

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA
FACULTE DES SCIENCES



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : PHYSIQUE COMPUTATIONNELLE

Par

Morso Nora

Calcul des coefficients de Clebsch-Gordan pour le modèle d'Ising

Soutenu le 25/06/2018 devant le jury composé de :

Amara Kadda	Président	M.C.A	U. Saida	Président
Sahabi Toufik	Rapporteur	M.C.B	U. Saida	Rapporteur
Elkeurti Mohammed	Examineur	Pr	U. Saida	Examineur
Doumi Bendouma	Examineur	M.C.A	U. Saida	Examineur

Année Universitaire 2017 - 2018

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions mon dieu, notre créateur de nos avoir donné la force, la patience et le courage afin d'accomplir ce travail modeste

*Je tiens à remercier de manière très particulière et à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur **Sahabi Toufik** directeur de mémoire de m'avoir proposé et dirigé ce sujet, ainsi que pour sa disponibilité et sa soutien,*

*Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude Par ailleurs, je voudrais vivement remercier le professeur Mr **Amara Kadda** pour avoir accepté de participer à ce jury en tant que président de Jury. A l'ensemble des membres du jury, j'adresse toute ma reconnaissance aux messieurs **Elkeurti Mohammed** et Mr **Doumi Bendouma** pour avoir accepté d'être membres à mon jury de mémoire.*

Nos remerciements s'étendent également à tous nos enseignants durant les années des études.

Enfin j'adresse mes plus sincères remerciements à mes parents pour avoir toujours à mes côtés pendant cette année.

Dédicace

Je dédis ce modeste travail

A mes chers parents, pour leurs soutiens tout le long de ma vie

A ma promotrice Mr S. Toufik pour ses conseils et ses

Consultations qui m'ont aidé à la réalisation de mon travail

A mes chères sœurs Fatima, Zana et leurs enfants (Amin, El hadj

Otman, Abou Baker Sadik et Ibrahim Khalil)

A mes chers frères Madjdoub et sa femme Karima. M et ses enfants

(Mohamed, Abdelhakim, Oussama), Hawari et sa femme

Karima. L et Ibrahim

Et pour mes chère collègue (Fatiha)

*Aux étudiants de la 02ème année master LMD, Surtout les
étudiants de spécialité «physique computationnelle»*

A tous mes familles

A tous ceux qui me sont chers.

Morso Nora

Table de Matière

Remerciements	
Dédicace	
Table des matières	
Table des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale.....	i

Chapitre 1 : Généralité sur les modèles de spin

1.1 Introduction.....	1
1.2 Modèles de Spin.....	1
1.2.1Modèle d'Ising	1
1.2.2Modèle d'Heisenberg.....	1
1.2.3 Modèle XY	2
1.2.4Modèle de Potts.....	3
1.3 Géométrie des réseaux.....	3
1.4 Transition de phase, Phénomènes critiques et Universalité.....	5
1.5 Système désordonné.....	7

Chapitre 2 : Le modèle d'Ising

2.1 NTRODUCTION.....	9
2.2 Présentation du modèle.....	9
2.2.1 Définition et historique	9
2.2.2 Applications.....	10
a) Matériaux ferromagnétique.....	10
b) Alliages binaires	10
c) Transition liquide-gaz.....	10
2.2.3 Hamiltonien	10
2.3 Etude selon la dimension.....	11
2.3.1 A Une dimension	11
a) Courte portée et longue portée	11
b) Fonction de partition.....	11
c) Matrice de transfert.....	13
2.3.2 A Deux dimensions.....	15
a) Solution exacte.....	15
b) Matrice de transfert.....	16
c) Dualité.....	17
d) Réseau Dual.....	17
2.3.3 Trois dimensions.....	18
2.3.4 Quatre dimensions et plus.....	19
2.4 Fonction de partition d'un ensemble de spins d'Ising en champ moyen.....	19
2.4.1 Sans interaction entre premiers voisins.....	19
2.4.2 Avec interaction entre premiers voisins	19

Table de Matière

2.5 Intérêt du modèle.....	20
----------------------------	----

Chapitre 3 : Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

3.1 Introduction.....	22
3.2 Moment cinétique orbital.....	22
3.2.1 Définition.....	22
3.2.2 Relations de commutation.....	23
3.2.3 Opérateur L_z en coordonnées sphériques.....	23
3.3 Opérateur moment cinétique agissant sur les vecteurs d'état	24
3.4 Généralisation du concept du moment cinétique.....	24
3.4.1 Définition.....	24
3.4.2 Opérateurs d'échelle.....	25
3.4.3 Valeurs propres.....	26
3.4.4 Représentations matricielles pour le cas de spin $\frac{1}{2}$	26
3.5 Composition des moments cinétiques.....	28
3.5.1 Interaction spin-orbite.....	28
3.5.2 Base couplée et base découplée.....	29
3.5.3 Exemple : Composition de deux spins $\frac{1}{2}$	29
a) Description des deux bases.....	29
b) Diagonalisation des observables couplés dans la base $ m_1, m_2\rangle$	32
c) Résultats de couplage.....	33
3.6 Coefficients de Clebsch-Gordan.....	34
3.6.1 Définition.....	34
3.6.2 Quelques propriétés.....	34
3.6.3 Relation de récurrence.....	35
3.7 Composition de N moments cinétiques pour le modèle d Ising.....	35
3.7.1 Composition de trois spins.....	35
3.7.2 La généralisation à N spins	39

Conclusion générale

Références

Résumé

Table de Figures

1.1 Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches hautes (bleu) et basses (rouge) représentent des spins positifs et négatifs respectivement.....	1
1.2 le modèle XY sur un réseau carré bidimensionnel.....	2
1.3 Représentation du modèle de Potts pour différents états q	3
1.4 Réseau carré.....	3
1.5 Réseau hexagonal et triangulaire.....	4
1.6 Paramètre d'ordre. Vs. température et champ magnétique.....	6
2.1 Représentation graphique d'une Chaîne ouvert et fermée du modèle d'Ising.....	13
2.2 Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré. Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction J (traits noir).....	15
2.3 Le réseau carre (en traits pleins) et son dual (en tirettes), obtenu en plaçant un nouveau site au centre de chaque maille du réseau originel, sont identiques.....	18
2.4 Le réseau dual du réseau "nid d'abeille" est le réseau triangulaire et réciproquement....	18

Liste des tableaux

1.1 La coordinence des différentes structures géométriques.....	4
1.2 Définition et signification des exposants critiques.....	6
1.3 Quelques modèles et leurs exposants critiques.....	7

**INTRODUCTION
GÉNÉRALE**

Introduction Générale

La physique a défini une série de développements en mécanique classique à la mécanique quantique c'est la branche de la physique qui a pour objet d'étudier et de décrire les phénomènes fondamentaux à l'œuvre dans les systèmes physiques, plus particulièrement à l'échelle atomique et subatomique. Elle fut développée au début du XX^e siècle par une dizaine de physiciens européens, afin de résoudre différents problèmes que la physique classique échouait à expliquer, comme le rayonnement du corps noir, l'effet photo-électrique, ou l'existence des raies spectrales. Au cours de ce développement, la mécanique quantique se révéla être très féconde en résultats et en applications diverses. Elle permit notamment d'élucider le mystère de la structure de l'atome, et plus globalement elle s'avéra être le cadre général de description du comportement des particules élémentaires, jusqu'à constituer le socle de la physique moderne. L'expression physique quantique désigne quant à elle un corpus théorique un peu plus étendu, qui s'appuie sur la mécanique quantique pour décrire des phénomènes particuliers, notamment les interactions fondamentales. La mécanique quantique comporte de profondes difficultés conceptuelles, et son interprétation physique ne fait pas l'unanimité dans la communauté scientifique. Parmi ces concepts, on peut citer la dualité onde corpuscule, la superposition quantique, l'intrication quantique ou encore la non-localité.

D'après la mécanique quantique est venu la physique atomique c'est le champ de la physique qui étudie les atomes en tant que systèmes isolés qui comprennent les électrons et le noyau atomique. Elle se concentre essentiellement sur l'arrangement des électrons autour du noyau et sur la façon dont celui-ci est modifié. Cette définition englobe tant les ions que les atomes électriquement neutres. Puisque « atomique » et « nucléaire » sont utilisés de façon synonyme dans le langage courant, la physique atomique est souvent confondue avec la physique nucléaire. Cependant, les physiciens considèrent que la physique nucléaire se concentre principalement sur le noyau atomique. La physique atomique considère toujours les atomes de façon isolée, c'est-à-dire qu'un modèle est toujours composé d'un noyau et d'électrons qui orbitent autour. Elle n'est pas concernée par la formation des molécules (même si la théorie physique en jeu est transposable), ni par la physique du solide. Elle considère les processus d'ionisation, d'excitation par les photons et de collisions entre particules atomiques.

Il peut sembler que la modélisation d'atomes en isolation ne reflète pas la réalité. Les atomes peuvent former un gaz ou un plasma, où l'échelle de temps pour les interactions entre atomes est énorme comparée aux processus atomiques dont la théorie se préoccupe. En conséquence, les atomes sont la plupart du temps isolés dans la réalité. C'est pour cette raison que cette théorie est utile à la modélisation des plasmas et à l'étude de l'atmosphère, même si les deux contiennent d'énormes quantités d'atomes. Un électron peut être suffisamment excité pour échapper à l'attraction du noyau. On dit alors que le reste de l'atome est un ion, c'est-à-dire un quasi atome électriquement chargé.

Ensuite, la physique statistique est une branche sur laquelle est basé ce travail de mémoire (appelé aussi « thermodynamique statistique ») fut introduite initialement sous la forme de la théorie cinétique des gaz à partir du milieu du XIX^e siècle, principalement par

Introduction Générale

Kelvin, Maxwell et Boltzmann. Cette première approche visait à proposer un modèle simple de la matière à l'échelle atomique, et en particulier des collisions entre atomes ou molécules, pour reproduire le comportement de certaines quantités macroscopiques. C'est à cette époque que l'interprétation de la pression comme mesure de la quantité de mouvement des constituants d'un gaz a été formalisée.

La mécanique statistique fut formalisée en 1902 par Gibbs, son formalisme permettant de généraliser et de justifier a posteriori les principes de la thermodynamique d'équilibre. Les premières extensions de la physique statistique, par rapport à la mécanique statistique, ont été l'introduction des propriétés électriques et magnétiques de la matière au sein des modèles, permettant la description des transitions de phase dans les matériaux magnétiques ou diélectriques, comme la transition ferromagnétique. Une autre étape importante fut la modification des formules statistiques, entre les années 1920 et 1930, pour tenir compte des effets de l'indiscernabilité au niveau quantique des particules (principe d'exclusion de Pauli). Cette modification fut effectuée par Bose et Einstein pour les systèmes de particules de spin entier (bosons) et par Fermi et Dirac pour les systèmes de particules de spin demi-entier (fermions).

On ne peut traiter que quelques modèles dans le cadre de la mécanique statistique sans calculs numériques excessifs. Un de ces modèles est du à Lenz (1920), et fut traité en détail plus tard par son élève Ising (1925). Au départ, il fut inventé pour les transitions de phase dans les substances ferromagnétiques à la température de Curie ; cependant avec le temps on s'aperçut qu'avec seulement quelques légers changements le modèle pouvait être appliqué à d'autres transitions de phase, comme les transitions ordre-désordre dans les alliages binaires. De plus, le modèle pouvait s'appliquer à des nombreux problèmes modernes en physique des particules, par exemple pour décrire ce que l'on nomme les verres de spins. Récemment, on s'est aperçu que les idées d'Ising (sous une forme modifiée) pouvait expliquer la reconnaissance des formes dans les réseaux de neurones schématisés. Ce modèle prend donc de plus en plus d'importance pour le développement des modèles du cerveau humain.

Le modèle d'Ising ainsi noté consiste à mettre sur un réseau le moment magnétique de N particules, tous alignés sur le même axe. Chaque moment magnétique peut donc prendre deux directions, que l'on note + et -. Ces spins interagissent avec leurs voisins, et souvent, on considère qu'ils interagissent seulement avec les voisins les plus proches.

Le moment cinétique est une grandeur fondamentale en mécanique. Il joue un rôle important notamment dans les systèmes en rotation. Le théorème du moment cinétique découle directement du principe fondamental de la dynamique et, par conséquent, ne possède pas plus d'information. En revanche il permet de dégager rapidement une intégrale première du mouvement dans le cas des systèmes à force centrale par exemple. En mécanique quantique, pour coupler deux moments cinétiques, il faut introduire ce qu'on appelle les coefficients de Clebsch Gordan. Ils sont des nombres reliant deux représentations des états de bases appelons couplée et découplée soumis aux lois de la mécanique quantique. Ils portent le nom des mathématiciens sallemands Alfred Clebsch et Paul Gordan, qui rencontrèrent un problème similaire en théorie des invariants.

Introduction Générale

En théorie des représentations, notamment des groupes de Lie compacts, ces coefficients sont utilisés pour effectuer la décomposition en somme directe du produit tensoriel de deux représentations irréductibles. On peut définir les coefficients de Clebsch-Gordan associés au groupe $SO(3)$ d'une manière plus directe, comme produit d'harmoniques sphériques. L'addition de spins en mécanique quantique se comprend par cette approche. On utilisera la notation bra-ket de Dirac.

Le but de ce mémoire est de calculer les coefficients de Clebsch-Gordan pour un réseau d'Ising de spin $\frac{1}{2}$. Autrement dit, l'étude de couplage des spins d'une série infinie de spins $\frac{1}{2}$ et leurs représentations sur les deux bases, couplée et découplée.

Le premier chapitre de ce travail est consacré à des généralités sur les modèles de spins et la physique des transitions de phase ainsi que les phénomènes critiques ont été abordé. Au deuxième chapitre, une description détaillée du modèle d'Ising à 1D et 2D est présentée, 3D, quatre dimensions et plus suivie par une importance du modèle d'Ising pour le développement de la théorie des phénomènes critiques et l'intérêt du ce modèle. Le troisième chapitre discute le moment cinétique et l'étude de couplage des spins d'une série infinie de spins $\frac{1}{2}$ et leurs représentations sur les deux bases, couplée et découplée. Le passage entre les deux bases s'effectue en calculant les « coordonnées » des états couplés dans la base découplée. Cela fait apparaitre ce qu'on appelle les coefficients de Clebsch Gordan

Enfin, une conclusion résume l'ensemble des résultats.

CHAPITRE 1
GÉNÉRALITÉS SUR
LES MODÈLES DE
SPIN

1.1 Introduction

Des généralités sur la physique statistique sont exposées dans ce premier chapitre. Une présentation des modèles de spins est introduite suivie par une illustration des différentes géométries de réseau utilisées dans un système de spin. La physique de la transition de phase est abordée ainsi que les phénomènes critiques et la notion d'universalité qui décrivent le comportement d'un tel système au voisinage de la transition de phase. Et à la fin, on montre l'influence du désordre sur un système magnétique et comment les exposants critiques varient avec ce désordre.

1.2 Modèles de Spin

La modélisation d'un système de spin est un aspect clé du magnétisme à température finie. Les modèles de spin permettent une description simple du comportement d'un spin dans un milieu magnétique. Une description de ces modèles est proposée.

1.2.1 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est défini sur un réseau régulier dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs $\pm \frac{1}{2}$, représentant un spin up ou un spin down (figure 1.1). L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i \quad (1.1)$$

Où $\langle ij \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins, J le paramètre d'interaction et B , est le champ magnétique extérieur.

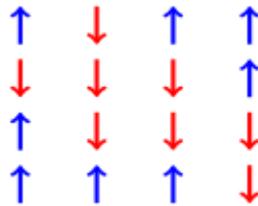


Figure 1.1 - Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches hautes (bleu) et bas (rouge) représentent des spins positifs et négatifs respectivement.

1.2.2 Modèle d'Heisenberg

Très peu de temps après le développement de la mécanique quantique, Heisenberg et Dirac ont proposé indépendamment que le phénomène magnétique dans les solides peut être compris à la base d'un modèle d'échanges couplés de moment quantique angulaire (Spin), avec un Hamiltonien de la forme :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.2)$$

Chapitre 1 Généralités sur les modèles de spin

où J est le paramètre d'interaction entre spins, \mathbf{S}_i l'opérateur de spin, $\langle ij \rangle$ les proches voisins, et le produit scalaire est :

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \quad (1.3)$$

Le modèle décrit un matériau *ferromagnétique* (Le ferromagnétisme est le mécanisme fondamental par lequel certains matériaux (comme le fer) gardent la propriété de l'aimantation et forment des aimants permanents après quand retire l'aimant) pour $J > 0$ et *antiferromagnétique* (ce matériau réagit comme un matériau non magnétique et il n'est ni attiré, ni repoussé par un aimant) pour $J < 0$. L'Hamiltonien d'Heisenberg [21] peut être généralisé à :

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_x S_i^x S_j^x + J_y S_i^y S_j^y + J_z S_i^z S_j^z \quad (1.4)$$

Il est aussi connu comme le modèle XYZ (ou le modèle XXZ si $J_x = J_y \neq J_z$). Un cas spécial $J_z = 0, J_x = J_y$ est connu sous le modèle XY, qui a été utilisé comme un modèle de réseau de l'hélium superfluide. Le modèle de Heisenberg a également d'intéressantes propriétés dynamiques, y compris les excitations collectives *d'ondes de spin*, (une onde de spin est un état excité dans lequel le spin de chacun des ions de la maille tourne autour de sa direction privilégiée (excitation transverse) avec une même énergie (ou une même fréquence) qui déterminent la thermodynamique à basse température.

1.2.3 Modèle XY

Dans le modèle XY, les spins de longueur unité dans un réseau à deux dimensions peuvent tourner dans le plan du réseau (figure 1.2). L'Hamiltonien est décrit par la relation suivante :

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i, \theta_j) \quad (1.5)$$

L'état de chaque spin est donné par son angle $\theta_i \in [0, 2\pi]$

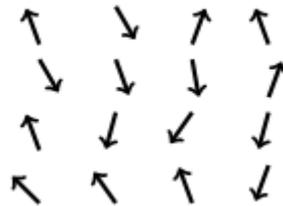


Figure 1.2 – Le modèle XY sur un réseau carré bidimensionnel.

1.2.4 Modèle de Potts

On doit son introduction à C.Domb, qui au début des années 1950, proposa à son thésard R.B.Potts d'étudier une généralisation du modèle d'Ising où chaque spin peut être dans un nombre arbitraire d'états discrets. Le modèle de Potts consiste en un ensemble de spins placés sur les différents sites du réseau pris comme un réseau triangulaire à 2D[15,17], mais rien n'empêche de considérer d'autres réseaux. Pour chaque site, il existe q états (figure 1.3), et l'Hamiltonien est donné par :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(S_i, S_j) \quad (1.6)$$

$S_i = 0, 1, \dots, q$ spécifie l'état du spin au i^e site et $\delta(S_i, S_j)$ est le δ -Kronecker où :

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } S_i = S_j \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (1.7)$$

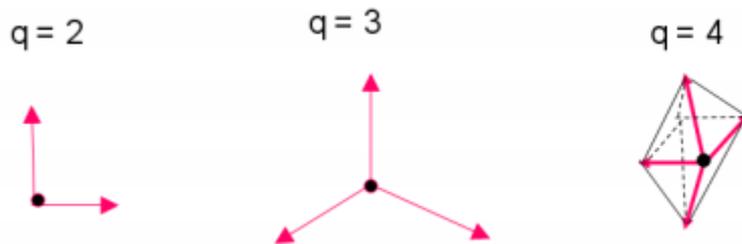


Figure 1.3 – Représentation du modèle de Potts pour différents états q .

1.3 Géométrie des réseaux

Dans un système de spin, les spins doivent être localisés et reliés les uns aux autres afin de décider l'interaction entre eux. Cela peut se faire par un *réseau régulier* ; une structure de liens reliés à des sommets. L'exemple le plus simple de ce type de réseau est le réseau carré (figure 1.4).

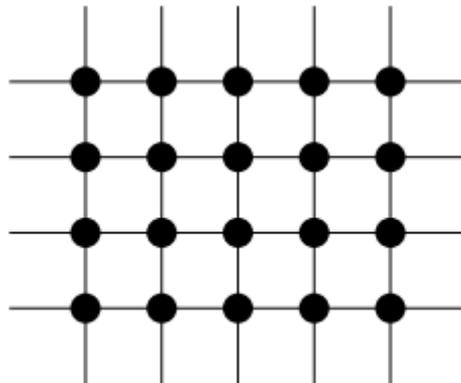


Figure 1.4 – Réseau carré

Chapitre 1 Généralités sur les modèles de spin

L'analogie en 3D est le réseau cubique, en 4D est connu sous le nom de réseau *hypercubique*. D'autres géométries sont utilisées dans les modèles de spin telles que réseau *triangulaire*, *hexagonal*, et de *nid d'abeille* (voir figure 1.5).

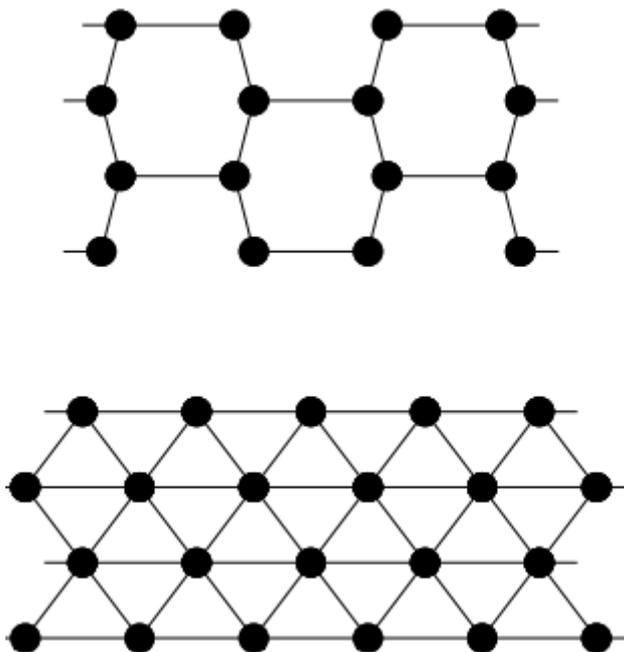


Figure 1.5 - Réseau hexagonal et triangulaire

Un nœud du réseau (vertex) qui peut être occupé par un spin est connu comme un site. La ligne joignant deux sites est appelée un lien (en anglais bond). L'une des propriétés caractéristiques de la géométrie d'un réseau est le nombre de sites directement connectés à un site donné. Ce nombre est connu comme la *coordinence* du réseau exprimé dans la table suivante

Dimension	Réseau	Coordinence
2	Nid d'abeille	3
2	Carré	4
2	Triangulaire	6
3	Diamant	4
3	Cubique	6
3	Tétraédrique	12
4	Hypercubique	8

Table 1.1 –La coordinence des différentes structures géométriques

La localisation des spins peut se faire sur des *réseaux irréguliers*, qui apparaissent dans une large variété de systèmes naturels, tels que les mousses ou les tissus biologiques.

1.4 Transition de phase, Phénomènes critiques et Universalité

La transformation d'un liquide en gaz, d'un matériau conducteur en supra conducteur (est un phénomène caractérisé par l'absence de résistance électrique et l'expulsion du champ magnétique), d'un état fluide à un état superfluide (La superfluide est un état de la matière dans lequel celle-ci se comporte comme un fluide dépourvu de toute viscosité.), ou le passage du ferromagnétisme au paramagnétisme (Le paramagnétisme désigne en magnétisme le comportement d'un milieu matériel qui ne possède pas d'aimantation spontanée mais qui, sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, acquiert une aimantation orientée dans le même sens que le champ magnétique appliqué. Un matériau paramagnétique possède une susceptibilité magnétique de valeur positive) sont des phénomènes que l'on dénomme *transition de phase*. Ce changement d'état physique ou de phase à un autre se produit de manière abrupte pour une valeur critique d'un paramètre intensif (température, pression, champ électrique, champ magnétique, ...). Les transitions de phase sont caractérisées par la discontinuité de certaines grandeurs qui en résultent. On distingue deux manières de classer les transitions de phase. La première fut celle d'Ehrenfest, qui on distingue des transitions d'ordre n les transitions qui s'accompagnent de discontinuités dans les grandeurs physiques reliées aux dérivées n^{e} du potentiel thermodynamique. Dans ce cas elles peuvent être du 2^e ordre si la dérivée seconde est discontinue, du 3^e ordre si la dérivée troisième est discontinue,...etc. Les exemples classiques de transition de 1^{er} ordre sont les transitions entre les trois états standards (solide, liquide, gaz). La transition hélium normal - hélium superfluide est du 2^e ordre. En 1937, Landau proposa une autre classification des transitions de phases, basée sur le fait que certaines transitions (sans chaleur latente) s'accompagnent d'un changement de symétrie du système. Ce qui a conduit Landau à introduire la notion de *paramètre d'ordre*, cette grandeur est nulle dans la phase la plus symétrique (haute température) et différente de zéro dans la deuxième phase.

Les transitions sans paramètre d'ordre, se sont des transitions du premier ordre au sens d'Ehrenfest. Elles se traduisent aussi par un saut du paramètre d'ordre (discontinuité). Les transitions avec paramètre d'ordre, correspondent à une continuité du paramètre d'ordre ainsi qu'à des discontinuités des dérivées des fonctions thermodynamiques. Ces transitions sont qualifiées de *transitions continues* ou de *phénomènes critiques*. C'est le comportement des propriétés thermodynamiques d'un système au voisinage de la transition de phase.

A l'approche du point de transition qu'on l'appelle point critique T_c , la phase ordonnée (voir paragraphe 1.5) a une stabilité comparable à celle de la phase désordonnée et il apparait des zones localement ordonnées de taille ξ . Si la transition est du 2^e ordre au sens de Landau (Pour décrire les transitions de phase avec changement de symétrie, Landau a introduit la notion de paramètre d'ordre m (intensif) : $m = 0$ dans la phase haute température, symétrique, désordonnée, $m \neq 0$ dans la phase basse température, moins symétrique, ordonnée), ξ diverge quand $T \rightarrow T_c$. Le comportement des grandeurs physiques du système au voisinage du point critique T_c est représenté par une puissance de $|T - T_c|$. Ces puissances sont nommées *exposants critiques*. Ces exposants gouvernent le comportement au point critique de certaines grandeurs thermodynamiques. La Table 1.2 résume les définitions des exposants critiques.

Chapitre 1 Généralités sur les modèles de spin

Exposant	Définition	Signification
α	$C_v(T) \sim T - T_c ^{-\alpha}$	Chaleur spécifique
β	$M(T) \sim T - T_c ^\beta$	Aimantation
γ	$\chi(T) \sim T - T_c ^{-\gamma}$	Susceptibilité
δ	$M(T_c, B) \sim B ^{1/\delta}$	Aimantation <i>vs</i> champ magnétique à T_c
ν	$\xi \sim T - T_c ^{-\nu}$	Longueur de corrélation
η	$g(R) \sim R^{-(d-2+\eta)}$	Fonction de corrélation (d dimensionnalité)

Table 1.2 – Définition et signification des exposants critiques

Ces exposants ne sont pas tous indépendants, ils sont reliés entre eux comme indiqué les relations suivantes

$$\begin{aligned}
 \alpha &= 2 - \nu d \\
 \beta &= 1/2\nu(d - 2 + \eta) \\
 \gamma &= \nu(2 - \eta) \\
 \delta &= d + 2 - \eta/d - 2 + \eta
 \end{aligned}
 \tag{1.8}$$

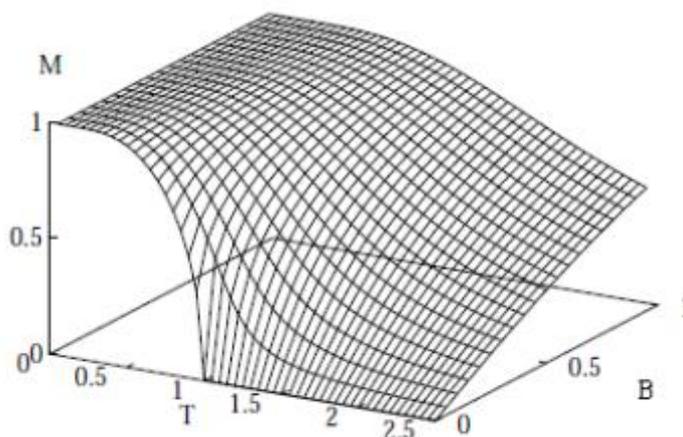


Figure 1.6 – Paramètre d'ordre Vs. température et champ magnétique

Les valeurs des coefficients ont un caractère *universel*: Les exposants critiques ne dépendent que la dimensionnalité n du paramètre d'ordre et de la dimensionnalité d de l'espace physique (le réseau). Deux exposants suffisent à déterminer le système au voisinage de la transition. On a les relations :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

$$\beta(\delta - 1) = \gamma \tag{1.9}$$

Modèle	α	β	γ	δ	ν	η
2D Ising	0	1/8	7/4	15	1	1/4
3D Ising	0.1	0.33	5/4	4.8	0.63	0.04
3DHeisenberg	-0.12	0.36	1.39	4.8	0.71	0.04
3D XY	0.01	0.34	1.3	4.8	0.66	0.04

Table 1.3 – Quelques modèles et leurs exposants critiques

1.5 Système désordonné

Dans la nature, aucun système n'est parfait. Aucuns matériel réel n'est pure. Il contient des défauts généralement modélisés sous la forme d'interactions aléatoires (random bond) ou absente (bond diluted) ou des impuretés qui peuvent être soit magnétiques ou non magnétiques (diluted magnet). La présence d'un champ magnétique aléatoire est aussi considérée comme un type de désordre.

Le désordre peut avoir une grande variété de conséquences sur la physique des transitions de phase. Certaines transitions reste inchangées en présence du désordre alors que d'autres peuvent être complètement détruites. Pour une transition de phase du 2^e ordre, l'effet du désordre peut s'accompagner d'un changement ou pas de la classe d'universalité. Par exemple, un réseau élastique peut changer le caractère de la transition de phase (du 2^e ordre au 1^{er} ordre) sur les matériaux magnétiques. Dans d'autres cas, le désordre peut faire tendre la température de transition de phase vers zéro voir même en éliminant la transition de phase.

Dans ce type d'étude, la première question qui se pose est comment ce fait-il que la présence d'un faible désordre modifie la nature de la phase de transition. La réponse à cette question est donnée par le *critère d'Harris* [1]. L'exposant α de la chaleur spécifique joue le rôle de dimension d'échelle associée au désordre, de sorte que le comportement critique du système est inchangé si $\alpha < 0$, alors que le désordre intervient comme une perturbation pertinente si $\alpha > 0$. La présence d'impuretés tend à désordonner le système et à abaisser sa température critique.

CHAPITRE 2

LE MODÈLE D'ISING

2.1 Introduction

Nous commençons, dans ce chapitre, l'étude d'un problème de mécanique statistique de la matière condensée où l'effet des interactions est important. Le modèle que nous avons discuté ici est connu sous le nom de Modèle d'Ising. Initialement on va présenter ce modèle par une définition, historique et son Hamiltonien suivi d'une étude selon les dimensions. Après lui on calcule la fonction de partition d'un ensemble de spins d'Ising en interactions entre premiers voisins. A la fin, on cite quelques intérêts de ce modèle.

2.2 Présentation du modèle

2.2.1 Définition et historique

Le modèle d'Ising, et parfois appelé modèle de Lenz-Ising doit son nom aux physiciens Wilhelm Lenz et son étudiant Ernst Ising aux années 20 du siècle passé est un modèle de physique statistique [13]. Il a été utilisé pour modéliser différents phénomènes dans lesquels des effets collectifs sont produits par des interactions locales entre particules à deux états. L'exemple principal est le ferromagnétisme [13] pour lequel le modèle d'Ising est un modèle sur réseau de moments magnétiques, dans lequel les particules sont toujours orientées suivant le même axe spatial et ne peuvent prendre que deux valeurs, $+M$ et $-M$.

Au premier temps, le modèle fut introduit pour l'étude des transitions de phase des ferromagnétiques à la *température de curie*. Le problème était de trouver une explication au phénomène de l'aimantation spontanée observé dans les matériaux ferromagnétiques avec un modèle de chaîne ferromagnétique. Ising(1925) dans son sujet de doctorat montra que le phénomène n'apparaît pas dans le cas unidimensionnel [6].

L'histoire ne s'arrêta pas là, Peierls, en 1936, prouva l'existence d'une transition de phase en $2D$ [17]. Kramers et Wannier [8] ont calculé la température de curie du modèle bidimensionnel d'Ising, puis Onsager calcula la fonction de partition en $2D$ [11] dans le cas d'un champ extérieur nul. L'expression exacte de l'aimantation spontanée pour le modèle d'Ising à $2D$ a été calculée par C. N. Yang [4] pour un réseau carré, par R. B. Potts pour un réseau triangulaire [16]. L'extension à $3D$ est beaucoup plus complexe. Plusieurs travaux ont été faits mais aucune solution analytique n'a été trouvée. Le modèle d'Ising à $3D$ est classé parmi les problèmes insolubles. Cela n'empêche pas de le résoudre numériquement et plusieurs solutions approximatives ont vu le jour [15].

Malgré que ses premiers résultats étaient peu favorables, il est devenu évident que son importance s'étend au-delà du domaine du magnétisme vers des champs variés tels que la percolation[5], la socio physique[10], la biologie, l'imagerie,...etc. Il a été aussi appliqué sur différents types de réseaux tels que le réseau régulier et le réseau désordonné.

2.2.2 Applications

a) Matériaux ferromagnétique

Ce modèle permet de décrire relativement simplement le magnétisme des matériaux ferromagnétiques présentant une anisotropie très forte Applications avec une direction privilégiée très marquée.

b) Alliages binaires

Une autre application du modèle d'Ising est la description des alliages binaires. Dans ce cas, les moments magnétiques $+M$ représentent une des espèces atomiques, et les moments magnétiques $-M$ représentent l'autre espèce atomique. L'ordre à longue distance du modèle d'Ising peut décrire une séparation de phase entre les deux espèces (dans le cas où la phase de basse température à tous les moments égaux à $-M$ ou $+M$) ou bien une phase ordonnée dans laquelle l'un des sous réseaux porte des atomes d'une espèce (moments $+M$) et l'autre sous réseau des atomes de l'autre espèce. La phase désordonnée du modèle d'Ising décrit respectivement un état où les deux espèces se mélangent ou un état où les sous-réseaux sont équivalents. Le second cas est appelé transition ordre-désordre. Cette version du modèle d'Ising est appelée modèle de Bragg et Williams (1934 - 1936).

c) Transition liquide-gaz

Une troisième application de ce modèle est la description d'une transition liquide gaz. Dans cette version, les sites portant un moment $+M$ représentent les sites occupés par un atome, et ceux portant un moment $-M$ les sites inoccupés. Le champ magnétique devient dans cette description le potentiel chimique des atomes. La transition de phase se produisant en présence du champ magnétique, c'est une transition du premier ordre entre un état liquide de forte densité et un état gazeux de faible densité. Cette version du modèle d'Ising est appelée modèle du gaz sur réseau.

2.2.3 Hamiltonien

Le Hamiltonien de ce modèle s'écrit:

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.1)$$

J_{ij} est l'interaction d'échange du modèle, et h le champ magnétique. En général, on considère le modèle d'Ising avec interaction entre premier voisins seulement. Dans le cas $J_{ij} > 0$, l'état fondamental pour $h = 0$ est celui où tous les moments ont la même valeur. Dans le cas $J_{ij} < 0$, sur un réseau biparti (Ils représentent les liens entre deux ensembles différents de sommets), le fondamental est également facile à trouver, tous les moments ayant sur l'un des sous réseau la valeur M et $-M$ sur l'autre sous réseau. Dans le cas d'un réseau non biparti, et pour $J_{ij} < 0$, la situation est plus compliquée toutes les énergies d'interaction entre les moments ne pouvant être minimisées simultanément. Dans ce cas, on dit que le modèle d'Ising est *frustré*. Pour un tel

modèle, le fondamental peut ne pas être unique et peut même avoir une dégénérescence macroscopique (c'est le cas du modèle d'Ising frustré sur le réseau triangulaire en deux dimensions). Dans certains cas, il est possible de calculer exactement la dégénérescence du fondamental (G.H. Wannier, 1950).

Il est également possible de considérer des modèles d'Ising avec des interactions aléatoires (modèle d'Edwards-Anderson si les interactions sont à courte portée, modèle de Sherrington et Kirkpatrick si les interactions sont à longue portée). Ces modèles décrivent des matériaux dans lesquels des impuretés magnétiques ont été diluées dans un métal. La frustration empêche ces modèles de développer un ordre à longue portée conventionnel, et joue un rôle important dans la formation d'un état verre de spin. Dans la suite, nous nous occuperons uniquement du modèle non frustré avec interactions déterministes.

2.3 Etude selon la dimension

2.3.1 A Une dimension

a) Courte portée et longue portée

Nous commençons par l'étude du modèle unidimensionnel. Un calcul élémentaire permet dans ce cas, où le réseau est une chaîne linéaire, de déterminer la fonction de partition sans approximation. Le modèle est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert [7]. Historiquement, cette solution remonte à la thèse d'Ising (1925) sous la direction de Wilhelm Lenz.

Cette solution montre que l'énergie libre est analytique pour toute température, ce qui signifie que ce modèle ne possède pas de transition de phase. Un argument physique très général, exposé dans Landau et Lifshitz, permet de montrer que tout modèle unidimensionnel avec des interactions à courte portée ne peut pas posséder de transition de phase à température positive, l'énergie nécessaire pour créer des défauts étant toujours largement contrebalancée par le gain d'entropie. F. J. Dyson a étudié des modèles d'Ising avec interaction à longue portée en une dimension, tels que

$$J_{ij} = |i - j|^{-\sigma} \quad (2.2)$$

Il a été montré que pour $\sigma < 2$ ces modèles étaient ordonnés à toute température et pour $\sigma > 2$, ces modèles étaient désordonnés à toute température. Seul le cas $\sigma = 2$ pouvait éventuellement donner lieu à une transition de phase. Le travail ultérieur de P.W. Anderson, G. Yuval et D. R. Hamman sur l'effet Kondo a montré qu'il existait une relation entre le modèle d'Ising à longue portée avec $\sigma = 2$ et l'effet Kondo.

b) Fonction de partition

Les forces sont à courte portée. Ce point a une importance particulière, notamment pour déterminer s'il existe une phase ordonnée et une transition de phase à température finie. De plus, par souci de simplicité, nous spécifions que les interactions sont non nulles entre premiers voisins seulement. Cette limitation aux premiers voisins simplifie les calculs, mais ne modifie

Chapitre 2 Le Modèle d'Ising

pas qualitativement les propriétés physiques essentielles du modèle par rapport à un cas moins simplifié, mais où la portée des interactions reste finie. Par exemple, un modèle où l'on étendrait les interactions au delà des premiers voisins, en incluant les interactions entre deuxième voisins ou entre troisièmes voisins, garderait essentiellement les mêmes propriétés à des modifications quantitatives près, qui ne changerait pas de façon essentielle la physique. L'Hamiltonien du système en champ nul se réduit à :

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J \sigma_i \sigma_j \quad (2.3)$$

Dans ce qui suit, nous supposons $J > 0$, de sorte que les spins tendent à être parallèles entre eux, (plus précisément à avoir le même signe). La fonction de partition dans l'ensemble canonique s'écrit :

$$Z_c = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \prod_{\langle ij \rangle} \exp K \sigma_i \sigma_j \quad (2.4)$$

où $K = J$, ce qui se réécrit, en mettant en évidence la partie paire et la partie impaire de l'exponentielle :

$$Z_c = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \prod_{\langle i, j \rangle} (\cosh K + \sigma_i \sigma_j \sinh K) \quad (2.5)$$

Numérotions les spins $1, 2, \dots, N$, de gauche à droite. Nous considérons que les deux extrémités sont ouvertes : nous posons $\sigma_{N+1} = 0$. La chaîne comporte donc N spins et $N-1$ liaisons de spins premiers voisins.

$$Z_c = (\cosh K)^{N-1} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + \sigma_i \sigma_j \tanh K) \quad (2.6)$$

En effectuant le produit sur toutes les paires $\langle i, j \rangle$ on obtient une somme de termes comprenant chacun un produit de $N-1$ facteurs, chacun de ces facteurs pouvant être soit 1, soit $\tanh K$. Puis on doit effectuer la trace sur les spins σ_i de ces produits de termes. Dans le calcul de cette trace sur σ_i , tous les termes qui sont proportionnels à σ_i (ou plus généralement à toutes puissance impaire de σ_i) donneront 0 :

$$\sum_{\sigma_{\pm 1} \dots \sigma_k \sigma_i \sigma_j \dots} = 0 \quad (2.7)$$

Le seul terme de trace non nulle, obtenu quand le produit sur les paires $\langle i, j \rangle$ est effectué, est celui où l'on prend, dans chacun des N facteurs $\sigma_i = 1, \dots, N$, le terme 1. Alors,

$$Z_c = 2^N (\cosh K)^{N-1} \quad (2.8)$$

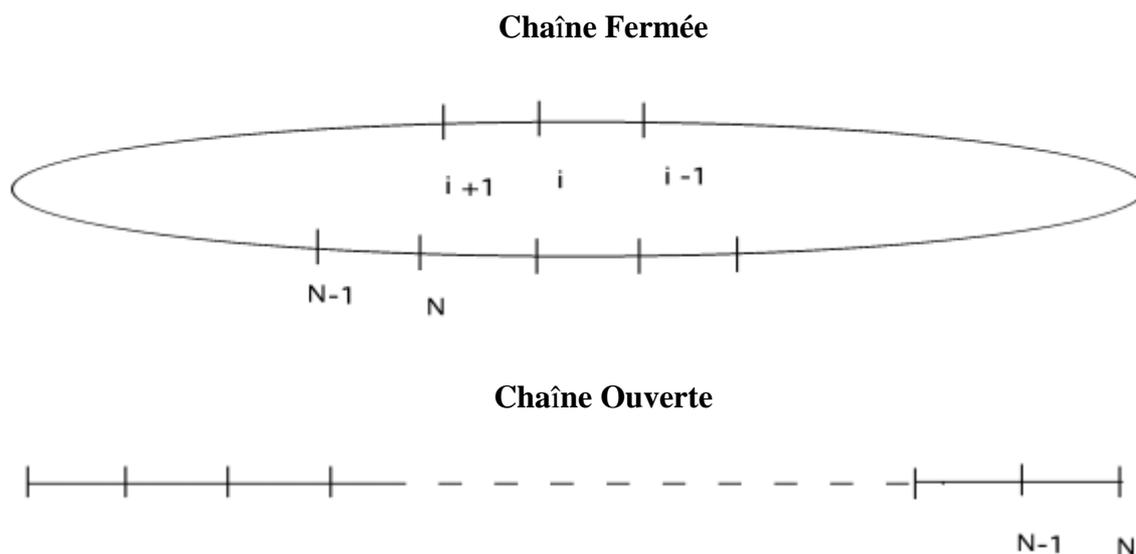


Figure 2.1–Représentation graphique d'une Chaîne du modèle d'Ising

Si, au lieu de prendre des extrémités ouvertes, on impose des conditions aux limites périodiques $\sigma_{N+1} = \sigma_1$, nous obtiendrons un autre terme de trace non nulle.

C) Matrice de transfert

Le calcul élémentaire du paragraphe précédent reste possible en raison de la simplicité du modèle, mais difficilement généralisable à des systèmes plus complexes. C'est pourquoi nous présentons dans ce paragraphe une méthode de calcul en général puissante à une ou deux dimensions, même si elle est difficile à utiliser pour des dimensionnalités plus élevées. On considère une chaîne linéaire de spins d'Ising, refermée sur un cercle et on impose des conditions aux limites périodiques:

$$\sigma_{i+N} = \sigma_i \quad (2.9)$$

L'Hamiltonien du système, en présence d'un champ magnétique extérieur s'écrit :

$$H = - \sum_{i=1}^N J \sigma_i \cdot \sigma_{i+1} - \sum_{i=1}^N h \sigma_i \quad (2.10)$$

Décomposons $\exp - \beta H$ par la méthode suivante :

$$\begin{aligned} \exp - \beta H &= (e^{k\sigma_1\sigma_2 + \beta h\sigma_1}) (e^{k\sigma_2\sigma_3 + \beta h\sigma_2}) \dots (e^{k\sigma_N\sigma_1 + \beta h\sigma_N}) \\ &= T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_N\sigma_1} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Les coefficients à deux indices $T_{\sigma_i\sigma_j}$, où chaque indice σ_i peut prendre 2 valeurs, peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice 2×2 . Cette matrice T est définie de la façon suivante

Chapitre 2 Le Modèle d'Ising

$$\begin{pmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+k+\beta h} & e^{-k+\beta h} \\ e^{-k-\beta h} & e^{+k-\beta h} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

Notons que

$$\sum_{\sigma_2} T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} = (T^2)_{\sigma_1 \sigma_3} \quad (2.13)$$

où T^2 est la matrice carrée de T , par définition même du produit de deux matrices. On peut ainsi sommer de proche en proche sur $\sigma_2 \dots \sigma_N$. On obtient, par cette méthode, la fonction partition canonique pour N de spins :

$$Z_N = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \dots T_{\sigma_N \sigma_1} = \sum_{\sigma_1} (T^N)_{\sigma_1 \sigma_1} \quad (2.14)$$

C'est-à-dire :

$$Z_N = \text{Tr} (T^N) \quad (2.15)$$

Puisque on considère la limite où N est grand, il est commode de faire apparaître le rapport $\frac{\lambda_-}{\lambda_+} < 1$:

$$\frac{1}{N} \text{Ln} Z_N = \text{Ln} \lambda_+ + \frac{1}{N} \text{Ln} [1 + (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^N] \quad (2.16)$$

Les valeurs propres de la matrice \mathbf{T} sont les racines de l'équation :

$$\lambda^2 - 2\lambda e^k \cosh \beta h + 2 \sinh 2K = 0 \quad (2.17)$$

dont les racines sont :

$$\lambda_{\pm} = e^k \cosh \beta h \pm [e^{2k} \sinh^2 \beta h + e^{-2k}]^{1/2} \quad (2.18)$$

et par conséquent,

$$Z_N = (\lambda_+)^N + (\lambda_-)^N \quad (2.19)$$

On s'intéresse à la limite thermodynamique, c'est-à-dire qu'on veut calculer l'énergie libre par spin, dans la limite où le nombre de spins tend vers l'infini. Dans cette limite, l'énergie libre par site s'obtient par :

$$\frac{F}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} (\frac{1}{\beta N} \text{Ln} Z_N) \quad (2.20)$$

Le deuxième terme décroît exponentiellement avec N car λ_- reste strictement inférieur à λ_+ , quels que soient la température et le champ appliqué, à l'exception du point singulier ($T = 0, h = 0$), de sorte que :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta} \text{Ln} [e^k \cosh \beta h + (e^{2k} \sinh^2 \beta h + e^{-2k})^{1/2}] \quad (2.21)$$

On en déduit aisément la susceptibilité magnétique en champ nul :

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial h}\right)_{h=0} = -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial h^2}\right)_{h=0} = N\beta \exp 2k \quad (2.22)$$

qui reste finie à toute température non nulle. Notons que toutes les fonctions thermodynamiques sont régulières. Il ne peut apparaître de singularité à température finie.

2.3.2 A deux dimensions

Les résultantes qui précèdent montrent bien le caractère particulier du cas unidimensionnel. On s'attend à des résultats qualitativement différents à des dimensionnalités plus élevées et à la possibilité d'existence d'une phase ordonnée et d'une transition à température finie. Nous allons donc présenter le cas bidimensionnel où existe une solution exacte, en l'absence de champ magnétique.

a) Solution exacte

Dans le cas bidimensionnel (figure 2.2), Rudolf Peierls a pu montrer en 1936 que le modèle d'Ising possédait une transition de phase. Des arguments théoriques (dualité) dus à Kramers et Wannier ont permis de prédire en 1941 la température à laquelle se produit cette transition de phase. La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel a été donnée pour la première fois par le norvégien américain chimiste Lars Onsager [11].

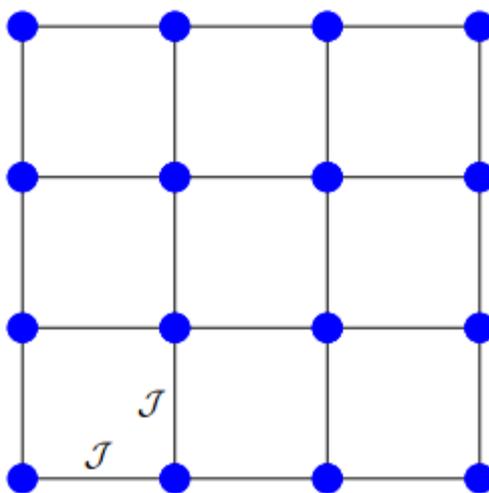


Figure 2.2 – Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré. Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction J (traits noirs).

La solution du modèle, en champ nul, au sens du calcul exact de l'énergie libre est due à Lars Onsager en 1944. La méthode d'Onsager généralise la méthode des matrices de transfert au cas bidimensionnel. Elle exige l'étude d'une algèbre de matrices. Cette méthode étant très compliquée, d'autres physiciens ont cherché à mettre au point des techniques de résolutions plus simples pour ce modèle. Une approche due à Kauffman a conduit à mettre le modèle d'Ising à deux dimensions en relation avec un modèle de fermions unidimensionnels sans interactions. Cette approche a été développée par la suite à l'aide de méthodes d'algèbres

Chapitre 2 Le Modèle d'Ising

de Grassmann par Samuel. Une autre approche due à Kac et Ward (1952) consiste à ramener le calcul de la fonction de partition à une énumération de graphes.

Le comportement du paramètre d'ordre en dessous de la température de transition a été conjecturé par Onsager en 1949. La conjecture d'Onsager a été démontrée par C. N. Yang en 1952. Une méthode plus simple, qui utilise les matrices de Toeplitz et le lemme de Szego a été introduite par E. W. Montroll, J. C. Ward et Renfrey B. Potts en 1963. Les fonctions de corrélations ont été obtenues par Tracy, McCoy et Wu en 1976 en termes de fonctions de Painlevé III. Les résultats de Tracy, MacCoy et Wu ne sont pas limités au point critique du modèle d'Ising, mais sont également valables pour le modèle d'Ising non critique.

b) Matrice de transfert

Cette méthode s'applique encore à deux dimensions. On considère un réseau bidimensionnel sur un tore construit en empilant des anneaux de n spins et ceci de façon périodique, de sorte que le $(m+1)$ ème anneau soit identique au premier.

L'énergie totale est de la forme :

$$\phi(\sigma_1, \sigma_2) + \phi(\sigma_2, \sigma_3) + \dots + \phi(\sigma_m, \sigma_1) \quad (2.23)$$

où σ_i , (qui est un vecteur à n composantes) dénote l'état de spin du i ème anneau et $\phi(\sigma_i, \sigma_j)$ est l'énergie d'interaction entre le i ème et le j ème anneau dans l'état de spin σ_i, σ_j respectivement. Nous supposons que $\phi(\sigma_i, \sigma_j)$ n'est non nul que si les anneaux i et j sont premiers voisins. Définissons la matrice de transfert U :

$$U(\sigma, \sigma') = \exp -\beta\phi(\sigma, \sigma') \quad (2.24)$$

La matrice U est donc une matrice $2^n \times 2^n$, puisque chaque σ est un vecteur à n composantes, chacune de ces composantes pouvant prendre 2 valeurs. La fonction de partition s'exprime en fonction de la matrice de transfert :

$$Z = \text{Tr} \{U_m\} \quad (2.25)$$

Soient λ_1 et λ_2 les deux plus grandes valeurs propres (éventuellement dégénérées) de la matrice de transfert. On peut alors écrire un développement de la fonction de partition pour m grand.

$$Z = (\lambda_1)^m \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^m + \dots \right] \quad (2.26)$$

A la limite thermodynamique,

$$\text{Ln } Z = m \text{Ln } \lambda_1 \quad (\text{II.27})$$

Il s'agit encore de calculer la plus grande valeur propre d'une matrice, mais la dimension de celle-ci $2^n \times 2^n$ est et tend vers l'infini à la limite thermodynamique. Ce problème a cependant été résolu exactement. Cette solution n'est, toutefois, pas assez simple.

c) Dualité

Les Hamiltoniens d'un grand nombre de modèles sur réseau peuvent être exprimés comme la somme, sur toutes les paires de sites, d'énergies de liaison, ne dépendant que des différences entre les valeurs que prennent des variables dynamiques sur les paires de sites définissant les liaisons. Dans ces cas là, il est possible d'effectuer une transformation de Fourier du potentiel de liaison. Les fonctions de partition peuvent alors être exprimées, soit comme des sommes sur les variables dynamiques originelles définies sur les sites du réseau, soit comme des sommes sur les variables transformées de Fourier définies sur les liaisons, mais sujettes à certaines contraintes. La transformation définissant les variables transformées de Fourier est appelée une *"transformation de dualité"*. La dualité, ainsi que les transformations associées jouent un rôle important dans l'étude des transitions de phase à deux dimensions. C'est notamment le cas du modèle d'Ising à deux dimensions. Le modèle d'Ising à deux dimensions est un exemple où la transformation de dualité est une méthode importante, qui apporte de façon très simple des informations physiques précieuses.

d) Réseau Dual

Soit un réseau bidimensionnel, défini par des sites dont la position est définie par les vecteurs \vec{x} , ce qui définit également des liaisons de sites premiers voisins (\vec{x}, \vec{x}') . À chaque liaison (\vec{x}, \vec{x}') du réseau initial, on définit une liaison (\vec{R}, \vec{R}') du *réseau dual*, de façon que le vecteur (\vec{R}, \vec{R}') soit médiateur du vecteur (\vec{x}, \vec{x}') et *vice versa* (figure 2.3). Par construction, le réseau dual du dual est le réseau initial. Il est ainsi possible, pour tout réseau bidimensionnel, de construire le réseau dual associé, en utilisant la construction que nous venons de définir. Donnons quelques exemples de réseaux bidimensionnels et de leurs réseaux "duals". Dans un réseau bidimensionnel carré, on définit de nouveaux sites, repérés par les signes \times , placés au centre de chaque maille du réseau. Ces nouveaux sites \times constituent un nouveau réseau qui est le réseau dual du réseau carré initial. On voit facilement que le réseau dual d'un réseau carré est lui-même un réseau carré de la même forme et de même paramètre de maille, et que le réseau dual d'un réseau hexagonal (en "nid d'abeille") est un réseau triangulaire et vice-versa (figure 2.4). Le réseau original et le réseau dual sont réciproques l'un de l'autre.

Nous allons maintenant appliquer des arguments de dualité au modèle d'Ising bidimensionnel. Considérons le cas d'un réseau carré. La fonction de partition s'écrit :

$$Z = (\cos hK)^s \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \prod_{\langle i, j \rangle} (1 + \sigma_i \sigma_j \tanh K) \quad (2.28)$$

où s est le nombre total de paires de premiers voisins $\langle i, j \rangle$ et est égale à $z N / 2$ si on ignore les effets de bords (z étant le nombre de sites premiers voisins d'un site donné et N le nombre total de sites).

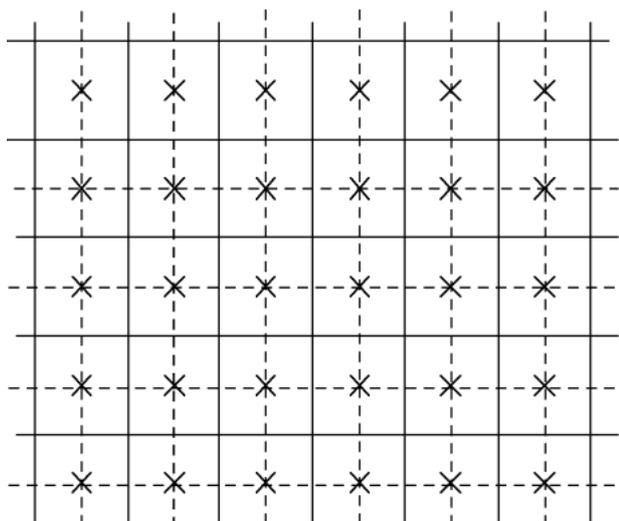


Figure 2.3– Le réseau carre (en traits pleins) et son dual (en tirettes), obtenu en plaçant un nouveau site au centre de chaque maille du réseau originel, sont identiques.

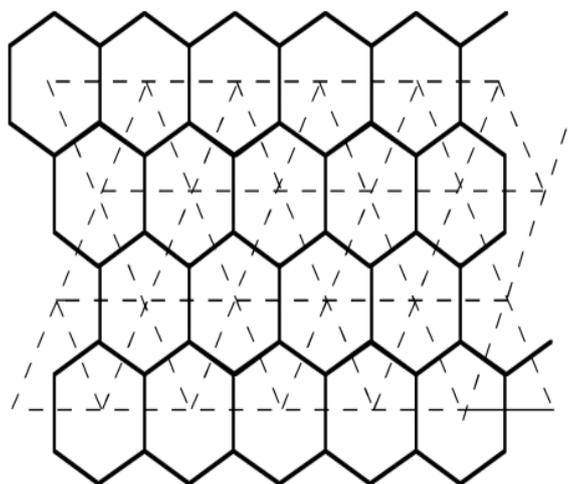


Figure 2.4 –Le réseau dual du réseau "nid d'abeille" est le réseau triangulaire et réciproquement.

2.3.3 Trois dimensions

Pour le modèle d'Ising en trois dimensions, on n'a pas encore trouvé de solution analytique. Cependant, il est possible de calculer les exposants critiques du modèle d'Ising près de la transition en utilisant le groupe de renormalisation ou par le bootstrap conforme (théorie des champs conforme). On a pu calculer sa température critique via des simulations sur ordinateur.

2.3.4 Quatre dimensions et plus

Bien que ce cas soit non physique, les exposants critiques du modèle d'Ising sont alors ceux de la *théorie de champ moyen* (cf. section suivante). Dans le langage du groupe de renormalisation, quatre est la dimension critique supérieure du modèle d'Ising. Également, la théorie de champ moyen est la solution exacte d'un modèle d'Ising à portée infinie défini par le Hamiltonien:

$$H = -\frac{J}{N}(\sum_i \sigma_i)^2 \quad (2.29)$$

Formellement, ce modèle décrit un moment magnétique interagissant avec un nombre de voisins qui tend vers d'infini. Il peut donc être vu comme la limite de dimension infinie du modèle d'Ising. Si au lieu de définir le modèle d'Ising en dimension infinie à l'aide d'une interaction de portée infinie, on fixe le nombre de voisins en considérant un modèle sur un arbre de Cayley (appelé aussi réseau de Bethe), on trouve que la solution exacte est donnée par l'approximation de Bethe-Peierls. Cette approximation donne une meilleure estimation de la température comparée au champ moyen, mais comme il s'agit aussi d'une méthode Auto cohérente, elle reproduit les exposants de champ moyen.

2.4 Fonction de partition d'un ensemble de spins d'Ising en champ Moyen

2.4.1 Sans interaction entre premiers voisins

Il s'agit du modèle le plus simple. L'énergie de chaque moment ne peut prendre pour alors que $+MH$ ou $-MH$, H étant le champ moyen. La fonction de partition prend donc la valeur

$$Z = (e^{\beta MH} + e^{-\beta MH})^N \quad (2.30)$$

d'où on peut déduire facilement l'aimantation, la susceptibilité magnétique, et les autres grandeurs thermodynamiques.

2.4.2 Avec interaction entre premiers voisins

La forme la plus simple d'interaction entre les premiers voisins est du type $JM_i M_{i+1}$ ou J est la constante de couplage. Dans un tel cas, l'énergie impliquée dans l'interaction prend dans le cas de spins d'Ising la valeur JM^2 ou $-JM^2$. L'énergie de l'ensemble de la chaîne prend la forme

$$E = \sum_i H M_i + \sum_i J M_i M_{i+1} \quad (2.31)$$

et la fonction de partition prend alors la forme

Chapitre 2 Le Modèle d'Ising

$$Z = \sum_{\{M_i\}} \exp(-\beta \sum_i (HM_i + JM_i M_{i+1})) \quad (2.32)$$

On peut dans ce cas se réduire au problème de spins sans interaction par l'astuce suivante: On remplace les variables M_i par les variables

$$M'_i = \frac{M_i + M_{i+1}}{2} \quad (2.33)$$

Il en résulte une factorisation possible de Z :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{M'_i\}} \exp\left(\beta \sum_i \left(-HM'_i + 2JM_i'^2 - \frac{JM^2}{2}\right)\right) \\ &= \prod_i \left(\sum_{\text{val } M'_i} \exp\left(\beta \left(-HM'_i + 2JM_i'^2 - \frac{JM^2}{2}\right)\right) \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

soit encore:

$$\exp\left(-\beta \frac{NJM^2}{2}\right) \left(\exp(\beta(-HM + 2JM^2)) + \exp(\beta(HM + 2JM^2)) + 1 \right)^N \quad (2.35)$$

De cette façon on peut encore calculer avec une relative simplicité les diverses variables thermodynamiques.

2.5 Intérêt du modèle

Malgré la simplicité du calcul à une dimension, le calcul à deux dimensions est très complexe. Quant au calcul exact à trois dimensions par les méthodes traditionnelles, il est impossible. L'extrême simplicité de l'interaction élémentaire permet donc de faire apparaître d'une façon très élégante toute la complexité due à la géométrie du matériau étudié. Si nous ajoutons que le spin d'Ising est un modèle très adapté aux simulations numériques sur ordinateur, nous ne nous étonnerons pas de la popularité d'un modèle apparemment si simple.

CHAPITRE 3
LES COEFFICIENTS
DE CLEBSCH-
GORDAN POUR UN
SYSTÈME D'ISING

3.1 Introduction

Le concept du moment cinétique est très important dans la physique atomique du fait qu'on sait son correspondant classique. Dans ce chapitre, on va rappeler les notions de base dans l'étude des moments cinétiques dans la mécanique quantique (observables et états), puis, on va passer au couplage de ces moments qui sera présenté en deux représentations des états et des observables. On appelle ces représentations base couplée et base découplée. Les états de la base couplée s'expriment en fonction des états de la base découplée en introduisant ce qu'on appelle les coefficients de Clebsch Gordan.

3.2 Moment cinétique orbital

3.2.1 Définition

Par définition, la grandeur qui se conserve lors d'une rotation, pour un système fermé, s'appelle *le moment cinétique angulaire*. Pour une seule particule, d'impulsion p , et de position r , le moment cinétique classique est

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (3.1)$$

En mécanique quantique, cette grandeur est appelée *moment cinétique orbital*. Si on introduit les opérateurs de position et de l'impulsion

$$\begin{aligned} \hat{r} &= \vec{r} \\ \hat{p} &= -i\hbar\vec{\nabla} \end{aligned} \quad (3.2)$$

on obtient les trois composantes

$$L_x = -i\hbar(YP_z - ZP_y) \quad (3.3)$$

$$L_y = -i\hbar(ZP_x - XP_z) \quad (3.4)$$

$$L_z = -i\hbar(XP_y - YP_x) \quad (3.5)$$

Par une étude infinitésimale d'angle $d\theta$, on trouve que les composantes de l'opérateur de rotation sont reliés à ceux du moment cinétique par la relation

$$R_i = I - \frac{i}{\hbar}d\theta(L_i) \quad (3.6)$$

Ils forment ce qu'on appelle le *groupe des rotations spatiales* $SO(3)$. Lors d'une rotation arbitraire autour d'un axe d'indice i d'une particule non soumis à un champ extérieur, l'Hamiltonien du système ne change pas puisque toutes les positions d'un tel système sont équivalentes dans l'espace. Enternes mathématiques

$$[R_i, H] = 0 \quad (3.7)$$

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

Autrement dit, l'opérateur de rotation commute avec l'Hamiltonien H . Un tel opérateur ne dépend pas explicitement du temps et est une constante du mouvement. Cet opérateur correspond à une grandeur physique conservative et en plus, on peut déduire que

$$[L_i, H] = 0 \quad (3.8)$$

3.2.2 Relations de commutation

On montre également les relations de commutations suivantes

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \end{aligned} \quad (3.9)$$

Formons les opérateurs L_x^2, L_y^2, L_z^2 qu'on peut considérer comme étant les observables correspondants au carré du vecteur moment cinétique ; appelons cet observable L^2 , soit

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (3.10)$$

Utilisant les relations de commutation (3.9), on vérifie aisément que L^2 commute avec chacun des ses composantes, soit

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 \quad (3.11)$$

Ces dernières relations montrent qu'on peut mesurer (diagonaliser) simultanément le carré du moment cinétique et l'une de ses composantes. On choisit généralement L^2 , et L_z

3.2.3 Opérateur L_z en coordonnées sphériques

Considérons une rotation $R_z(d\alpha)$ autour d'un axe Oz d'un angle infinitésimal $d\alpha$. Utilisons l'espace vectoriel des fonctions d'onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ écrites en coordonnées sphériques, L'opérateur de rotation $R_z(d\alpha)$ transforme la fonction $\psi(r, \theta, \varphi)$ sous la forme

$$R_z(d\alpha)\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - d\alpha) \quad (3.12)$$

Écrivons le développement limité de $\psi(r, \theta, \varphi - d\alpha)$ au voisinage de $d\alpha = 0$, en nous limitant au premier ordre

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\begin{aligned}\psi(r, \theta, \varphi - d\alpha) &= \psi(r, \theta, \varphi) - d\alpha \left(\frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right)_{d\alpha=0} \\ &= \left(1 - d\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi(r, \theta, \varphi)\end{aligned}\quad (3.13)$$

L'opérateur de rotation infinitésimale s'écrit alors

$$R_z(d\alpha) = I - d\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.14)$$

En comparant à l'expression (3.6) qui s'écrit, on voit que le générateur infinitésimal L_z est donné par

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.15)$$

3.3 Opérateur moment cinétique agissant sur les vecteurs d'état

Les fonctions d'onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ sont écrites par la méthode de séparation de variables sous la forme d'un produit de deux parties : radiale $P(r)$ et angulaire $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$. Cette dernière est appelée les *harmoniques sphériques*, et on a

$$\psi(r, \theta, \varphi) = P(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.16)$$

Par cette forme, on peut avoir l'équation aux valeurs propres de l'opérateur L_z et L^2 sous la forme

$$L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle \quad (3.17)$$

$$L^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle \quad (3.18)$$

Les indices l , et m sont les nombres quantiques caractérisant les harmoniques sphériques. Ils prennent les valeurs suivantes

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad \text{et} \quad m = -l, \dots, +l \quad (3.19)$$

3.4 Généralisation du concept du moment cinétique

3.4.1 Définition

Par définition, les observables notés J_x, J_y, J_z et vérifiant les relations de commutation suivantes

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\begin{aligned}[J_x, J_y] &= i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] &= i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] &= i\hbar J_y\end{aligned}\tag{3.20}$$

sont appelées *opérateurs de moment cinétique*. Ces opérateurs forment les composantes du vecteur moment cinétique J . Le moment cinétique orbital n'est ainsi qu'un cas particulier du moment cinétique défini par les relations (3.20). L'opérateur $J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ peut être considéré comme étant l'opérateur correspondant au carré du moment cinétique et noté :

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2\tag{3.21}$$

Nous admettrons que J^2 est une observable et qui commute avec ces trois composantes

$$[J^2, J_x] = [J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0\tag{3.22}$$

Nous allons déterminer les valeurs propres des opérateurs de moment cinétique ainsi que les propriétés générales de leurs vecteurs propres.

3.4.2 Opérateurs d'échelle

Introduisons les opérateurs suivants qu'on nomme opérateurs d'échelle

$$\begin{aligned}J_+ &= J_x + iJ_y \\ J_- &= J_x - iJ_y\end{aligned}\tag{3.23}$$

Ces opérateurs vérifient les nouvelles relations de structure

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z\tag{3.24}$$

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm}\tag{3.25}$$

$$[J^2, J_{\pm}] = 0\tag{3.26}$$

Puisque J_+ , et J_- sont par définition hermitiens, il en résulte que J_+ , et J_- sont adjoints l'un de l'autre

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$(J_+)^+ = J_- \text{ et } (J_-)^+ = J_+ \quad (3.27)$$

Le produit des deux opérateurs nous donne

$$\begin{aligned} J_+J_- &= J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \\ J_-J_+ &= J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.4.3 Valeurs propres

Puisque J^2 et J_z commutent, ils peuvent avoir des vecteurs propres communs que nous supposons de norme unité. Notons $\hbar m$ et $\hbar^2 j(j+1)$ les valeurs propres respectives de J_z et J^2 . Notons $|jm\rangle$ leurs vecteurs propres communs, d'où

$$J_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle \quad (3.29)$$

$$J^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle \quad (3.30)$$

La valeur de j est positive ou nulle car les valeurs propres de J^2 ne peuvent être que positives. Calculons le carré de la norme du vecteur $J_{\pm}|jm\rangle$. Utilisant le fait que J_+ et J_- sont adjoints et en tenant compte de leurs relations de commutation, on obtient les deux actions des opérateurs d'échelle

$$\begin{aligned} J_+|jm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|j, m+1\rangle \\ J_-|jm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j, m-1\rangle \end{aligned} \quad (3.31)$$

avec j entier ou demi-entier positif : $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$, et $-j \leq m \leq j$. Ces dernières relations montrent que $J_+|jm\rangle$ est un vecteur propre de J_z pour la valeur propre $\hbar(m+1)$, et $J_-|jm\rangle$, pour la valeur propre $\hbar(m-1)$. L'opérateur J_+ fait croître m d'une unité et, par suite, fait augmenter la valeur propre de J_z de \hbar alors que J_- la fait décroître de \hbar . Les états de moment angulaire doivent être orthogonaux car leurs valeurs propres sont distinctes et sont supposés normalisés

$$\langle j_1 m_1 | j_2 m_2 \rangle = \delta_{j_1, j_2} \delta_{m_1, m_2} \quad (3.32)$$

3.4.4 Représentations matricielles pour le cas de spin $1/2$

Pour l'électron, le moment cinétique intrinsèque (appelé spin) est noté

$$\vec{S} = \vec{J} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (3.33)$$

On a deux projections $= \pm \frac{1}{2}$. Alors, les états propres $|S, m\rangle$ sont

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |-\rangle$$

$$\left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |+\rangle \tag{3.34}$$

Les équations aux valeurs propres sont

$$\begin{cases} S^2|+\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |+\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |+\rangle \\ S^2|-\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |-\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |-\rangle \end{cases} \begin{cases} S_z|+\rangle = \frac{1}{2} \hbar |+\rangle \\ S_z|-\rangle = -\frac{1}{2} \hbar |-\rangle \end{cases} \tag{3.35}$$

et pour les autres opérateurs, on trouve

$$\begin{cases} S_+|+\rangle = 0 \\ S_+|-\rangle = \hbar |+\rangle \end{cases} \tag{3.36}$$

$$\begin{cases} S_-|+\rangle = \hbar |-\rangle \\ S_-|-\rangle = 0 \end{cases} \tag{3.37}$$

$$\begin{cases} S_x|+\rangle = \frac{S_+ + S_-}{2} = \frac{1}{2} \hbar |-\rangle \\ S_x|-\rangle = \frac{1}{2} \hbar |+\rangle \end{cases} \tag{3.38}$$

$$\begin{cases} S_y|+\rangle = \frac{S_+ - S_-}{2i} = -\frac{\hbar}{2i} |-\rangle \\ S_y|-\rangle = \frac{\hbar}{2i} |+\rangle \end{cases} \tag{3.39}$$

On peut représenter les états propres par les vecteurs

$$\begin{cases} |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

Alors on trouve

$$\begin{cases} S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ S_y = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \\ S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{cases} \tag{3.40}$$

Les matrices de Pauli sont définies par

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\vec{\sigma} = \frac{2}{\hbar} \vec{S} \quad (3.41)$$

Ce qu'il nous donne

$$\begin{cases} \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (3.42)$$

Ces matrices vérifiant

$$\begin{cases} \sigma_i^2 = 1 \\ \det(\sigma_i) = -1 \\ \sigma_i^* = \sigma_i \end{cases} \quad (3.43)$$

Finalement, on note que l'ensemble de $[\sigma_i]$ forme une représentation de matrices unitaires à trois dimensions SU(3) avec l'algèbre

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\varepsilon_k \quad (3.44)$$

3.5 Composition des moments cinétiques

3.5.1 Interaction spin-orbite

Nous avons que les trois composantes du moment cinétique orbital L commutent avec l'Hamiltonien ; d'autre part, comme les opérateurs de spin commutent avec les observables orbitales, les trois composantes du spin S sont aussi des constantes du mouvement. Les corrections relativistes introduisent dans l'Hamiltonien un terme de *couplage spin-orbite* de la forme

$$H_{so} = \xi(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (3.45)$$

où $\xi(r)$ est une fonction connue de la seule variable r . Lorsque l'on tient compte de ce terme, L et S ne commutent plus avec l'Hamiltonien total. En effet, on a par exemple

$$\begin{aligned} [L_z, H_{so}] &= \xi(r) [L_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= \xi(r) (i\hbar L_y S_x - i\hbar L_x S_y) \end{aligned} \quad (3.46)$$

et de même:

$$\begin{aligned} [S_z, H_{so}] &= \xi(r) [S_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= \xi(r) (i\hbar L_x S_y - i\hbar L_y S_x) \end{aligned} \quad (3.47)$$

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

Cependant, si l'on pose:

$$J = L + S \quad (3.48)$$

Les trois composantes de J sont des constantes du mouvement. Il suffit pour le voir d'ajouter membre à membre les égalités (3.46) et (3.47) :

$$[J_z, H_{so}] = [L_z + S_z, H_{so}] = 0 \quad (3.49)$$

La démonstration serait analogue pour les autres composantes de J . On dit que l'opérateur J défini en (3.48) est le moment cinétique total composé de deux moments cinétiques partiels $J_1 = L$ et $J_2 = S$. Ces deux moments commutent entre eux car ils agissent dans des espaces différents. En plus, le moment résultant a comme valeurs

$$|L - S| \leq j \leq L + S \quad (3.50)$$

et ces projections m sont dans l'intervalle $[-j, j]$

3.5.2 Base couplée et base découplée

On appelle base couplée la nouvelle base formée de vecteurs propres de J^2 et J_z . L'intérêt de cette nouvelle base, est de déterminer les états stationnaires du système, c'est-à-dire les états propres de H , il est plus simple de diagonaliser la matrice représentant H dans cette nouvelle base. En effet, comme H commute avec J^2 et J_z , cette matrice se décompose en autant de blocs qu'il y a de sous-espaces propres associés aux divers ensembles de valeurs propres de J^2 et J_z . Sa structure est beaucoup plus simple que celle de la matrice représentation H dans la base de vecteurs propres communs à $J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}$ qu'on appelle base découplée, puisque ni J_{1z} ni J_{2z} ne commutent en général avec H . La section suivante explique un exemple concret.

3.5.3 Exemple : Composition de deux spins $1/2$

a) Description des deux bases

Nous considérons un système de deux particules de spin $1/2$ (électrons ou atomes d'argent dans l'état fondamental, par exemple) et nous nous intéressons uniquement à leurs degrés de liberté de spin ; soient S_1 et S_2 les opérateurs de spin respectifs des deux particules. Il est facile de montrer que S en est aussi un spin. En effet, calculons par exemple le commutateur de S_x et S_y

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\ &= i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z} \\ &= i\hbar S_z \end{aligned} \quad (3.51)$$

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

L'espace des états d'un tel système est un espace à quatre dimensions, obtenu par produit tensoriel des espaces de spin individuels des deux particules (voir section 3.4.3). La base découplée se forme par les états

$$\{|m_1, m_2\rangle\} = \{|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle\} = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\} \quad (3.52)$$

tels que $m_1, m_2 = \pm \frac{1}{2}$ notés par les deux signes \pm . Ces vecteurs sont états propres des quatre observables $S_1^2, S_{1z}, S_2^2, S_{2z}$ (il s'agit plus exactement des prolongements, dans l'espace produit tensoriel, d'opérateurs définis dans chacun des espaces de spin)

$$\begin{aligned} S_1^2 |m_1, m_2\rangle &= S_2^2 |m_1, m_2\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |m_1, m_2\rangle \\ S_{1z} |m_1, m_2\rangle &= m_1 \hbar |m_1, m_2\rangle \\ S_{2z} |m_1, m_2\rangle &= m_2 \hbar |m_1, m_2\rangle \end{aligned} \quad (3.53)$$

$S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ constituent un E.C.O.C¹. (Les deux premières de ces observables sont en réalité des multiples de l'opérateur identité, et peuvent être retirées sans que l'ensemble d'opérateurs cesse d'être complet). A la base canonique, ces observables sont également des prolongements tensoriels des originaux

$$\begin{aligned} S_1^2 &\equiv S_1^2 \otimes I_2 \\ S_2^2 &\equiv I_1 \otimes S_2^2 \\ S_{1z} &\equiv S_{1z} \otimes I_2 \\ S_{2z} &\equiv I_1 \otimes S_{2z} \end{aligned} \quad (3.54)$$

I_1 et I_2 sont respectivement les identités dans les deux espaces liés au deux spins (dans ce cas ils sont identiques puisque on a couplé deux spins identiques)

La base couplée se forme par les états $\{|S, M\rangle\}$ où $|S - S| \leq j \leq S + S$ or $j = 0, 1$ et les états sont

$$\{|S, M\rangle\} = \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle\} \quad (3.55)$$

Les équations aux valeurs propres s'écrivent

$$\begin{aligned} S^2 |S, M\rangle &= \hbar^2 S(S + 1) |S, M\rangle \\ S_z |S, M\rangle &= M \hbar |S, M\rangle \end{aligned} \quad (3.56)$$

Le passage entre les observables des deux bases s'effectue par les relations

¹E.C.O.C: Ensemble Complet d'Observable qui Commentent.

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\begin{aligned}
 S^2 &= (S_1 + S_2)^2 \equiv S_1^2 \otimes I_2 + I_1 \otimes S_2^2 + 2(S_1 \otimes I_2) \cdot (I_1 \otimes S_2) \\
 S_z &= S_{1z} + S_{2z} \equiv S_{1z} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2z} \\
 S_{\pm} &= S_{1\pm} + S_{2\pm} \equiv S_{1\pm} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2\pm}
 \end{aligned} \tag{3.57}$$

On peut éliminer le symbole \otimes (mais il est sous entendu) et écrire simplement

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2(S_1 \cdot S_2) \tag{3.58}$$

$$S_z = S_{1z} + S_{2z} \tag{3.59}$$

$$S_{\pm} = S_{1\pm} + S_{2\pm} \tag{3.60}$$

et le produit scalaire $S_1 \cdot S_2$ peut s'exprimer en fonction des opérateurs $S_{1\pm}, S_{1z}$ et $S_{2\pm}, S_{2z}$. On vérifie en effet aisément que

$$\begin{aligned}
 S_1 \cdot S_2 &= S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} \\
 &= \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z}
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

Remarquons que, comme S_1 et S_2 commutent séparément avec S_1^2 et S_2^2 , il en est de même des trois composantes de S ; en particulier, S^2 et S_z commutent avec S_1^2 et S_2^2 :

$$[S_z, S_1^2] = [S_z, S_2^2] = 0 \tag{3.62}$$

$$[S^2, S_1^2] = [S^2, S_2^2] = 0 \tag{3.63}$$

D'autre part, S_z commute évidemment avec S_{1z} et S_{2z}

$$[S_z, S_{1z}] = [S_z, S_{2z}] = 0 \tag{3.64}$$

Par contre, S^2 ne commute ni avec S_{1z} ni avec S_{2z} . En effet

$$\begin{aligned}
 [S^2, S_{1z}] &= [S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2, S_{1z}] \\
 &= 2[S_1 \cdot S_2, S_{1z}] \\
 &= 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}, S_{1z}] \\
 &= 2i\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y})
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

Le commutateur de S^2 avec S_{2z} est bien sur exactement opposé au précédent, de façon que $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ commute avec S^2

$$[S^2, S_z] = 0 \tag{3.66}$$

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

Notons qu'on a utilisé la propriété

$$(A \otimes B).(C \otimes D) = (A.C \otimes B.D) \quad (3.67)$$

Et pour l'action des opérateurs, chaque opérateur agit dans son propre espace

$$(A \otimes B)|a\rangle \otimes |b\rangle = A|a\rangle \otimes B|b\rangle \quad (3.68)$$

b) Diagonalisation des observables couplés dans la base $|m_1, m_2\rangle$

On vérifie effectivement, en utilisant (3.59)

$$S_z|m_1, m_2\rangle = (S_{1z} + S_{2z})|m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar|m_1, m_2\rangle \quad (3.69)$$

$|m_1, m_2\rangle$ est donc état propre de S_z avec la valeur propre :

$$M = (m_1 + m_2) \quad (3.70)$$

Comme m_1 et m_2 peuvent être égaux chacun à $\pm \frac{1}{2}$, on en déduit que M peut prendre les valeurs $+1, 0$, et -1 . Les valeurs $M = 1$ et $M = -1$ ne sont pas dégénérées : il leur correspond un seul vecteurs propre, $|+, +\rangle$ pour la première et $|-, -\rangle$ pour la deuxième. Par contre, $M = 0$ est deux fois dégénérées : deux vecteurs propres orthogonaux lui sont associés, $|+, -\rangle$ et $|-, +\rangle$; toute combinaison linéaire de ces deux vecteurs est état propre de S_z avec la valeur propre 0. Ces résultats apparaissent clairement sur la matrice représentant S_z dans la base $|m_1, m_2\rangle$; si l'on prend les vecteurs de la base canonique, elle s'écrit en effet

$$(S_z) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.71)$$

Il ne reste donc plus qu'à calculer puis diagonaliser la matrice représentant S^2 dans la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$. Nous savons à l'avance qu'elle n'est pas diagonale, puisque S^2 ne commute pas avec S_{1z} et S_{2z} . Nous allons appliquer S^2 à chacun des vecteurs de base. Pour cela, nous utiliserons la formule (3.61). Les quatre vecteurs $|m_1, m_2\rangle$ sont vecteurs propres de S_1^2, S_2^2, S_{1z} et S_{2z} (formules (3.53))

$$S^2|+, +\rangle = 2\hbar^2|+, +\rangle \quad (3.72)$$

$$S^2|+, -\rangle = \hbar^2[|+, -\rangle + |-, +\rangle] \quad (3.73)$$

$$S^2|-, +\rangle = \hbar^2[|-, +\rangle + |+, -\rangle] \quad (3.74)$$

$$S^2|-, -\rangle = 2\hbar^2|-, -\rangle \quad (3.75)$$

La matrice représentant S^2 dans cette base dans l'ordre ainsi défini est donc

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$(S^2) = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

Les zéros qui figurant dans cette matrice pouvaient être prévus sans calculs. En effet, S^2 commute avec S_z , et n'a donc d'éléments de matrice non-nuls qu'entre vecteurs propres de S_z associés à la même valeur propre, les seuls éléments non-diagonaux de S^2 qui pouvaient être différents de zéro sont ceux qui relient $|+, -\rangle$ à $|-, +\rangle$. Reste à diagonaliser la sous-matrice 2×2 :

$$(S^2)_0 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.77)$$

qui représente S^2 à l'intérieur du sous-espace à deux dimensions engendré par $|+, -\rangle$ et $|-, +\rangle$, c'est-à-dire du sous-espace propre de S_z correspondant à $M=0$. Les valeurs propres de la matrice (3.77) s'obtiennent en résolvant l'équation caractéristique :

$$(1 - \lambda)^2 - 1 = 0 \quad (3.78)$$

Les racines de cette équation sont $\lambda = 0$ et $\lambda = 2$, ce qui donne les dernières valeurs propres correspondant :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|+, -\rangle + |-, +\rangle] \quad (3.79)$$

pour la valeurs propre $2\hbar^2$ et

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|+, -\rangle - |-, +\rangle] \quad (3.80)$$

pour la valeurs propre 0. Bien entendu, ils ne sont déterminés qu'à un facteur de phase global près ; les coefficients $1/\sqrt{2}$ assurent leur normalisation.

L'opérateur S^2 possède donc deux valeurs propres distinctes : 0 et $2\hbar^2$. La première est non-dégénérés, et il lui correspond le vecteur (3.80); la deuxième est dégénérée d'ordre 3, et il lui associés les vecteurs (3.79), (3.72), et (3.75).

c) Résultats de couplage

A partir des deux relations (3.55) et (3.70), et lorsque l'on compose deux spins ($S_1 = S_2 = 1/2$), et en tenant compte de ce qui précède, on écrit le passage entre les deux vecteurs de chaque base

$$\left\{ \begin{array}{l} |1,1\rangle = |+, +\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+, -\rangle + |-, +\rangle] \\ |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+, -\rangle - |-, +\rangle] \\ |1,-1\rangle = |-, -\rangle \end{array} \right\} \quad (3.81)$$

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

Les constantes apparaissent lors de ce passage assurent la normalisation et sont appelées *coefficients de Clebsch Gordan* qu'on va donner une description suffisante.

3.6 Coefficients de Clebsch-Gordan

3.6.1 Définition

Les coefficients de Clebsch -Gordan sont des nombres qui apparaissent lors de l'étude des couplages de moments cinétiques. Ils portent le nom des mathématiciens allemands Alfred Clebsch (1833-1872) et Paul Gordan (1837-1912), qui rencontrèrent un problème similaire en théorie des invariants. En théorie des représentations, notamment des groupes de Lie compacts, ces coefficients sont utilisés pour effectuer la décomposition en somme directe du produit tensoriel de deux représentations irréductibles. On peut définir les coefficients de Clebsch-Gordan associés au groupe $SO(3)$ d'une manière plus directe, comme produit d'harmoniques sphériques. Les états de moment cinétique peuvent être développés en les supposant non couplés.

$$|JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | JM\rangle \quad (3.82)$$

Les coefficients qui apparaissent dans le développement, notés $\langle m_1 m_2 | JM\rangle$, sont les coefficients de Clebsch-Gordan pour un couplage de deux moments J_1 , et J_2 . En appliquant l'opérateur

$$J_z = J_{z1} + J_{z2} \quad (3.83)$$

des deux côtés de l'égalité, on montre que ces coefficients ne pas être nuls seulement lorsque $M = m_1 + m_2$

3.6.2 Quelques propriétés

On peut introduire la notation alternative, mais équivalente, suivante

$$\langle JM | m_1 m_2\rangle \equiv \langle m_1 m_2 | JM\rangle \quad (3.84)$$

Il est alors possible d'établir deux relations d'orthogonalité

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-j}^j \langle m_1 m_2 | JM\rangle \langle JM | m'_1 m'_2\rangle = \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2} \quad (3.85)$$

$$\sum_{m_1 m_2} \langle JM | m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | J' M'\rangle = \delta_{j, j'} \delta_{M, M'} \quad (3.86)$$

La relation de symétrie suivante est toujours valable

$$\langle m_1 m_2 | JM\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle -m_1, -m_2 | J - M\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle m_2 m_1 | JM\rangle \quad (3.87)$$

On peut remarquer que, pour définir complètement les $\langle m_1, m_2 | J, M\rangle$, la relation (3.82) n'est pas suffisantes : le vecteur normé $|J, M\rangle$ n'est en effet fixé a priori qu'à un facteur de phase près par la donnée des valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $M\hbar$ correspondantes, et il faut

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

choisir une convention de phase pour achever de le définir. Ceci nous permettra en particulier de montrer que tous les coefficients de Clebsch-Gordan sont alors réels.

3.6.3 Relation de récurrence

De même que (3.86), les kets $|J, M\rangle$ satisfont par construction à

$$J_{\pm}|J, M\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}|J, M \pm 1\rangle \quad (3.88)$$

Cela nous conduit à ces relations entre les coefficients

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M+1)}\langle m_1, m_2 | J, M+1 \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)}\langle m_1-1, m_2 | J, M \rangle \\ &+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)}\langle m_1, m_2-1 | J, M \rangle \end{aligned} \quad (3.89)$$

Le premier membre de cette relation étant nul si $M = J$. (3.89) est une relation de récurrence entre les coefficients de Clebsch-Gordan.

3.7 Composition de N moments cinétiques pour le modèle d'Ising

On cherche dans cette section à trouver un moyen pour généraliser le concept de couplage de moments cinétiques dans le cas du modèle d'Ising à N spins $\frac{1}{2}$. Autrement dit

$$j_1 = j_2 = j_3 = \dots j_N = \frac{1}{2}$$

Afin de fixer notre notation, on désigne par $|m_1, m_2, m_3, \dots, m_N\rangle$ les vecteurs de base de la base découpée prenant les deux valeurs $\pm \frac{1}{2}$ notés (\pm) , et par $|J_2, J_3, \dots, J_N, M\rangle$ ceux de la base couplée pour un couplage de N spins $\frac{1}{2}$. Les coefficients de Clebsch Gordan sont alors

$$\langle m_1 m_2, \dots, m_N | J_2, J_3, \dots, J_N, M \rangle \quad (3.90)$$

$$\text{Avec} \quad -J_N \leq M \leq J_N$$

3.7.1 Composition de trois spins

La composition des trois spins $j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, j_3 = \frac{1}{2}$ se fait de façon associative. On compose les deux premiers puis on les rajoute le troisième. L'ensemble des états de la base découpée sont

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\{|m_1, m_2, m_3\rangle\} = \left\{ \begin{array}{l} |+,+,+\rangle \\ |+,+,-\rangle \\ |+,-,+\rangle \\ |-,+,+\rangle \\ |+,-,-\rangle \\ |-,+,-\rangle \\ |-,-,+\rangle \\ |-,-,-\rangle \end{array} \right\} \quad (3.91)$$

Soit au total $2^3 = 8$ états. On peut classer ces états dans 4 sous espaces selon le nombre n des signes « - »

$$n = 0 \text{ pour } |+,+,+\rangle \quad (3.92)$$

$$n = 1 \text{ pour } |-,+,+\rangle, |+,-,+\rangle, |+,+,-\rangle, \quad (3.93)$$

$$n = 2 \text{ pour } |-,-,+\rangle, |-,+,-\rangle, |+,-,-\rangle \quad (3.94)$$

$$n = 3 \text{ pour } |-,-,-\rangle \quad (3.95)$$

Dans la base couplée, on procède comme suit : Tout d'abord, on couple les deux premiers spins ce qu'il nous donne les états

$$\{|J_2, M\rangle\} = \{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle, |0,0\rangle\}$$

En rajoutant le troisième, cela est équivalent à coupler les deux spins $J_2 = 1, 0$ (le résultant des deux spins $1/2$) et $j_3 = \frac{1}{2}$ (en minuscule). On obtient

$$|J_2 - j_3| \leq J_3 \leq J_2 + j_3$$

où on garde la notation majuscule pour les spins résultants, et la minuscule pour les spins d'origine. On trouve alors

$$(J_2, J_3) = \left\{ \left(1, \frac{1}{2}\right), \left(1, \frac{3}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}\right) \right\}$$

et $-J_3 \leq M \leq J_3$ pour chaque valeur de J_3 . Finalement, on obtient les 8 états de la base couplée

$$\begin{aligned} \{|J_2, J_3, M\rangle\} = \\ \left\{ \left\{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\}, \left\{1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \left\{1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{1, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\}, \left\{1, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\}, \left\{0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \left\{0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\} \right\} \end{aligned}$$

La correspondance entre les deux bases se traduit par les relations suivantes

$$\left\{1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\} = |+,+,+\rangle, \quad (3.96)$$

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\left\{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = a|-, +, +\rangle + b|+, -, +\rangle + c|+, +, -\rangle, \quad (3.97)$$

$$\left\{1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = d|-, -, +\rangle + e|+, -, -\rangle + f|-, +, -\rangle, \quad (3.98)$$

$$\left\{1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = a'|-, +, +\rangle + b'|+, -, +\rangle + c'|+, +, -\rangle, \quad (3.99)$$

$$\left\{1, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = d'|-, -, +\rangle + e'|+, -, -\rangle + f'|-, +, -\rangle, \quad (3.100)$$

$$\left\{0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = a''|-, +, +\rangle + b''|+, -, +\rangle + c''|+, +, -\rangle, \quad (3.101)$$

$$\left\{0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = d''|-, -, +\rangle + e''|+, -, -\rangle + f''|-, +, -\rangle, \quad (3.102)$$

$$\left\{1, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = |-, -, -\rangle \quad (3.103)$$

Au total, 4 sous espaces associés aux 4 valeurs de $M : \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ en concordance avec (3.95). Les constantes apparaissant dans (3.95) sont les coefficients de Clebsch Gordan vérifiant la relation de normalisation

$$a^2 + b^2 + c^2 = 1 \quad (3.104)$$

Et des relations similaires pour les autres. Par application de J_{-3} sur l'état $\left\{1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle$, et ces composantes sur l'état $|+, +, +\rangle$, on trouve

$$J_{-3} \left\{1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = j_{-1}|+, +, +\rangle + j_{-2}|+, +, +\rangle + j_{-3}|+, +, +\rangle$$

d'où

$$\sqrt{3} \left\{1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = |-, +, +\rangle + |+, -, +\rangle + |+, +, -\rangle$$

et on tire les trois coefficients

$$a' = b' = c' = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Alors

$$\left\{1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|-, +, +\rangle + |+, -, +\rangle + |+, +, -\rangle)$$

On répète la procédure sur ce dernier état, alors

$$\left\{1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (j_{-1} + j_{-2} + j_{-3})(|-, +, +\rangle + |+, -, +\rangle + |+, +, -\rangle)$$

on

obtient

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$2 \left\{ 1, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{3}} (|-, -, +\rangle + |+, -, -\rangle + |-, +, -\rangle)$$

or les coefficients

$$d' = e' = f' = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Il nous reste à déterminer les quatre états (coefficients) restants (3.97), (3.98), (3.101), et (3.102). On ne peut pas agir de la même manière puisque on n'a pas un état bien déterminé comme l'état (3.96) sur lequel on peut appliquer J_{-3} , mais, on peut collecter des équations pour résoudre un système et obtenir les coefficients restants mais à une phase près. Prenons le sous espace engendré par $n = 1$. C.à.d. les états (3.97), (3.99), et (3.101) où $M = \frac{1}{2}$. On a 9 coefficients et 6 à déterminer. On peut avoir les relations suivantes provenant des propriétés d'orthogonalités (3.86)

$$\begin{cases} a^2 + b^2 + c^2 = 1 \\ a''^2 + b''^2 + c''^2 = 1 \\ aa'' + bb'' + cc'' = 0 \\ a + b + c = 0 \\ a'' + b'' + c'' = 0 \end{cases} \quad (3.105)$$

et la même chose pour le deuxième sous espace $n = 2$

$$\begin{cases} d^2 + e^2 + f^2 = 1 \\ d''^2 + e''^2 + f''^2 = 1 \\ dd'' + ee'' + ff'' = 0 \\ d + e + f = 0 \\ d'' + e'' + f'' = 0 \end{cases} \quad (3.106)$$

Le passage entre les deux sous espaces s'effectue de (3.97) à (3.98), et de (3.101) à (3.102) par action de J_{-3} . Cela nous offre ces relations

$$\begin{cases} J_{-3} \left\{ 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = (j_{-1} + j_{-2} + j_{-3})(a|-, +, +\rangle + b|+, -, +\rangle + c|+, +, -\rangle) \\ J_{-3} \left\{ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = (j_{-1} + j_{-2} + j_{-3})(a''|-, +, +\rangle + b''|+, -, +\rangle + c''|+, +, -\rangle) \end{cases}$$

Ça nous ramène à

$$\begin{cases} \left\{ 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = (a + b)|-, -, +\rangle + (b + c)|+, -, -\rangle + (a + c)|-, +, -\rangle \\ \left\{ 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = (a'' + b'')|-, -, +\rangle + (b'' + c'')|+, -, -\rangle + (a'' + c'')|-, +, -\rangle \end{cases}$$

En comparant respectivement avec (3.198), et (3.102), on trouve un troisième système

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

$$\left\{ \begin{array}{l} (a + b) = d \\ (b + c) = e \\ (a + c) = f \\ (a'' + b'') = d'' \\ (b'' + c'') = e'' \\ (a'' + c'') = f'' \end{array} \right. \quad (3.107)$$

En regroupant les trois systèmes (3.105), (3.106), et (3.107), on trouve 11 équations indépendantes et on a une infinité de solutions. C'est pour ça, les coefficients de Clebsch Gordan sont déterminés à une phase près. Si on fixe par exemple $c'' = 1\sqrt{3}$, le MAPLE nous donne les résultats numériques

$$\left\{ \begin{array}{l} a = 0.211 \\ b = -0.789 \\ c = 0.577 \\ a'' = -0.789 \\ b'' = 0.211 \\ c'' = 0.577 \\ d = -0.577 \\ e = -0.211 \\ f = 0.789 \\ d'' = -0.577 \\ e'' = 0.789 \\ f'' = -0.211 \end{array} \right.$$

Finalement, on a décrit un système de trois spins $\frac{1}{2}$ en deux représentations qu'on a donné le liens entre eux.

3.7.2 La généralisation à N spins

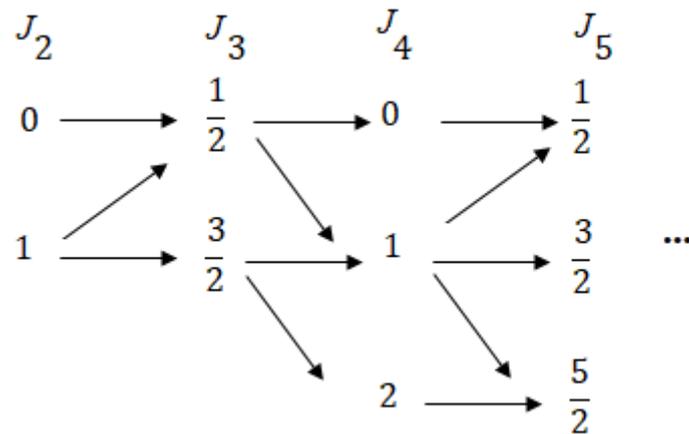
De manière pareille, on fait une généralisation pour un couplage de N spins. La base découplée se forme par 2^N états. On peut les classer dans $N+1$ sous espaces selon le nombre n des signes « - »

$$\begin{aligned} n = 0 & \text{ pour } |+, \dots, +\rangle, \\ n = 1 & \text{ pour } |-, +, \dots, +\rangle, |+, -, +, \dots, +\rangle, \dots \\ n = 2 & \text{ pour } |-, -, +, \dots, +\rangle, |-, +, -, +, \dots, +\rangle, \dots \\ & \vdots \\ n = N & \text{ pour } |-, \dots, -\rangle \end{aligned}$$

La dimension de chaque sous espace est C_N^n , et ils sont de nombre $n + 1$.

La base couplée se forme par les indices $|J_2, J_3, \dots, J_N, M\rangle$ en suivant le chemin

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising



Prenons l'exemple pour J_4 . On a $J_4 = 0, 1, 2$. Puisque pour chaque valeur de J , on a $2J + 1$ valeurs de M , alors, pour $J_4 = 0$, on a $1 \times (2 \text{ flèches venant de } \frac{1}{2})$, pour $J_4 = 1$, on a $3 \times (2 \text{ flèches de } \frac{1}{2} + \text{une flèche de } \frac{3}{2})$, et pour $J_4 = 2$, on a $5 \times (1)$. Le total vaut 16 états qui sont

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, \frac{3}{2}, 2, -2\rangle \\ |1, \frac{3}{2}, 2, -1\rangle \\ |1, \frac{3}{2}, 2, 0\rangle \\ |1, \frac{3}{2}, 2, 1\rangle \\ |1, \frac{3}{2}, 2, 2\rangle \\ |1, \frac{3}{2}, 1, -1\rangle \\ |1, \frac{3}{2}, 1, 0\rangle \\ |1, \frac{3}{2}, 1, 1\rangle \\ |1, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle \\ |1, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle \\ |1, \frac{1}{2}, 1, -1\rangle \\ |1, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle \\ |0, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle \\ |0, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle \\ |0, \frac{1}{2}, 1, -1\rangle \\ |0, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle \end{array} \right.$$

Chapitre 3 Les coefficients de Clebsch-Gordan pour un système d'Ising

Notons que ces nombres vont se doubler pour J_5 . Et généralement, à chaque nouveau couplage d'ordre k , les nombres des valeurs de J_2, \dots, J_{k-1} vont se doubler comme on peut le voir dans notre exemple pour J_2 , et J_3 .

Il reste maintenant à noter que pour un système de N spins couplés, on a $\sum_{k=0}^N (C_N^k)^2$ coefficients de Clebsch Gordan. Pour les déterminer, on a besoin de même nombre d'équations. Les contraintes qu'on a (telles que l'orthogonalité, et le passage entre les sous espaces) nous donnent un nombre insuffisant d'équations alors, nos coefficients sont toujours déterminés à des phases près sinon il est nécessaire de trouver de nouvelles contraintes pour une résolution complète. Cela peut être un objectif d'un prochain travail.

CONCLUSION

Dans ce mémoire, on a considéré un système d'Ising de N spins $\frac{1}{2}$ en couplage entre eux. Ce système est étudié de point de vue son moment cinétique global. Pour cela, on a présenté les notions essentielles de compositions des moments cinétiques telles que les observables et les états de couplage. On a expliqué les deux représentations des observables et des états qu'on appelle base couplée et découplée. La base découplée est formée par des prolongements tensoriels des états et des observables des moments originaux, et la base couplée introduit un nouveau moment total résultant des moments couplés. Le passage entre les deux bases s'effectue en calculant les « coordonnées » des états couplés dans la base découplée. Cela fait apparaître ce qu'on appelle les coefficients de Clebsch Gordan connus par leurs propriétés. On a illustré notre problème par deux exemples : couplage de deux moments de spins, et de trois moments, puis on fait une généralisation pour un couplage de N spins.

RÉFÉRENCES

- [1] A. B. Harris, J. Phys. C7, (1974) .
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique quantique tome I.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique quantique tome II.
- [4] C. N. Yang, Phys Rev, 85, (1952).
- [5] D. Stauffer, Introduction to percolation theory. Taylor and Francis, London and Philadelphia, 1985.
- [6] E. Ising, Z. Physik 31, (1925).
- [7] G F. Newell and E W. Montroll, On the Theory of the Ising Model of Ferromagnetism,
- [8] H .A .Kramers, G.H. Warnnier, Phys Rev, 60, (1941)
- [9] HLADIK.J, Chrysos.M, Hladik,P-E, Ancarani.L, Mécanique quantique atomes et noyaux Applications technologiques.
- [10] K. Sznajd-Weron, J. Sznajd, Int. Mod. Phys. C, 11, (2001).
- [11] L. Onsager, PhysRev, 65, (1944) 117.
- [12] Modèle d'Ising à une et deux dimension <https://www.lps.u-psud.fr/IMG/pdf-chapitre-Ising.pdf>
- [13] Nakamura Y., Tucker J.W., «Monte Carlo study of a mixed spin-1 and spin-3/2 Isingferromagnet", 2002.
- [14] Pascal Viot, "Simulation numérique en physique statistique", Laboratoire de Physique
- [15] Pierre-Emmanuel Berche et all, EuropeanPhysical Journal B, 38, (2004)
- [16] R. B.Potts, Physical Rev, 88, (1952).
- [17] R. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc, 32, (1936).
- [18] R.B.Potts, Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society, 48, (1952)
- [19] Reviews of Modern Physics 25, (1953) 353.
- [20] S. Torquato, Phys.Biol, 8, (2011) 015017.
- [21] State Calculations by Fast Computing Machines," J Chem. Phys. 21(1953) 1087-1092 Théorie de la Matière Condensée.
- [22] W .Heisenberg, Z.Phys, 49, (1928).
- [23] W. Lenz, Phys.Zeitschr, 21, (1920).
- [24] Zettili. N,Quantum Mechanics Concepts and Applications, Second Edition, 2009

RÉSUMÉ

Dans ce mémoire, on a considéré un système d'Ising de N spins $\frac{1}{2}$ en couplage entre eux. Ce système est étudié de point de vue son moment cinétique global. Pour cela, on a présenté les notions essentielles de compositions des moments cinétiques telles que les observables et les états de couplage. On a expliqué les deux représentations des observables et des états qu'on appelle base couplée et découplée. La base découplée est formée par des prolongements tensoriels des états et des observables des moments originaux, et la base couplée introduit un nouveau moment total résultant des moments couplés. Le passage entre les deux bases s'effectue en calculant les « coordonnées » des états couplés dans la base découplée. Cela fait apparaître ce qu'on appelle les coefficients de Clebsch Gordan connus par leurs propriétés. On a illustré notre problème par deux exemples : couplage de deux moments de spins, et de trois moments, puis on fait une généralisation pour un couplage de N spins.

Les mots clé : système d'Ising, le moment cinétique, base couplée, base découplée, les coefficients de Clebsch Gordan

ABSTRACT

In this thesis, we considered an Ising system of N spins $\frac{1}{2}$ in coupling between them. This system is studied from the point of view of its global kinetic moment. For this, we presented the essential notions of compositions of kinetic moments such as observables and coupling states. The two representations of observables and states that are called coupled and decoupled bases have been explained. The decoupled base is formed by tensor extensions of the states and observables of the original moments, and the coupled base introduces a new total moment resulting from the coupled moments. The passage between the two bases is performed by calculating the "coordinates" of the coupled states in the decoupled base. This brings out what are known as Clebsch Gordan coefficients known by their properties. We have illustrated our problem by two examples: coupling of two moments of spins, and of three moments, then we make a generalization for a coupling of N spins.

Keywords: Ising system, kinetic moment, coupled bases, decoupled bases, Clebsch Gordan coefficients