* de l'opinion : mimétisme, émotivité et panique rythment la vie des agents économiques, qui n'ont d'ailleurs accès qu'à une information partielle sur les marchés (par le milieu professionnel, les média...).

Par ailleurs, l'étude de la pléthore de données sur les marchés financiers montre que l'hypothèse gaussienne du modèle de Black-Scholes est souvent remise en question par l'observation de distributions en *loi de puissance*.

Une question (de physicien ?) se pose alors : Ces comportements collectifs des agents économiques ne seraient-ils pas à l'origine des lois de puissance observées en finance ? Et dans ce cas, quelles sont les caractéristiques locales, individuelles, des agents décrivant leurs interactions et leur perception du marché, qui donnent lieu à des phénomènes collectifs globaux comme les bulles spéculatives et les krachs boursiers ?

Ces questions lorsqu'elles sont posées dans le cadre de l'étude de systèmes matériels sont à la base de la physique statistique. L'objet de cette branche de la physique est en effet de décrire le passage entre une *description microscopique* de la matière (atomes, interactions) et les *propriétés macroscopiques* d'un système (pression, température) : du local au global. Ainsi les comportements collectifs humains présentent des analogies avec les transitions de phase observées dans la nature et étudiées en physique statistique. Une transition de phase (par exemple entre un liquide et un gaz) est décrite par un paramètre de contrôle (la température) et un paramètre d'ordre (la différence de densité entre les deux phases) qui pour une certaine valeur du paramètre de contrôle passe d'une valeur nulle à une valeur finie, décrivant l'apparition brutale d'un phénomène macroscopique (la formation d'une goutte de liquide dans un gaz). Lorsque le paramètre d'ordre varie continûment, on parle de *transitions de phase continues* ou de phénomènes critiques. Dans ce cas, le changement de phase est accompagné de comportements en loi de puissance des quantités physiques qui décrivent le système. La tentation est donc grande de comprendre les lois de puissance observées en finance en termes de transitions de phases continues.<sup>1</sup>

Nous présentons dans ce chapitre deux modèles fondamentaux en physique statistique l'un purement géométrique, la percolation, l'autre thermodynamique, le modèle d'Ising.

### 3.1 Théorie de la percolation

### 3.1.1 Introduction

Un modèle de percolation est constitué par un ensemble de N sites et par une règle de connexion définissant des *liens* entre paires de sites.<sup>2</sup> Par exemple, un lien peut être défini entre sites plus proches voisins sur un réseau ou à l'aide d'une distance de coupure dans un espace continu. D'une façon générale :

- un site est occupé (ou actif) avec une probabilité q, ou vide (ou inactif) avec la probabilité 1 q,
- un lien entre deux sites *occupés* est présent (actif) avec une probabilité<sup>3</sup> p, ou coupé (inactif) avec une probabilité 1 p.

On parle selon les cas de percolation de sites (p = 1, tous les liens possibles sont actifs) ou de percolation de liens (q = 1, tous les sites sont occupés). Puisque la probabilité d'activation des sites (et/ou des liens) est indépendante de l'environnement local, *il n'y a pas d'interaction entre les sites*. Un ensemble de *s* sites occupés et connectés entre eux par des liens (actifs) forme un *amas* de taille *s*.

Une fois les N sites placés (dimension de l'espace d, choix d'un réseau ou espace continu) et la règle de connexion choisie, les seuls paramètres du modèle sont les probabilités d'activation des sites et/ou des liens. Pour une valeur donnée de p et q, il y a un nombre moyen d'amas de taille s, noté  $n_s$ . Comme nous le verrons, cette distribution en taille des amas est centrale dans la théorie de la percolation. Elle permet en particulier de calculer la taille moyenne des amas et de décrire le phénomène de percolation : l'apparition, pour une certaine valeur des probabilités d'activation, d'un amas percolant qui connecte les bords du système.

La théorie de la percolation est utilisée dans de nombreux domaines pour modéliser la structure ou la transmission d'information de milieux désordonnés : Voici quelques exemples typiques :

- la gélification des polymères qui marque la formation d'un réseau de macromolécules enchevêtrées,
- la conductivité électrique d'un réseau métallique (percolation de liens) ou d'un mélange de particules isolantes et de particules conductrices (percolation de sites),

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Mais il y a d'autres mécanismes en physique qui engendrent des lois de puissance.

 $<sup>^2\</sup>mathrm{L'ouvrage}$  de base est Introduction to percolation theory, par D Stauffer et A. Aharony (Taylor and Francis, Londres 1994).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Il n'y a a priori aucune relation entre p et q.

- la propagation d'un fluide dans un milieu poreux (par exemple du pétrole dans des roches),
- la propagation d'une épidémie ou d'un feu de forêt,
- la fragmentation en amas (agrégats, noyaux atomiques, gouttes liquides),
- les problèmes de réseaux d'information (liaisons téléphoniques, communications, transports),
- les phénomènes collectifs dans les marchés financiers ( "herding", c'est à dire le comportement de troupeau des spéculateurs).

Dans tous ces exemples, on part d'une *description microscopique* en terme de sites indépendants (polymères, atomes, pores, individus sains, arbres, agents financiers) pour mettre en évidence un *comportement macroscopique* ou collectif (formation d'un gel, conductivité, transmission d'un fluide ou d'une information, "herding"...).

Nous allons à présent décrire le cas particulier de la percolation de liens illustré par la figure 3.1, dans le cas de sites placés aux nœuds d'un réseau carré. Comme le montre la figure 3.3, la percolation de sites présente le même comportement.



FIG. 3.1 – Percolation de liens (q = 1) sur un réseau carré :  $p < p_c$  (à gauche),  $p = p_c$  (au milieu) et  $p > p_c$  (à droite).

Lorsque p est proche de zéro, la plupart des sites sont isolés ou forment de petits amas. A l'inverse, si p est proche de 1, pratiquement tous les sites appartiennent au même amas, appelé "amas percolant", qui connecte les bords du système (réseau). Dans les systèmes de taille infinie, cet amas percolant (et donc de taille infinie) apparaît brusquement pour une certaine valeur de la probabilité,  $p_c$ , appelée seuil de percolation, telle que pour  $p < p_c$  il n'y a que des amas de tailles finies et pour  $p \ge p_c$  il existe un amas percolant (infini).<sup>4</sup>

Pour chaque réalisation, il existe un amas plus grand que les autres de taille  $S_{max}$ , on définit alors la fraction moyenne de sites occupés appartenant à l'amas le plus grand :

$$P = \frac{\langle S_{max} \rangle}{N}$$

Puisque  $S_{max}$  est finie pour  $p < p_c$ , et est égale à la taille de l'amas percolant pour  $p \ge p_c$ , la fraction P passe de zéro à une valeur finie au seuil de percolation pour  $N \to \infty$  (voir figure 3.2).

 $<sup>^4{\</sup>rm Pour}$ mieux visualiser le phénomène de percolation, utiliser l'applet du site : http://www.physics.buffalo.edu/gonsalves/Java/Percolation.html



FIG. 3.2 – Fraction moyenne de sites occupés appartenant à l'amas le plus grand en percolation de liens.

La taille moyenne des amas est définie à l'aide de la distribution en taille des amas,  $n_s$ . Choisissons aléatoirement un site occupé,<sup>5</sup> la probabilité qu'il appartienne à un amas de taille s est

$$\frac{s n_s}{\sum_{s \ge 1} s n_s}$$

la taille moyenne des amas est donc

$$\langle S \rangle = \sum_{s \ge 1} s \frac{s \, n_s}{\sum_{s \ge 1} s n_s} = \frac{m_2}{m_1}$$

où  $m_k = \sum_{s \ge 1} s^k n_s$  est le moment d'ordre k de la distribution en taille des amas. Ainsi,  $m_0$  est le nombre moyen d'amas (multiplicité) et  $m_1 = qN$  est le nombre moyen de sites occupés. On voit que  $m_2$  est directement lié à la taille moyenne des amas.

Il s'agit à présent de calculer pour un réseau donné, la fraction P de sites appartenant à l'amas percolant, ainsi que la distribution en taille et ses moments en fonction des probabilités d'activation p et q. Il y a peu de résultats exacts en percolation. Nous allons traiter deux cas particuliers : le réseau unidimensionnel et l'approximation du champ moyen.

$$\frac{\overline{\sum_{s\geq 1} n_s}}{\overline{\sum_{s\geq 1} n_s}}$$
amas est  $\langle S \rangle = \sum s_s$ 

et dans ce cas, la taille moyenne des amas est  $\langle S \rangle = \sum s \frac{n_s}{\sum n_s} = m_1/m_0.$ 

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>De l'importance de bien définir l'espace des observables (voir également la note 6) : il existe une autre définition de la taille moyenne des amas : choisissons un *amas* au hasard. La probabilité qu'il soit de taille *s* vaut  $n_s$ 

.



FIG. 3.3 – Percolation de sites sur un réseau carré de  $100 \times 100$  sites (p = 1):  $q = 0.1 < q_c$  (en haut);  $q = 0.6 \simeq q_c$  (au milieu);  $q = 0.9 > q_c$  (en bas).

### 3.1.2 Percolation de sites à une dimension

Soient N sites placés sur une droite et occupés avec la probabilité q (voir figure 3.4). Pour simplifier le problème et négliger les effets de bords, on se place dans la limite  $N \to \infty$ .

On voit immédiatement que la percolation unidimensionnelle est un cas pathologique : pour qu'un amas percole, il faut que tous les sites soient occupés. Le seuil de percolation est donc  $q_c = 1$  et on ne peut pas dans ce cas particulier étudier la phase percolante  $q > q_c$ . Nous allons tout de même calculer la distribution en taille des amas et leur taille moyenne pour  $q < q_c$ .



FIG. 3.4 – Percolation de sites à une dimension.

Pour décrire l'espace des observables, on peut raisonner sur les sites plutôt que sur les amas<sup>6</sup> : la probabilité pour qu'un *site occupé* choisi aléatoirement appartienne à un amas de taille s est

$$n_s(q) = sq^{s-1}(1-q)^2.$$

En effet, on sait déjà que le site choisi est occupé, ses s-1 sites voisins doivent être occupés avec la probabilité q et les deux extrémités vides avec la probabilité 1-q, enfin, il y a s sites possibles que l'on peut choisir dans l'amas. On trouve bien sûr que  $\sum_{s=1}^{\infty} n_s = 1$ : un site occupé appartient forcément à un amas de taille  $s \ge 1$ . Notons qu'à la limite  $q \to q_c$  et pour les amas de grandes tailles, la distribution en taille peut s'écrire sous la forme :

$$n_s(q) \sim s^{-\tau} f((q_c - q)s^{\sigma}),$$

où  $\tau = 1$ ,  $\sigma = 1$  et  $f(z) = z^2 e^{-z}$ . Nous reviendrons plus loin sur ce comportement en loi de puissance. La taille moyenne des amas est donc

$$\langle S \rangle = \sum_{s \ge 1} sn_s(q) = (1-q)^2 \sum_{s \ge 1} s^2 q^{s-1} = \frac{1+q}{1-q}.$$

$$n_s(q) = q^{s-1}(1-q),$$

car on sait déjà que le site choisi est à l'extrémité gauche, donc qu'il est occupé et que son voisin de gauche est vide. On a bien sûr  $\sum_{s=1}^{s} q^{s-1}(1-q) = 1$ : un amas a forcément une taille  $s \ge 1$ . La taille moyenne des amas est alors

$$\langle S \rangle = \sum_{s \ge 1} sn_s(q) = (1-q) \sum_{s \ge 1} sq^{s-1} = \frac{1}{1-q}.$$

On retrouve un comportement analogue en raisonnant sur les sites directement.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Remarquons que décrire l'espace des observables à l'aide des *amas* est plus ambigu : la probabilité de choisir un amas parmi une collection d'amas est-elle proportionnelle à sa taille ou non?  $sq^s$  ou  $q^s$ ? Supposons que l'on sélectionne les amas, par exemple, par l'extrémité gauche (indépendamment de leur taille). La probabilité que ce site occupé soit l'extrémité gauche d'un amas de taille s est

Ainsi, quand<sup>7</sup>  $q \rightarrow q_c = 1$ , la taille moyenne des amas diverge en

$$\langle S \rangle \sim (q_c - q)^{-\gamma},$$

où  $\gamma = 1$ . Et puisque la phase percolante n'est pas accessible, on ne peut pas étudier le comportement de la fraction P de sites appartenant à l'amas percolant.

### 3.1.3 Percolation de liens en champ moyen

Considérons une percolation de liens de probabilité p entre un ensemble de sites numérotés de 1 à N, mais pas forcément placés aux nœuds d'un réseau.

Soit  $P_i$  la probabilité qu'un site *i* arbitraire appartienne à l'amas percolant. Nous allons estimer de deux façons différentes la probabilité qu'un site *i ne* fasse pas partie de l'amas percolant. C'est d'une part  $1 - P_i$ . Raisonnons à présent sur les sites voisins de *i*, notés j(i). La probabilité pour que le site *i* ne soit pas relié à l'amas percolant par l'intermédiaire du site j est<sup>8</sup>  $1 - pP_j$ . Pour que le site *i* n'appartienne pas à l'amas percolant, il faut qu'aucun de ses voisins auxquels il est lié n'appartienne à l'amas percolant. En supposant ces événements indépendants (approximation du champ moyen) on obtient :<sup>9</sup>

$$1 - P_i = \prod_{j(i)} \left( 1 - pP_j \right).$$

Les sites jouant des rôles équivalents,  $P_i$  ne dépend pas de i et  $P_i = P$ . On peut donc écrire

$$1 - P = (1 - pP)^{z}, (3.1)$$

où z (la coordinence) est le nombre de plus proches voisins de chaque site. La figure 3.5 donne une résolution graphique de cette équation auto-cohérente. On voit qu'elle admet une solution autre que la solution triviale P = 0 si et seulement si  $p > p_c = 1/z$ . La figure 3.6 représente la dépendance de la fraction P en fonction de la probabilité p.

Étudions le comportement de P au voisinage de  $p_c$ . Puisque  $P \simeq 0$  on obtient en développant le second membre de l'équation (3.1) :

$$1 - P = (1 - pP)^{z} \simeq 1 - zpP + \frac{z(z - 1)}{2}(pP)^{2} + \dots$$

Donc

$$P \sim \left(p - p_c\right)^{\beta},$$

avec  $\beta = 1$ . La taille moyenne de l'amas percolant augmente donc continûment avec un comportement en loi de puissance au voisinage du seuil de percolation.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Lorsque  $q \to 0$ , la taille des rares amas vaut évidemment 1.

 $<sup>^8 {\</sup>rm La}$  probabilité  $pP_j$  est la probabilité que le site i soit relié au site j et que le site j appartienne à l'amas percolant.

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Si la probabilité d'activation de liens est élevée, il est peu probable que ces événements soient indépendants. En effet, les sites voisins peuvent être connectés entre eux indirectement.





FIG. 3.5 – Résolution graphique de l'équation (3.1) pour deux valeurs  $p < p_c$  et  $p > p_c$ . Ici z = 3.

FIG. 3.6 – Probabilité P qu'un site appartienne à l'amas percolant. Le seuil de percolation est  $p_c = 1/3$ .

### Le réseau complet

Dans le cas où la règle de connexion autorise un lien entre *tous* les sites, soit N(N-1)/2 paires, l'approximation du champ moyen devient exacte. On a alors z = N - 1. Le seuil de percolation est donc, dans la limite  $N \to \infty$ :

$$p_c \simeq 1/N.$$

Au seuil de percolation, il y a donc un lien par site en moyenne.

### 3.1.4 Transition de phase géométrique et universalité

Des calculs plus sophistiqués, utilisant des approximations, et des simulations numériques sur divers réseaux montrent que les résultats précédents sont typiques de la percolation : Le passage du seuil de percolation est toujours accompagné d'un comportement en loi de puissance des grandeurs géométriques associées à la distribution en taille des amas. En particulier, dans la limite  $N \to \infty$  (on se place ici dans le cas de la percolation de liens) :

• La fraction moyenne de sites appartenant à l'amas le plus grand,  $P = \langle S_{max} \rangle / N$ , est nulle pour  $p < p_c$  et se comporte *au voisinage du seuil de percolation* comme :

$$P_{max} \sim (p - p_c)^{\beta}$$
 pour  $p \ge p_c$ .

• La distribution en taille pour les grands amas (s >> 1) est en loi de puissance *au voisinage du seuil de percolation* :

$$n_s(p) = s^{-\tau} f[(p - p_c)s^{\sigma}] \sim s^{-\tau} \quad \text{pour} \quad p \simeq p_c,$$

où f est une fonction d'échelle telle que f(0) = 1.

### 3.1. THÉORIE DE LA PERCOLATION

• Le moment d'ordre k de la distribution en taille  $n'_s$ , obtenu en ôtant la contribution de l'amas le plus grand, s'exprime alors comme :<sup>10</sup>

$$m_k = \sum_{s} s^k n'_s \sim |p - p_c|^{(\tau - 1 - k)/\sigma}$$

En particulier, la taille moyenne des amas peut s'écrire<sup>11</sup>

$$\langle S \rangle \sim m_2 \sim \mid p - p_c \mid^{(\tau - 3)/\sigma} \sim \mid p - p_c \mid^{-\gamma}$$

Ainsi, au seuil de percolation, la distribution en taille des amas est en loi de puissance, et l'exposant  $\gamma$  étant toujours positif ( $\tau < 3$ ), la variance de la distribution, et donc la taille moyenne des amas, divergent.<sup>12</sup> La figure 3.7 montre le comportement de P et  $\langle S \rangle$  obtenues par simulations numériques sur un réseau carré.



FIG. 3.7 – Percolation de sites : Fraction P de sites appartenant à l'amas percolant et taille moyenne des amas  $\langle S \rangle$  (à un facteur multiplicatif près) en fonction de la probabilité q qu'un site soit occupé (simulations sur réseau carré de 500 X 500 sites). Le seuil de percolation est  $q_c \simeq 0.6$ .

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>En effet, au seuil de percolation,  $m_k \simeq \sum_s s^{k-\tau} f[(p-p_c)s^{\sigma}] \sim \int s^{1+k-\tau} f(z) \frac{ds}{s}$ . En effectuant le changement de variables  $z = (p-p_c)s^{\sigma}$  on trouve le comportement critique des moments.

 $<sup>^{11}\</sup>mathrm{La}$  contribution de  $m_1=qN$  reste finie au seuil de percolation.

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup>Au seuil de percolation, l'amas percolant a une structure fractale. Ce qui veut dire que le nombre de sites de cet amas contenus dans une boîte de côté R croît comme  $R^{d'}$ , où  $d' \neq d$ , dimension de l'espace. Par exemple d' = 91/48 à 2d et  $\simeq 2.3$  à 3d.

Le comportement de la distribution en taille des amas est représenté sur la figure 3.8 pour quelques valeurs de p. Au seuil de percolation, on observe une droite en échelle log-log et le pic correspondant à s >> 1 pour  $p > p_c$  signe la présence d'un amas percolant dont la taille fluctue.



FIG. 3.8 – Distributions en taille schématiques des amas en échelle log-log pour  $p < p_c$  (à gauche),  $p = p_c$  (au milieu) et  $p > p_c$  (à droite).

Le phénomène de percolation est une transition de phase continue, où p (et/ou q) est le paramètre de contrôle et P le paramètre d'ordre qui passe brusquement, mais continûment, d'une valeur nulle dans la phase non-percolante à une valeur finie dans la phase percolante. Le paramètre d'ordre n'étant pas une grandeur thermodynamique (comme une température ou un champ magnétique) mais une probabilité, on parle ici de transition de phase géométrique.<sup>13</sup>

### Universalité

La question est maintenant de savoir comment les différentes quantités qui interviennent en percolation dépendent du réseau considéré. Naturellement, les probabilités d'activation au seuil de percolation,  $p_c$  et  $q_c$ , dépendent du réseau (voir le tableau 3.1). On remarque d'abord que pour un réseau donné,  $q_c > p_c$ : puisqu'il y a un lien pour deux sites, il faut plus de sites occupés que de liens actifs pour percoler. Ensuite, on voit clairement que les seuils de percolation diminuent quand la dimension de l'espace ou la coordinence augmentent.

Réseau (d)	Percolation de sites $q_c$	Percolation de liens $p_c$
Hexagonal (2)	0.696	0.653
Carré(2)	0.593	1/2
Triangulaire $(2)$	1/2	0.347
Cubique simple $(3)$	0.312	0.249
Cubique centrée BCC $(3)$	0.246	0.180
Cubique faces centrées FCC $(3)$	0.198	0.119

TAB. 3.1 – Seuils de percolation de sites  $(q_c)$  et de liens  $(p_c)$  pour différents réseaux. Le chiffre entre parenthèses indique la dimension de l'espace.

 $<sup>^{13}</sup>$ La dynamique microscopique n'étant pas décrite par un Hamiltonien, il ne s'agit pas stricto sensu d'un problème de mécanique statistique.

### 3.1. THÉORIE DE LA PERCOLATION

Qu'en est-il des exposants critiques  $\beta$ ,  $\tau$ ,  $\sigma$  et  $\gamma$  qui caractérisent le comportement en loi de puissance de P,  $n_s$  et  $\langle S \rangle$  au seuil de percolation ? Contrairement à  $p_c$  et  $q_c$ , ces exposants sont *universels* : ils ne dépendent que de la dimension de l'espace et non pas des caractéristiques *locales* comme la forme du réseau ou le nombre de sites voisins.<sup>14</sup> Les valeurs de ces exposants sont données dans le tableau 3.2 pour les réseaux de dimensions deux et trois, et dans le cas de l'approximation de champ moyen.

Exposant	Champ moyen	2d	3d
$\beta$	1	0.139	0.41
$\gamma$	1	2.39	1.80
$\sigma$	1/2	0.39	0.45
au	5/2	2.05	2.18

TAB. 3.2 – Valeurs des exposants critiques de percolation en champ moyen ( $d = \infty$ ) et à deux et trois dimensions.

Intuitivement, on comprend que l'universalité soit liée aux comportements en lois de puissance et à *l'invariance d'échelle*. Une distribution en loi de puissance n'a pas de grandeur caractéristique qui permette de fixer une échelle d'observation particulière. Autrement dit, quelle que soit l'échelle d'observation le système aura le même aspect comme le montre la figure 3.9.

A la dimensionalité près, le comportement au seuil de percolation est donc indépendant, non seulement des détails microscopiques du système, mais aussi de sa propre nature : des fluides, des incendies de forêts, des réseaux de communications, ou des marchés financiers pourraient donc avoir des points communs.

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>Comme nous le verrons, ce comportement critique est typique des transitions de phases continues.



FIG. 3.9 – Collection d'amas dont la distribution en taille est en loi de puissance :  $n_s \sim s^{-\tau}$ . A une certaine échelle (en haut), on ne voit que les amas de tailles 10, 100 et 1000. En "zoomant" avec un facteur 10 sur une partie du système, on distingue les amas de tailles 1, 10 et 100 (en bas). L'aspect du système étant caractérisé par le ratio du nombre de grands amas sur le nombre de petits amas, on a à la première échelle d'observation,  $n_{1000}/n_{10} \sim 100^{-\tau}$ , et à la seconde,  $n_{100}/n_1 \sim 100^{-\tau}$ . Le système a donc le même aspect aux deux échelles d'observations.

.

### 3.2 Le modèle d'Ising

### 3.2.1 Introduction

Le modèle d'Ising est une des pierres angulaires de la physique statistique. Contrairement au modèle de percolation que nous avons décrit dans la section précédente, le modèle d'Ising tient compte des interactions entre sites et éventuellement entre les sites et un *champ extérieur*. Caractérisé par un Hamiltonien, son étude s'inscrit dans le cadre de la mécanique statistique. Son titre de gloire est de décrire, à l'aide d'hypothèses simples, les comportements associés aux transitions de phases thermodynamiques. Et davantage qu'une description, le modèle d'Ising permet une compréhension fine des transitions de phases continues et de leurs propriétés universelles.

A l'origine, le modèle d'Ising a été proposé par Wilheim Lenz en 1925 pour étudier les propriétés ferromagnétiques de la matière. Certains corps sont capables de s'aimanter sous l'effet d'un champ magnétique B extérieur et de conserver une aimantation spontanée, m, en l'absence de champ, à condition que la température du système soit inférieure au point de Curie. Cette température critique, notée  $T_c$ , dépend du matériau considéré (pour le fer,  $T_C = 770 \ ^oC$ ). L'aimantation macroscopique d'un matériau est due à la contribution des moments magnétiques de chaque atome. Telle une boussole, ces derniers peuvent s'orienter dans toutes les directions. Comme le montre le modèle d'Ising, l'aimantation spontanée en l'absence de champ magnétique ne peut se comprendre qu'en terme de phénomène collectif basé sur les interactions entre moments magnétiques des atomes (voir la figure 3.10) : Tant que  $T < T_c$ , les interactions tendent à orienter les moments magnétiques dans la même direction. Le système est alors dans une phase ordonnée qui présente une aimantation globale non nulle. Mais lorsque la température augmente, l'agitation thermique entre en compétition avec les interactions locales entre moments magnétiques. Et lorsque  $T \geq T_c$ , le système devient brusquement désordonné et perd son aimantation : m = 0 (phase paramagnétique). La figure 3.10 montre clairement que l'aimantation m est le paramètre d'ordre d'une transition de phase continue contrôlée par la température.

Plus généralement, nous allons voir que le modèle d'Ising permet de décrire les transitions de phase dans des systèmes qui semblent très différents les uns des autres : transition para-ferromagnétique dans les systèmes magnétiques, transition liquide-gaz dans les fluides, phénomènes collectifs dans les marchés financiers...



FIG. 3.10 – Aimantation spontanée, en l'absence de champ magnétique (B = 0)en fonction de la température et comportement des moments magnétiques des atomes à basse (gauche) et haute (droite) température.

#### Le modèle

Considérons N sites placés au nœuds d'un réseau (dimension d, maille donnée) et occupés par des "spins" ne prenant que deux valeurs possibles  $S_i = \pm 1$ . Selon le contexte, cette variable binaire pourra décrire :

- le moment magnétique de l'atome i : "up/down",
- la présence/absence d'une particule d'un fluide<sup>15</sup> au site i,
- l'achat/vente d'un actif financier par l'agent i sur un marché.

Contrairement à la percolation, où chaque site est occupé/vide indépendamment des autres sites, le modèle d'Ising prend en compte *l'interaction J entre spins* (par exemple entre plus proches voisins) et *l'interaction avec un champ extérieur* B qui impose une direction privilégiée au système (up ou down). Par convention, si J > 0 (interaction ferromagnétique),<sup>16</sup> des spins interagissant auront tendance à partager la même valeur. Le rôle de cette interaction est donc d'influencer *localement* le voisinage d'un site. Selon les cas :

- deux spins voisins dans un système magnétique auront tendance à s'aligner dans le même sens, up ou down,
- $\bullet$  une particule d'un fluide attirer a une autre particule sur un site voisin

96

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>On note alors  $n_i = 0, 1$  la variable d'occupation du site i: il y donc au plus une particule sur le site i. <sup>16</sup>Certains systèmes sont au contraire décrits par une interaction antiferromagnétique (J <

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Certains systèmes sont au contraire décrits par une interaction antiferromagnétique (J < 0) les spins voisins prennent alors des valeurs opposées.

(interaction attractive de type van der Waals),

• deux agents financiers "en interaction" s'influenceront pour partager le même avis quant à l'achat ou la vente d'un actif.

L'interprétation du champ extérieur B dépend une fois de plus du contexte :

- un champ magnétique qui tendra à aligner les spins du système dans sa direction, "up" si B > 0, "down" si B < 0,
- $\bullet\,$  un potentiel chimique qui fixe le nombre moyen de particules dans le fluide,
- une information extérieure et commune (media) qui poussera les agents à vendre ou à acheter un actif.

Pour des interactions (J, B) et une température T données, l'état microscopique du système est caractérisé par les N valeurs d'une configuration de spins  $\{S_i\}$ . L'énergie d'interaction de cette configuration est appelée Hamiltonien, c'est cette quantité qui permet de décrire la dynamique et les propriétés thermodynamiques du système à l'équilibre :

$$H(\{S_i\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i.$$
(3.2)

Le premier terme décrit l'interaction entre spins plus proches voisins.<sup>17</sup> Puisque J > 0, les spins ont tendance à prendre la même valeur pour minimiser leur énergie d'interaction (ferromagnétique). Le second terme de l'équation (3.2) prend en compte l'interaction de chaque spin avec un champ extérieur. Les spins auront donc tendance à s'aligner avec le champ B pour minimiser l'énergie.

Le modèle étant posé (choix du réseau et du Hamiltonien (3.2)), on ne cherche pas à connaître l'état *microscopique* du système. Notons qu'avec  $N \sim 10^{24}$  atomes ou  $N \sim 10^5$  agents financiers, il y a un nombre gigantesque de configurations possibles (a priori  $2^N$ ). En revanche, on s'intéressera à son état *macroscopique*<sup>18</sup> défini par quelques grandeurs thermodynamiques comme l'énergie moyenne par spin

$$e = \frac{\langle H \rangle}{N},$$

et l'aimantation moyenne par spin

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle S_i \rangle.$$

Cette quantité, qui varie entre -1 et 1, donne une information globale sur l'état d'aimantation du système. Il s'agit selon les cas de :

• l'aimantation moyenne du système telle qu'elle est mesurée dans un système magnétique (c'est aussi la différence entre les nombres moyens de spins up et de spins down),

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Il est bien sûr possible de considérer des interactions à plus longues portées.

 $<sup>^{18}</sup>$ De nombreuses configurations microscopiques sont compatibles avec une description macroscopique du système. Penser par exemple au nombre de façons d'obtenir une aimantation m donnée pour un ensemble de N spins.

- la densité moyenne d'un fluide (dans ce cas, on définit la densité, qui varie entre 0 et 1, par  $\rho = (1 + m)/2$ ),
- la valeur de la variation d'un actif financier interprétée comme la différence entre les nombres moyens d'actifs achetés (+1) et d'actifs vendus (-1).

Dans la pratique, un système est souvent en contact avec un thermostat qui impose une certaine température T (ensemble canonique).<sup>19</sup> Dans ce cas, l'énergie et l'aimantation du système fluctuent autour d'une valeur moyenne définissant l'état macroscopique ou thermodynamique du système.

Avant d'exprimer ces valeurs moyennes à l'aide des outils de la physique statistique, voyons comment évolue le comportement du système magnétique en fonction de la température. Trois énergies sont en jeu : l'énergie d'interaction J entre les spins, l'interaction avec le champ B et l'énergie thermique.

– A température nulle, aucune énergie thermique supplémentaire n'est apportée au système, l'état d'équilibre sera donc celui qui minimise l'énergie H du système. Le premier terme du Hamiltonien (3.2) est minimal lorsque tous les spins sont alignés, le second lorsqu'ils ont la même orientation que le champ B. L'état fondamental du système est donc, pour un champ B > 0:  $S_i = 1$  pour tout i. L'aimantation vaut alors m = 1 et l'énergie de l'état fondamental est donnée par :

$$E_0 = -JN_p - BN,$$

où  $N_p$  est le nombre de paires de spins plus proches voisins. Cette quantité dépend du réseau. Dans le cas d'un réseau de coordinence z,  $N_p = Nz/2$  (en négligeant les effets de bord, chacun des N spins à z voisins, le facteur 1/2 évite le double comptage).

- A la température T > 0, de l'énergie thermique, kT, où k est la constante de Boltzmann, est disponible pour renverser des spins. A basse température, seuls quelques spins pourront se retourner . Chaque spin retourné augmentera l'énergie de 2B et l'aimantation par spin diminuera de 2/N. Mais lorsqu'un spin se retourne, les interactions avec ses voisins sont modifiées : chaque nouvelle paire de spins +- augmentera l'énergie de 2J (voir la figure 3.11).
- A très haute température, (kT >> J et kT >> B), les interactions entre spins d'une part et entre les spins et le champ extérieur d'autre part deviennent négligeables devant l'énergie thermique. On retrouve la percolation aléatoire, où chaque spin vaut ±1 avec la même probabilité et indépendamment de ses voisins. Dans ce cas, l'énergie et l'aimantation sont nulles.

La question est bien sûr de trouver le comportement du système pour des températures intermédiaires afin de décrire la transition de phase et le passage d'une aimantation nulle à une valeur finie pour une certaine température  $T_c$ .

<sup>&</sup>lt;sup>19</sup>Mais on pourrait aussi choisir de fixer l'énergie du système (ensemble microcanonique).



FIG. 3.11 – Configurations de spins du modèle d'Ising sur réseau carré à T = 0(à gauche) et à T > 0 (à droite). Les "+" correspondent aux spins +1 orientés dans le sens du champ magnétique et les "-" aux spins -1.

La physique statistique permet de déterminer l'état macroscopique du système à une température donnée T. Ainsi, on peut montrer que la probabilité que le système soit dans une configuration de spins  $\mathcal{C} = \{S_i\}$  d'énergie  $H_{\mathcal{C}}$  est donnée par :

$$P_{\mathcal{C}} = \frac{1}{Z(N,T)} e^{-\beta H_{\mathcal{C}}},$$

où  $\beta = 1/kT$  est l'inverse de la température et où Z est la fonction de partition du système qui ne dépend que de la température et des interactions J et B :

$$Z(N,T) = \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta H_{\mathcal{C}}}$$

On a bien sûr  $\sum_{\mathcal{C}} P_{\mathcal{C}} = 1$ .

Dans le cas du modèle d'Ising, la fonction de partition s'écrit explicitement :

$$Z(N,T) = \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta B \sum_{i=1}^N S_i}.$$

Comme nous allons le voir, toute l'information sur les grandeurs macroscopiques décrivant le système à l'équilibre sont obtenues à partir de la fonction de partition. En particulier, l'énergie moyenne et l'aimantation moyenne par spin sont données par :

$$e = \frac{1}{N} \sum_{\mathcal{C}} H_{\mathcal{C}} P_{\mathcal{C}} = \frac{1}{NZ} \sum_{\mathcal{C}} H_{\mathcal{C}} e^{-\beta H_{\mathcal{C}}} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta},$$
  

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\mathcal{C}} (\sum_{i=1}^{N} S_i)_{\mathcal{C}} P_{\mathcal{C}} = \frac{1}{NZ} \sum_{\mathcal{C}} (\sum_{i=1}^{N} S_i)_{\mathcal{C}} \ e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta B \sum_{i=1}^{N} S_i}$$
  

$$= \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B}.$$

Malheureusement, il y a peu de situations où le calcul exact de la fonction de partition est possible. En général, il est nécessaire de faire des approximations ou de réaliser des simulations numériques de type Monte-Carlo. Comme pour la percolation, nous allons aborder le cas unidimensionnel et l'approximation du champ moyen.<sup>20</sup> Dans ces deux cas, nous verrons que le Hamiltonien peut s'écrire sous la forme d'une somme de Hamiltoniens individuels de particules indépendantes.

### Système de particules indépendantes

En général, dans le cas où l'on néglige les interactions entre les particules d'un système, l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^{N} h_i,$$

où  $h_i$  est le Hamiltonien d'une particule i. La fonction de partition s'écrit alors simplement :

$$Z(N,T) = \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} h_i} = \prod_{i=1}^{N} \sum_{\mathcal{C}_i} e^{-\beta h_i} = z_i^N,$$

où  $z_i = \sum_{\mathcal{C}_i} e^{-\beta h_1}$  est la fonction de partition d'une seule particule qui se calcule en général facilement en sommant sur tous les états possibles  $\mathcal{C}_i$  de la particule i (voir exercice ci-dessous).

**Exercice 16** : Modèle d'Ising avec  $J = 0^{\dagger}$ 

Dans le cas où l'on néglige les interactions entre spins (J = 0), calculer la fonction de partition et en déduire l'énergie e et l'aimantation m.

<sup>†</sup>**Réponse** : La fonction de partition s'écrit alors :

$$Z(N,T) = (\sum_{S_1 = \pm 1} e^{\beta B S_1})^N = (e^{\beta B} + e^{-\beta B})^N = (2\cosh\beta B)^N.$$

On en déduit l'énergie et l'aimantation :

$$e = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -B \tanh \beta B,$$
  
$$m = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B} = \tanh \beta B.$$

Dans ce cas, e = -mB. On retrouve la limite basse température  $(T \to 0)$ , où e = -B et m = 1 et la limite haute température  $(T \to \infty)$ , où e = 0 et m = 0.

 $<sup>^{20}</sup>$ Notons que le calcul de la fonction de partition a été réalisé dans le cas d'un réseau à deux dimensions en champ nul par Lars Onsager en 1944. La fonction de partition à 3d n'a pour l'instant pas été calculée.

### 3.2.2 Modèle d'Ising à une dimension

Pour simplifier, nous nous placerons dans le cas où B = 0. Considérons N spins placés sur un réseau à une dimension sans conditions aux limites périodiques.

+ + - + - - + +

FIG. 3.12 – Une configuration de spins du modèle d'Ising sur un réseau unidimensionnel.

La fonction de partition peut s'écrire :

$$Z(N,T) = \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}}.$$

Introduisons une variable de lien  $\eta_i = S_i S_{i+1} = \pm 1$ . L'état microscopique est déterminé par la donnée de  $S_1$  et des N - 1 variables de spins  $\eta_i$ :

$$Z(N,T) = \sum_{\{S_1 = \pm 1 \ \eta_i = \pm 1\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} \eta_i}$$

La somme sur  $S_1$  donne simplement un facteur 2 et l'on peut décrire le réseau de spins interagissent comme un système de N-1 "particules" indépendantes :

$$Z(N,T) = 2 \left[ \sum_{\{\eta_1 = \pm 1\}} e^{\beta J \eta_1} \right]^{N-1} = 2 \left[ 2 \cosh \beta J \right]^{N-1}.$$

On en déduit l'énergie moyenne par spin :

$$e = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -\frac{(N-1)}{N} \tanh(\beta J) \simeq -\tanh(\beta J).$$

Comme il se doit, l'énergie par spin est une fonction croissante de la température qui tend vers zéro quand  $T \to \infty$ .

Pour calculer l'aimantation il faudrait introduire un champ magnétique ( $B \neq 0$ ). Le calcul de la fonction de partition, bien que plus compliqué que dans le cas B = 0, permet d'exprimer l'aimantation par spin dans la limite  $N \to \infty$ :

$$m = \frac{\sinh \beta B}{\sqrt{\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}}}$$
 et  $\lim_{B \to 0} m = 0$ 

Ainsi, à la limite  $B \to 0$ , l'aimantation est nulle.<sup>21</sup> Il n'y a donc pas d'aimantation spontanée dans un réseau unidimensionnel ( $m \neq 0$ , pour B = 0), et ce, quelle que soit la température T > 0.

Alors, faut-il brûler le modèle d'Ising comme le pensait son inventeur? Et bien non, les calculs à 2d et les simulations numériques à 3d montrent que le modèle d'Ising présente bien une aimantation spontanée (transition de phase continue) pour des températures inférieures à une température critique qui dépend du réseau considéré.

<sup>&</sup>lt;sup>21</sup>On retrouve par ailleurs le cas  $J = 0 : m = \tanh \beta B$ .

### 3.2.3 Approximation du champ moyen

Le calcul exact de la fonction de partition du modèle d'Ising avec champ magnétique n'est pas réalisable pour une dimension de l'espace d > 1. Une fois de plus, l'approximation du champ moyen permet de donner un calcul approché de Z et donc de révéler les principales caractéristiques du modèle et en particulier l'existence d'une transition de phase continue.

Le terme du Hamiltonien (3.2) qui complique le calcul de la fonction de partition est le terme d'interaction entre spins :  $\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$ . Nous allons en donner une forme approchée. Chaque variable de spins peut se décomposer sous la forme :

$$S_i = m + \epsilon_i,$$

où m est l'aimantation moyenne par spin et  $\epsilon_i$  les fluctuations du spin i autour de m. Le terme d'interaction de spins s'écrit alors :

$$\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j = \sum_{\langle i,j\rangle} (m+\epsilon_i)(m+\epsilon_j) = \sum_{\langle i,j\rangle} [m^2 + m(\epsilon_i + \epsilon_j) + \epsilon_i \epsilon_j]$$

L'approximation du champ moyen revient à supposer les fluctuations suffisamment faibles pour négliger le terme d'ordre deux  $(\epsilon_i \epsilon_j)$  devant les autres termes. On a ainsi :

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \simeq \sum_{\langle i,j \rangle} [m^2 + m(\epsilon_i + \epsilon_j)] = \sum_{\langle i,j \rangle} [-m^2 + m(S_i + S_j)]$$

Le premier terme de la somme est simplement le nombre de liens dans le réseau,  $N_p = Nz/2$ , donc

$$\sum_{\langle i,j \rangle} -m^2 = -\frac{1}{2}Nzm^2.$$

Le second terme est symétrique en  $S_i$  et  $S_j$ , donc

$$\sum_{\langle i,j \rangle} m(S_i + S_j) = 2m \sum_{\langle i,j \rangle} S_i = 2m \sum_i S_i \sum_{j(i)} 1,$$

où j(i) est l'indice des voisins de i, donc  $\sum_{j(i)} 1 = z$ , et pour éviter le double comptage, on ajoute un facteur 1/2:

$$\sum_{\langle i,j\rangle} m(S_i + S_j) = \frac{1}{2} 2mz \sum_i S_i.$$

Finalement, on peut réécrire le Hamiltonien (3.2) :

$$H(\{S_i\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i$$
  
=  $-J[-\frac{1}{2}Nzm^2 + mz \sum_i S_i] - B \sum_{i=1}^N S_i$   
=  $\sum_{i=1}^N h_i$ ,

où

$$h_i = \frac{1}{2}Jzm^2 - (Jmz + B)S_i.$$

Le calcul de la fonction de partition se ramène donc à un problème de particules indépendantes :

$$Z(N,T) = z_1^N$$

 $\operatorname{et}$ 

$$z_{1} = \sum_{S_{1}=\pm 1} e^{-\beta [\frac{1}{2}Jzm^{2} - (Jmz+B)S_{1}]}$$
  
=  $e^{-\frac{\beta}{2}Jzm^{2}} \sum_{S_{1}=\pm 1} e^{\beta (Jmz+B)S_{1}}$   
=  $2 \cosh \beta [Jmz+B] e^{-\frac{\beta}{2}Jzm^{2}}.$ 

L'aimantation moyenne par spin est donc

$$m = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln z_1}{\partial B} = \tanh \beta [Jmz + B], \qquad (3.3)$$

où m(T, B) est une fonction de la température et du champ magnétique.

### Une approche alternative

Supposons que tous les spins  $S_i$  soient fixés, sauf le spin  $S_1 = \pm 1$ . Dans cette configuration de spins  $\{S_i\}$  "gelés", la valeur moyenne de  $S_1$  est donnée par

$$\bar{S}_1 = \frac{\sum_{S_1 = \pm 1} S_1 e^{-\beta H(S_1)}}{\sum_{S_1 = \pm 1} e^{-\beta H(S_1)}},$$

 $\operatorname{avec}$ 

$$H(S_1) = -JS_1 \sum_{j(1)} S_{j(1)} - BS_1 + K,$$

où j(1) est un indice correspondant aux voisins du spin  $S_1$ , et K une constante qui inclut toutes les interactions des autres spins dont les valeurs sont fixées. En simplifiant par  $e^{-\beta K}$ ,

$$\bar{S}_{1} = \frac{e^{\beta J \sum_{j(1)} S_{j(1)} + \beta B} - e^{-\beta J \sum_{j(1)} S_{j(1)} - \beta B}}{e^{\beta J \sum_{j(1)} S_{j(1)} + \beta B} + e^{-\beta J \sum_{j(1)} S_{j(1)} - \beta B}}$$
  
=  $\tanh\left(\beta J \sum_{j(1)} S_{j(1)} + \beta B\right).$ 

Cette valeur moyenne  $\bar{S}_1$  correspond à une configuration donnée des spins  $\{S_i\}$  pour  $i \ge 2$ . La valeur moyenne de  $S_1$  à la température T est donc

$$\langle S_1 \rangle = \langle \bar{S}_1 \rangle = \langle \tanh\left(\beta J \sum_{j(1)} S_{j(1)} + \beta B\right) \rangle,$$

où  $\langle \rangle$  indique une valeur moyenne calculée sur toutes les configurations de spins  $\{S_i\}$ . Comme on l'a vu, il n'est pas possible de calculer exactement cette valeur moyenne. En revanche, on peut faire l'approximation suivante pour une fonction f de x:

$$\langle f(x) \rangle = f(\langle x \rangle),$$

qui revient à négliger une partie des fluctuations de x autour de sa valeur moyenne. <sup>22</sup> Il s'agit bien d'une approximation de champ moyen. Ainsi,

$$\langle S_1 \rangle = \tanh\left(\beta J \sum_{j(1)} \langle S_{j(1)} \rangle + \beta B\right)$$

En négligeant les effets de surface, tous les spins sont équivalents, donc  $\langle S_i \rangle = m$  et  $\sum_{j(1)} \langle S_{j(1)} \rangle = zm$ , où z est la coordinence du réseau et m l'aimantation par spin. On a donc :

$$m = \tanh\left(\beta J z m + \beta B\right).$$

On retrouve l'équation auto-cohérente (3.3) obtenue pour l'aimantation.

### Résolution graphique de l'équation auto-cohérente

L'équation auto-cohérente (3.3) permet de déterminer graphiquement l'aimantation m pour des conditions thermodynamiques données, B et T, en cherchant les intersections des courbes y = m et  $y = f(m) = \tanh \beta (Jzm + B)$ . La figure 3.13 présente les solutions de cette équation :

- En présence d'un champ magnétique (B > 0 par exemple) : à haute température (T = 10), il y a une seule solution m de même signe que B. Lorsque la température diminue (T = 6), l'aimantation augmente. A basse température (T = 2), il apparaît deux autres valeurs de m qui sont négatives. On peut montrer que ces deux solutions ne sont pas stables. Autrement dit, l'état d'équilibre correspond à l'aimantation m > 0 qui tend vers 1 quand  $T \rightarrow 0$ .
- En champ nul (B = 0): on a vu que l'on s'attendait à une aimantation nulle à haute température et maximale, m = 1, à T = 0. L'approximation de champ moyen nous montre comment se comporte le système pour des températures intermédiaires. Tant que<sup>23</sup>  $T \ge T_c = zJ/k$ , la seule solution

<sup>22</sup>En effet, on peut écrire le développement de f(x) autour de sa valeur moyenne :

$$f(x) = f(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle)f'(\langle x \rangle) + \frac{1}{2}(x - \langle x \rangle)^2 f''(\langle x \rangle) + \dots$$

En prenant la valeur moyenne, on voit que

$$\langle f(x) \rangle = f(\langle x \rangle) + \frac{1}{2} Var(x) f''(\langle x \rangle) + \dots$$

L'approximation revient donc à négliger une partie des fluctuations de x autour de sa valeur moyenne. En effet, on ne suppose pas  $x = \langle x \rangle$ , mais  $\langle f(x) \rangle = f(\langle x \rangle)$ 

 $^{23}\mathrm{En}$  développant au voisinage de m=0, on a

$$\tanh(\beta Jzm) \simeq \beta Jzm$$

Il y aura donc deux intersections avec la courbe y = m si  $\beta Jz > 1$ , soit  $kT < Jz = kT_c$ .

de l'équation (3.3) est m = 0. Mais dès que  $T < T_c$ , deux solutions  $\pm m_0$ apparaissent. Puisqu'il n'y a pas de champ magnétique, on appelle cette aimantation, *l'aimantation spontanée*. On peut montrer que les deux valeurs  $m_0$  et  $-m_0$  correspondent à des états stables (la valeur m = 0 est alors instable).

Ainsi, en champ nul, lorsque la température diminue, l'aimantation du système passe brutalement de zéro à une aimantation finie  $m_0$  lorsque  $T < T_c$ . Dans la pratique, il reste toujours un champ magnétique résiduel qui brise la symétrie et le système présente une aimantation de même signe que celle du champ.



FIG. 3.13 – Résolution graphique de l'équation (3.3) m = f(m) pour un réseau cubique (z = 6) et J = 1, avec champ magnétique, B = 1 (à gauche) et sans champ magnétique B = 0 (à droite) pour les températures  $T = 2 < T_c$ ,  $T = 6 = T_c$  et  $T = 10 > T_c$ .

Voyons à présent que lest le comportement de l'aimantation au voisinage du point critique (B = 0 et  $T = T_c$ ). En champ nul et pour  $T \simeq T_c$ , l'équation (3.3) devient<sup>24</sup>

$$m = \tanh\left(\beta Jzm\right) \simeq \beta Jzm - \frac{1}{6}(\beta Jzm)^3,$$

donc

$$m \sim (T_c - T)^{\beta},$$

où  $\beta = 1/2$ . D'autres quantités thermodynamiques présentent un comportement en loi de puissance : la susceptibilité magnétique<sup>25</sup> est un coefficient de réponse

<sup>&</sup>lt;sup>24</sup>En effet,  $tanh(x) \simeq x - \frac{1}{6}x + \dots$  pour  $x \to 0$ .

 $<sup>^{25} \</sup>mathrm{Dans}$  le cas d'un fluide, cette grandeur thermodynamique s'interprète comme la compressibilité isotherme.

linéaire que décrit la variation de l'aimantation lors d'une variation du champ magnétique :

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial B}.$$

Dérivons l'équation (3.3) par rapport à B :

$$\chi = \frac{\beta(Jz \ \chi + 1)}{\cosh^2(\beta Jzm + \beta B)} = \beta(Jz \ \chi + 1)(1 - m^2).$$

Donc

$$\chi = \frac{\beta(1 - m^2)}{1 - \beta J z (1 - m^2)}$$

En champ nul et pour  $T \simeq T_c$ ,  $m \simeq 0$  et

$$\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma},$$

où  $\gamma = 1$ . Ainsi, au voisinage du point critique, la susceptibilité diverge en loi de puissance.

#### Le réseau complet

Comme pour la percolation, on peut supposer que chaque spin interagit avec *tous* les autres spins. Pour que l'énergie reste finie dans la limite  $N \to \infty$ , l'Hamiltonien du système doit s'écrire<sup>26</sup>

$$H(\{S_i\}) = -\frac{J}{N} \sum_{i < j} S_i S_j - B \sum_{i=1}^{N} S_i$$

Dans ce cas, l'approximation du champ moyen devient exacte avec z = N - 1.

### 3.2.4 Transition de phase thermodynamique et universalité

Comme en théorie de la percolation, les résultats qualitatifs obtenus en champ moyen sont confirmés par des calculs et des simulations numériques et s'inscrivent dans le cadre général de l'étude des phénomènes critiques. Ainsi, le voisinage du point critique est caractérisé par un comportement en loi de puissance des grandeurs thermodynamiques à la limite thermodynamique  $(N \to \infty)$  et en champ magnétique nul  $(B \to 0)$ :

• L'aimantation spontanée se comporte au voisinage du point critique comme :

$$n \sim (T_c - T)^{\beta}$$
 pour  $T \leq T_c$ .

 $^{26}\mathrm{Ainsi},$  l'énergie par spin de l'état fondamental (B>0) est

I

$$e_0 = \frac{E_0}{N} = \frac{1}{N} \left( -\frac{J}{N} \frac{N(N-1)}{2} - BN \right) \simeq -\frac{J}{2} - B,$$

qui est bien indépendante de N (intensive) dans la limite  $N \to \infty$ .

106

• La susceptibilité magnétique diverge au voisinage du point critique comme :

 $\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$  pour  $T \simeq T_c$ .

 D'autres grandeurs thermodynamiques, comme la chaleur spécifique ou la longueur de corrélation, divergent au point critique et sont caractérisées par des exposants critiques (α et ν respectivement).

On notera les analogies entre les quantités géométriques de la percolation et les grandeurs thermodynamiques du modèle d'Ising (entre P et m d'une part et entre  $\langle S \rangle$  et  $\chi$  d'autre part).

Comme en théorie de la percolation, certaines quantités sont universelles d'autres pas. La température critique par exemple, dépend explicitement du réseau considéré. Les valeurs présentées dans le tableau 3.3) montrent que  $T_c$  augmente avec la coordinence z et la dimension d de l'espace : plus le nombre de voisins est important, plus le domaine en température de la phase ordonnée ferromagnétique est large et donc  $T_c$  élevé. Notons que la prédiction du champ moyen,  $T_C = zJ$ , est d'autant meilleure que z et d sont grands. Cette observation n'est pas surprenante puisque l'approximation du champ moyen devient exacte dans le cas du réseau complet.

Réseau (d)	$T_c/J$
Hexagonal (2)	1.52
$\operatorname{Carré}(2)$	2.27
Triangulaire $(2)$	3.64
Cubique simple $(3)$	4.52
Cubique centrée BCC $(3)$	6.32

TAB. 3.3 – Température critique pour différents réseaux (en unité J). Le chiffre entre parenthèses indique la dimension de l'espace.

Les exposants critiques, en particulier  $\beta$  et  $\gamma$ , sont eux universels, ils ne dépendent que de la dimension de l'espace (voir le tableau 3.4) et non pas des caractéristiques du réseau.<sup>27</sup>

Exposant	Champ moyen	2d	3d
$\beta$	1/2	0.125	0.325
$\gamma$	1	1.75	1.24

TAB. 3.4 – Valeurs des exposants critiques du modèle d'Ising en champ moyen  $(d = \infty)$  et à deux et trois dimensions.

 $<sup>^{27}</sup>$ Plus exactement, les exposants critiques sont caractéristiques d'une classe d'universalité définie par i) la dimension de l'espace, ii) les symétries du Hamiltonien et iii) la courte portée des interactions.

L'existence de cette universalité a d'importantes et surprenantes implications. On sait depuis le XIX<sup>eme</sup> siècle, que les fluides ont une température critique en-dessous de laquelle le système peut se séparer en deux phases, l'une liquide, l'autre gazeuse. Par exemple, la température critique de l'eau vaut  $374^{\circ}C$ . Et les mesures expérimentales des quantités thermodynamiques d'un fluide au voisinage du point critique ont mis en évidence des comportements en lois de puissance avec les mêmes exposants critiques que ceux de la transition ferroparamagnétique.<sup>28</sup> Comment imaginer que deux systèmes aussi différents qu'un fluide et un aimant puissent avoir les mêmes comportements quantitatifs?

Comme on l'a vu dans ce chapitre, la simplicité, et donc la généralité du modèle d'Ising permet d'étudier dans un même cadre théorique des systèmes de natures radicalement différentes, des fluides aux marchés financiers...



<sup>&</sup>lt;sup>28</sup>Par exemple, au voisinage du point critique, la différence de densités entre les phases liquide et gazeuse se comporte en fonction de la température exactement comme l'aimantation d'un système magnétique.