Le modèle d'Ising

Julien BOYER et Olivier MOHSEN

19 janvier 2002

Sujet proposé par Philippe BIANE

1 Introduction

Le modèle d'Ising a été introduit dans les années 20, afin de modéliser de façon simple certains phénomènes physiques, comme l'aimantation, ou les interactions entre particules dans un mélange de deux phases liquides. Sa description est simple : il s'agit d'un réseau $\mathbb{Z}^2$, avec en chaque site (i, j) de ce réseau un spin σ_i^j égal à $+1$ ou -1. D'abord on va supposer ce réseau fini et rectangulaire, de taille $n \times m$ et pour simplifier les calculs on va «recoller» les bords du rectangle (on identifie les sites $(1, j)$ avec $(n+1, j)$ et les sites $(i, 1)$ avec $(i, m+1)$).

On veux traduire le fait que 2 spins voisins ont tendance à avoir la même valeur. Pour cela on définit une énergie pour chaque configuration σ :

$$E(\sigma) = -\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sigma_i^j\sigma_{i+1}^j - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sigma_i^j\sigma_i^{j+1}$$

Par exemple, quand tous les spins sont alignés, l'énergie est plus petite, (la configuration est plus «stable»).

Selon les lois de la physique, la probabilité qu'on soit dans une certaine configuration σ est proportionnelle à la quantité $e^{-\beta E(\sigma)}$, où β est un facteur qui fait intervenir la température et la constante de Boltzman. Disons que β est «l'inverse de la température».

Comme la somme de toutes les probabilités pour chaque configuration possible doit valoir 1, la probabilité d'une configuration σ_0 est en fait :

$$P(\sigma_0) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E(\sigma_0)}$$

avec

$$Z = Z(\beta) = \sum_{\sigma} e^{-\beta E(\sigma)}$$

où σ parcours l'ensemble de toutes les configurations de spins possibles (2^{nm} configurations au total).

On appelle $Z(\beta)$ la fonction de partition. Elle est utile car elle sert à mettre en évidence un phénomène appelé «transition de phase» : il existe une température critique $\frac{1}{\beta_c}$ en dessous de laquelle les spins ont tendance à s'aligner, tandis qu'au-dessus de cette température les spins sont orientés de façon plus chaotique.

Ici, le but est de calculer la fonction de partition $Z(\beta)$.

Il est commode d'identifier une configuration σ (une attribution de $+1$ ou de -1 pour $n \times m$ spins), avec m parties de «pile ou face» à n lancers. Pour une partie ω, on note $\omega(j)$ le résultat du j-ième lancer. On identifie bien sûr, σ avec $(\omega_1, \dots, \omega_m)$ tel que

$$\sigma_i^j = \omega_j(i) \qquad \forall i = 1, \dots, n, \; j = 1, \dots, m$$

Ainsi, la fonction de partition s'écrit :

$$Z(\beta) = \sum_{\omega_1, \dots, \omega_m} e^{\beta \sum_{i,j} \omega_j(i)\omega_j(i+1) + \beta \sum_{i,j} \omega_j(i)\omega_{j+1}(i)}$$

2 Calcul de valeurs propres

2.1 La matrice de transfert

On introduit Γ : le $\mathbb{C}$-espace vectoriel de dimension 2^n avec une base $(e_\omega)_\omega$, indexée par les parties de «pile ou face» à n lancers.

En remplaçant formellement les «e_ω» par les «$e_+ \otimes e_- \otimes \dots \otimes e_+$» ($\leftarrow$ avec n symboles successifs e_+ ou e_- correspondant aux n résultats de la partie ω), on voit en fait que $\Gamma = (\mathbb{C}^2)^{\otimes n}$ avec (e_+, e_-) qui est une base de $\mathbb{C}^2$.

On va écrire que Z est la trace d'une matrice agissant sur Γ (une matrice $2^n \times 2^n$, avec des lignes et des colonnes indexées par les parties de «pile ou face» à n lancers) : après avoir remarqué que pour toute matrice $A = (a_{i,k})_{i,k}$, on a :

$$Tr(A^m) = \sum_{i_1, \dots, i_m} \prod_{j=1}^{m} a_{i_j, i_{j+1}},$$

ceci avec la convention $i_{m+1} = i_1$. Il apparait alors que (toujours avec la convention $\omega_{m+1} = \omega_1$

$$Z = \sum_{\omega_1, \dots, \omega_m} \prod_{j=1}^{m} e^{\beta \sum_i \beta \sum_i \omega_j(i)\omega_{j+1}(i) + \omega_{j+1}(i)\omega_{j+1}(i+1)} = Tr(T^m)$$

avec $T = (t_{\omega,\omega'})_{\omega,\omega'}$, et $t_{\omega,\omega'} = e^{\beta \sum_i \omega(i)\omega'(i) + \beta \sum_i \omega'(i)\omega'(i+1)}$

On appelle T la matrice de transfert. Ainsi, le calcul de Z passe par le calcul des 2^n valeurs propres de T, qu'on note $(\xi_\alpha)_{\alpha=1,\dots,2^n}$. On a $Z = \sum_\alpha \xi_\alpha^m$.

On va définir deux matrices A et B telles que $T = AB$, où $A = (a_{\omega,\omega'})_{\omega,\omega'}$, avec $a_{\omega,\omega'} = e^{\beta \sum_i \omega(i)\omega'(i)}$ et $B = (b_{\omega,\omega'})_{\omega,\omega'}$, avec $b_{\omega,\omega'} = \delta_{\omega,\omega'} e^{\beta \sum_i \omega'(i)\omega'(i+1)}$ (A est une matrice symétrique, B est une matrice diagonale).

2.2 Les matrices de Pauli

On exprime A et B à l'aide des trois matrices de Pauli qu'on définit de la manière suivante :

$$x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

On a les relations $x^2 = I$, $y^2 = I$, $z^2 = I$ et $xy = iz$. De plus elles anticommutent deux à deux.

Comme elles agissent sur l'espace $\mathbb{C}^2$, on peut les faire agir sur chacun des n sites du produit tensoriel en définissant les opérateurs $(x_j)_{j=1,\ldots,n}$, $(y_j)_{j=1,\ldots,n}$ et $(z_j)_{j=1,\ldots,n}$ qui agissent sur Γ de la façon suivante :

$$x_j = I \otimes \ldots I \otimes x \otimes I \ldots \otimes I$$

(ci-dessus, le x est à la j-ième place), et de même pour les opérateurs y_j et les z_j.

Il vient alors :

$$B = e^{\beta \sum_j z_j z_{j+1}}.$$

Pour A, on vérifie facilement que $A = W \otimes \ldots \otimes W$, où W est un opérateur sur $\mathbb{C}^2$ définit comme ceci :

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta} & e^{-\beta} \\ e^{-\beta} & e^{\beta} \end{pmatrix}.$$

En remarquant qu'on a les égalités

$$\rho e^{\alpha x} = \begin{pmatrix} \rho \cosh \alpha & \rho \sinh \alpha \\ \rho \sinh \alpha & \rho \cosh \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta} & e^{-\beta} \\ e^{-\beta} & e^{\beta} \end{pmatrix} = W$$

à condition de prendre α et ρ tel que $\tanh \alpha = e^{-2\beta}$ et $\rho = (2 \sinh 2\beta)^{1/2}$, Il vient

$$A = \rho^n e^{\alpha \sum_j x_j}.$$

On va pour l'instant «oublier» le facteur ρ^n pour ne pas s'encombrer. On va aussi échanger les rôles de x et de z pour des raisons de commodité dans ce qui va suivre. (on peut vérifier facilement que cet échange de x et de z revient à conjuger les matrices par un automorphisme de Γ et donc cela ne va pas changer les valeurs propres)

On aura donc

$$A = e^{\alpha \sum_{j=1}^{n} z_j}, B = e^{\beta \sum_{j=1}^{n} x_j x_{j+1}}$$

On voit déja que β et α ont des rôles un peu semblable, alors qu'on a la relation $\tanh \alpha = e^{-2\beta}$. On définira plus tard la «température critique» comme la valeur de β qui réalise $\beta = \alpha$.

Remarquons dès maintenant que les valeurs propres de T $(= AB)$ sont réelles. En effet, A et B sont symétriques inversibles, et les valeurs propres de AB sont les mêmes que celles de $A^{\frac{1}{2}} B A^{\frac{1}{2}}$, et cette dernière matrice est réelle symétrique, donc à valeurs propres réelles.

2.3 La transformation de Jordan-Wigner

On introduit les $2n$ matrices $(X_j)_{j=1,\ldots,n}$ et $(Y_j)_{j=1,\ldots,n}$, qui agissent sur Γ ainsi :

$$X_j = z \otimes \ldots \otimes z \otimes x \otimes I \otimes \ldots \otimes I$$
$$Y_j = z \otimes \ldots \otimes z \otimes y \otimes I \otimes \ldots \otimes I$$

(ci-dessus, le x et le y apparaissent en j-ième position)

Ces matrices anticommutent entre elles et leur carré vaut l'identité. En remarquant que pour tout $j = 1, \ldots, n$ on a $X_j Y_j = i z_j$, on peut alors écrire

$$A = e^{-i\alpha \sum_j X_j Y_j}.$$

De même on a pour tout $j = 1, \dots, n-1$ les relations $Y_1 X_2 = i x_j x_{j+1}$, on est donc tenté d'écrire

$$B = e^{-i\beta \sum_{j=1}^{n} Y_j X_{j+1}}.$$

Le problème est que cette écriture est fausse (dommage !) car pour $j = n$ on a $Y_n X_1 = iy \otimes z \otimes \dots \otimes z \otimes y \neq i x_n x_1$

Mais bon tant pis ! On va quand même faire comme si c'était juste. On pourrait vérifier que le comportement asymptotique de Z quand n et m sont grands n'est pas modifié. (pour se consoler, on peut quand même remarquer ceci : Si on introduit P, l'opérateur de parité, défini par $P = z \otimes z \dots \otimes z$, on a alors $Y_n X_1 (-P) = i x_n x_1$ et donc on a bien $Y_n X_1 = i x_n x_1$ à condition qu'on se restreigne au sous-espace propre de P associé à la valeur propre -1, qu'on note Γ_-. En fait Γ_- est le sous-espace de Γ de dimension 2^{n-1} engendré par les $e_\pm \otimes \dots \otimes e_\pm$ où les symboles e_- n'apparaissent un nombre impair de fois. Et comme Γ_- est stable par les opérateurs z_j et par les opérateurs $x_j x_{j+1}$, alors il est aussi stable par AB. Par conséquent, parmi les 2^n valeurs propres que l'on va trouver pour T $(= AB)$ en utilisant la «fausse» matrice B, il y en aura quand même 2^{n-1} (i.e. la moitié) de correctes, donc c'est pas trop mal. Pour plus de rigueur, on pourra consulter [1] ou [2].)

2.4 Les matrices de spin

Ici, on va voir comment certaines matrices, appelées «matrices de spin», peuvent être associées à d'autres opérateurs, plus simples, et qu'il existe des liens entre les valeurs propres d'une matrice de spin et celles de l'opérateur qui lui est associée. Après on pourra appliquer cela à notre matrice $T = AB$.

On définit le «premier chaos» C_1 comme l'ensemble des combinaisons linéaires des $2n$ matrices définies plus haut $(X_j)_j = 1, \dots, n$ et $(Y_j)_j = 1, \dots, n$. Le premier chaos C_1 est donc un sous-espace de l'ensemble des opérateurs sur Γ, de dimension $2n$.

Comme les $(X_j)_{j=1,\dots,n}$ et les $(Y_j)_{j=1,\dots,n}$ anticommutent, et leur carré vaut l'identité, alors pour tout U et V, éléments de C_1, la quantité $UV + VU$ est un opérateur scalaire. On peut donc définir une forme bilinéaire symétrique $(.,.)$, sur C_1 : pour tout U et V éléments de C_1, (U, V) est tel que

$$\frac{1}{2}(UV + VU) = (U, V)I$$

(Attention, c'est une forme bilinéaire symétrique complexe, pas une forme hermitienne).

Pour tout opérateur inversible R sur Γ, on peut considérer l'automorphisme intérieur $I(R) = R^{-1} \bullet R$ sur $End(\Gamma)$ (les endomorphismes de Γ). On dira que R appartient au «groupe de Clifford» G lorsque $I(R)$ préserve le premier chaos C_1, et on note alors $O(R)$ l'opérateur induit par $I(R)$ sur C_1.

Il est immédiat de constater que tous les opérateurs sur C_1 de la forme $O(R)$, où R appartient à G sont des opérateur orthogonaux (i.e qui préservent la forme $(.,.)$). On a même plus : tous les opérateurs orthogonaux sur C_1 peuvent s'écrire sous la forme $O(R)$ (i.e. le morphisme de groupe $R \longmapsto R^{-1} \bullet R$ de G dans le groupe des opérateurs orthogonaux sur C_1 est surjectif). En effet, soit γ_1 dans C_1, tel que $\gamma_1^2 = I$ (i.e. $(\gamma_1, \gamma_1) = 1$), on dira qu'une telle matrice est une matrice de Dirac. On peut la considérer comme premier élément d'une base $(\gamma_j)_{j=1..2n}$

de C_1, orthonormale pour $(.,.)$. Cela revient à dire que tous les γ_j sont des matrices de Dirac, et qu'elles anticommutent entre elles. Alors γ_1 appartient au groupe de Clifford G et on a

$$\begin{array}{rccl} O(\gamma_1): & C_1 & \longmapsto & C_1 \\ & \gamma_1 & \longmapsto & \gamma_1 \\ & \gamma_j & \longmapsto & \gamma_1\gamma_j\gamma_1 = -\gamma_j \quad \forall j \neq 1 \end{array}$$

Il apparaît que $O(\gamma_1) = -S_{\gamma_1}$, où S_{γ_1} est la symétrie par rapport à l'hyperplan orthogonal à γ_1. Et comme les $-S$ (où S est une symétrie) engendrent l'espace des opérateurs orthogonaux sur C_1, alors tous les opérateurs orthogonaux sur C_1 peuvent bien s'écrire comme des $O(R)$.

Aussi, comme l'algèbre des opérateurs sur Γ est engendrée par C_1, il en découle que si $O(R) = I$, alors $I(R) = I$, i.e. R est un opérateur scalaire. Ainsi, si on connaît $O(R)$, on connaît R à un scalaire multiplicatif près. Cette ambiguité avec ce scalaire multiplicatif est embêtante, car a priori, on ne va pas pouvoir faire mieux que de déduire les valeurs propres de R à partir de celles de $O(R)$ «à un scalaire multiplicatif près». On va quand même s'en sortir en imposant la condition $\det R = 1$ (ce sera le cas quand on prendra $R = AB$). Ainsi, R sera déterminé à un «scalaire multiplicatif racine 2^n-ième» près, et comme on sait que les valeurs propres de AB sont réelles, alors il suffira juste de choisir la racine 2^n-ième qui fait que les valeurs propres qu'on aura trouvées soient réelles. (en fait, l'application $R \longrightarrow O(R)$ qui va de $\{R \in G | \det R = 1\}$ dans l'espace des opérateurs orthogonaux sur C_1 est un revêtement à 2^n feuillets)

Pour toute matrice R dans le groupe de Clifford G, véfifiant $\det R = 1$, nous dirons que R est «la» matrice de spin associée à l'opérateur orthogonal $O(R)$ sur C_1, même s'il y a une ambiguité sur le choix de R. remarquons que si R_1, et R_2 sont des matrices de spin, alors R_1R_2 est une matrice de spin, et $O(R_1R_2) = O(R_1)O(R_2)$.

2.5 Valeurs propres d'une matrice de spin

On note $\gamma_j = X_j$ pour $j = 1, \dots, n$, et $\gamma_{n+j} = Y_j$ pour $j = 1, \dots, n$. Ainsi, $(\gamma_j)_{j=1,\dots,2n}$ est une base orthonormale de C_1.

une matrice de spin $R = e^{\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l}$: Soit $\gamma_k\gamma_l$ le produit de 2 éléments distincts de la base. Considérons $R = e^{\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l}$ où θ est un nombre complexe (on va voir que R est une matrice de spin). En fait, comme $(\gamma_k\gamma_l)^2 = -I$, on a

$$R = \cos\frac{\theta}{2}I + \sin\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l$$

et

$$R^{-1} = e^{-\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l} = \cos\frac{\theta}{2}I - \sin\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l.$$

Pour tout H appartenant à C_1, on a

$$R^{-1}HR = \cos^2\frac{\theta}{2}H - \sin^2\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l H\gamma_k\gamma_l + \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}(H\gamma_k\gamma_l - \gamma_k\gamma_l H).$$

Prenons pour H une matrice γ_j, distincte de γ_k et de γ_l, on voit que γ_j commute avec $\gamma_k\gamma_l$ (en effet $\gamma_j(\gamma_k\gamma_l) = -\gamma_k\gamma_j\gamma_l = (\gamma_k\gamma_l)\gamma_j$). On a donc

$$O(R)(\gamma_j) = R^{-1}\gamma_j R = \gamma_j$$

tandis que si on prend pour H les matrices γ_k et γ_l on trouve

$$O(R)(\gamma_k) = R^{-1}\gamma_k R = \cos\theta\gamma_k + \sin\theta\gamma_l$$

$$O(R)(\gamma_l) = R^{-1}\gamma_l R = \cos\theta\gamma_l - \sin\theta\gamma_k$$

On voit donc que le premier chaos est préservé, donc R est bien dans le groupe de Clifford. On peut maintenant calculer les valeurs propres de R et de $O(R)$, et les comparer.

On vient de mettre en évidence que $O(R)$ est une rotation plane d'angle complexe θ dans le plan engendré par γ_k et γ_l, et ses valeurs propres sont donc $e^{i\theta}$, $e^{-i\theta}$ et 1 (la valeur propre 1 a pour multuplicité $2n-2$).

Les valeurs propre de $R = e^{\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l}$ vont s'obtenir à partir celles de $\gamma_k\gamma_l$, car $\gamma_k\gamma_l$ est diagonalisable, avec pour valeurs propres i et $-i$ avec multiplicité 2^{n-1} chacune. Ca se voit tout de suite dans le cas $\gamma_k = X_1$ et $\gamma_l = Y_1$, car $X_1Y_1 = iz \otimes I \otimes \ldots \otimes I = iz_1$, et cet opérateur sur Γ envoie un élement de la forme $e_\pm \otimes \ldots \otimes e_\pm$ sur i fois lui-même si il y a un e_+ en première place et sur $-i$ fois lui-même si il y a un e_- en première place, il est donc bien de la forme annoncée. Dans le cas général, on peut se ramener à ce cas en considérant un opérateur orthogonal sur C_1 qui envoie γ_k sur X_1 et γ_l sur Y_1. Cet opérateur peut s'écrire sous la forme $O(Q)$, via la surjectivité de $R \longmapsto O(R) = R^{-1} \bullet R$ établie plus haut. Ainsi on a

$$Q^{-1}\gamma_k\gamma_l Q = Q^{-1}\gamma_k Q Q^{-1}\gamma_l Q = X_1Y_1$$

et donc $\gamma_k\gamma_l$ est lui aussi diagonalisable avec pour valeurs propres i et $-i$ avec des multiplicités 2^{n-1}. On en déduit que les valeurs propres de $R = e^{\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l}$ sont $e^{i\frac{\theta}{2}}$ et $e^{-i\frac{\theta}{2}}$ avec des multiplicité 2^{n-1}. (c'est seulement maintenant qu'on voit que $\det R = 1$, donc R est bien une matrice de spin selon la convention définie plus haut).

une matrice de spin $R = e^{\sum_{k=1}^{n}\frac{\theta_k}{2}X_kY_k}$ **:** On considère cette fois $R = e^{\sum_{k=1}^{n}\frac{\theta_k}{2}X_kY_k}$, avec les θ_k complexes (notons que les $(X_kY_k)_{k=1,\ldots,n}$ commutent donc on a le droit de transformer l'exponentielle de la somme en produits d'exponentielles) . R est une matrice de spin car c'est le produit de n matrice de la forme $e^{\frac{\theta}{2}\gamma_k\gamma_l}$ vue au dessus.(Ce même argument permet d'affirmer dès maintenant que AB est une matrice de spin, via les écritures $A = e^{-i\alpha\sum_{j=1}^{n}X_jY_j}$ et $B = e^{-i\beta\sum_{j=1}^{n}Y_jXj+1}$, même si ce n'est pas l'objet de ce paragraphe).

Cette fois on a

$$O(R) = O(e^{\frac{\theta_1}{2}X_1Y_1})O(e^{\frac{\theta_2}{2}X_2Y_2})\ldots O(e^{\frac{\theta_n}{2}X_nY_n})$$

donc O(R) est un produit de n rotations (c.f. le paragraphe précédent) dans n plans orthogonaux, ce qui fait que les $2n$ valeurs propres de $O(R)$ sont les nombres

$$e^{i\theta_1}, e^{-i\theta_1}, e^{i\theta_2}, e^{-i\theta_2}, \ldots, e^{i\theta_n}, e^{-i\theta_n}$$

il est à noter que chacune des n rotations fournit 2 valeurs propres, inverses l'une de l'autre.

Pour calculer les valeurs propres de $R = e^{\sum_{k=1}^{n}\frac{\theta_k}{2}X_kY_k}$, on va réécrire

$$R = e^{\frac{\theta_1}{2}X_1Y_1}e^{\frac{\theta_2}{2}X_2Y_2}\ldots e^{\frac{\theta_n}{2}X_nY_n}$$

Pour $k \in 1..n$, on a en fait $X_kY_k = iz_k$, donc l'opérateur $e^{\frac{\theta_k}{2}X_kY_k}$ peut s'écrire

$$\begin{array}{llll} e^{i\frac{\theta_k}{2}z_k}: & \Gamma & \longmapsto & \Gamma \\ & a_1 \otimes \ldots \otimes a_{k-1} \otimes e_+ \otimes a_{k+1} \ldots \otimes a_n & \longmapsto & e^{i\frac{\theta_k}{2}} a_1 \otimes \ldots \otimes a_{k-1} \otimes e_+ \otimes a_{k+1} \ldots \otimes a_n \\ & a_1 \otimes \ldots \otimes a_{k-1} \otimes e_- \otimes a_{k+1} \ldots \otimes a_n & \longmapsto & e^{-i\frac{\theta_k}{2}} a_1 \otimes \ldots \otimes a_{k-1} \otimes e_- \otimes a_{k+1} \ldots \otimes a_n \end{array}$$

ceci pour tout $a_1, \ldots, a_{k-1}, a_{k+1}, \ldots, a_n$ dans $\mathbb{C}^2$. Ainsi l'opérateur R est diagonal dans la base des $(e_\pm \otimes \ldots \otimes e_\pm)$, et un vecteur $e_\pm \otimes \ldots \otimes e_\pm$ est propre pour la valeur propre

$$e^{\pm i\frac{\theta_1}{2}} e^{\pm i\frac{\theta_2}{2}} \ldots e^{\pm i\frac{\theta_n}{2}}$$

avec la même suite de $+$ et de $-$ que dans l'écriture du vecteur propre.

On constate alors que

$$\chi_1, \chi_1^{-1}, \chi_2, \chi_2^{-1}, \ldots, \chi_n, \chi_n^{-1}$$

sont les $2n$ valeurs propres de $O(R)$ (avec χ_k qui désigne l'une des deux valeurs propres (inverse l'une de l'autre) de la k-ième rotation dans $O(R)$) , tandis que

$$(\chi_1^{\pm 1} \ldots \chi_n^{\pm 1})^{1/2}$$

sont les 2^n valeurs propres de R. Ces relations semblent permettre de déduire à partir des valeurs propres d'un opérateur orthogonal sur C_1 les valeurs propres de «la» matrice de spin qui lui est associée (plus rigoureusement, il faudrait dire «de l'une des 2^n matrice qui lui sont associées»). Seulement elles ne sont pas forcément vraies dans n'importe quel cas. il nous faut montrer que ces relations sont encore valables dans le cas $R = AB$.

une matrice de spin dans un cas plus général : On va étendre les résultats ci-dessus dans le cas où $O(R)$ est un produit de n rotations dans n plans orthogonaux de C_1, mais cette fois-ci, les n plans ne sont pas forcément les $(X_1, Y_1) \ldots (X_n, Y_n)$, et on ne suppose plus rien sur R, si ce n'est que c'est une matrice de spin ($\det R = 1$) (on verra plus tard que ce cas peut s'appliquer à $O(A^{1/2}BA^{1/2})$, ce qui sera satisfaisant car $A^{1/2}BA^{1/2}$ et AB ont les mêmes valeurs propres : celles qu'on cherche).

On peut trouver une base orthonormale $(\gamma_1, \gamma_1'), \ldots, (\gamma_n, \gamma_n')$ adaptée aux n plans des n rotations de $O(R)$, et désignons par θ_k l'angle (complexe) de la k-ième rotation. On a toujours le fait que les $2n$ valeurs propres de $O(R)$ sont les nombres

$$e^{i\theta_1}, e^{-i\theta_1}, e^{i\theta_2}, e^{-i\theta_2}, ..., e^{i\theta_n}, e^{-i\theta_n}$$

En considérant l'opérateur orthogonal sur C_1 qui envoie γ_1 sur X_1, γ_2 sur X_2,... etc et γ_1' sur Y_1, γ_2' sur Y_2,... etc, on sait que cet opérateur peut s'écrire sous la forme $O(Q)$, via la surjectivité de $R \longmapsto O(R) = R^{-1} \bullet R$ établie plus haut. L'opérateur $O(Q)O(R)O(Q)^{-1}$ $(= O(QRQ^{-1}))$ est toujours produit de n rotations dans n plans orthogonaux, avec les mêmes angles de rotation que O(R), mais cette fois les plans de rotation sont les (X_1, Y_1), ... ,(X_n, Y_n). On retombe bien sur ce qu'on a vu plus haut : on sait que cet opérateur s'écrit $O(e^{\sum_{k=1}^n \frac{\theta_k}{2}X_kY_k})$ on a donc

$$O(QRQ^{-1}) = O(e^{\sum_{k=1}^n \frac{\theta_k}{2}X_kY_k})$$

et

$$QRQ^{-1} = e^{\sum_{k=1}^{n} \frac{\theta_k}{2} X_k Y_k}$$

$$R = Q^{-1} e^{\sum_{k=1}^{n} \frac{\theta_k}{2} X_k Y_k} Q$$

(ces deux dernière égalité ne sont valable que quitte à remplacer R par ρR, avec ρ racine 2^n-ième de l'unité, ceci à cause de l'ambiguité sur les matrices de spin).

Ainsi, si on pose $\chi_k = e^{i\frac{\theta_k}{2}}$ pour $k = 1, \ldots, n$, on peut encore écrire (quitte à remplacer R par ρR) que les 2^n racines de R sont les

$$(\chi_1^{\pm 1} \ldots \chi_n^{\pm 1})^{1/2}$$

obtenues à partir de $\chi_1, \chi_1^{-1}, \chi_2, \chi_2^{-1}, \ldots, \chi_n, \chi_n^{-1}$, les $2n$ racines de $O(R)$.

2.6 Application aux valeurs propres de la matrice de transfert T

On va appliquer ce qui précède à $A^{1/2}BA^{1/2}$ (qui a les mêmes valeurs propres que T). Pour ça, on doit d'abord montrer que $O(A^{1/2}BA^{1/2})$ est un produit de n rotations dans n plans orthogonaux, et ensuite on pourra calculer ses valeurs propres, et en déduire celles de T. Mais en fait, on a tout de suite besoin de connaitre les valeurs propres de $O(A^{1/2}BA^{1/2})$ afin d'établir sa décomposition en n rotations dans des plans orthogonaux.

écriture de $O(A^{1/2})$: De $A = e^{-i\alpha \sum_k X_j Y_k}$, on tire $A^{1/2} = e^{-i\frac{\alpha}{2} \sum_k X_j Y_k}$ et $O(A^{1/2}) = O(e^{-i\frac{\alpha}{2} \sum_k X_j Y_k})$. On a vu plus haut comment ce genre d'opérateur s'écrivait dans la base des $(X_1, Y_1, X_2, Y_2, ..., X_n, Y_n)$ (ici les θ_k valent tous $-i\alpha$, et on a $\cos(-i\alpha) = \cosh \alpha$ et $\sin(-i\alpha) = -i \sinh \alpha$)

$$O(A^{1/2}) = \begin{pmatrix} \cosh\alpha & -i\sinh\alpha & 0 & 0 & \ldots & \ldots & 0 & 0 \\ i\sinh i\alpha & \cosh\alpha & 0 & 0 & \ldots & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cosh\alpha & -i\sinh\alpha & \ldots & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sinh\alpha & \cosh\alpha & \ldots & \ldots & 0 & 0 \\ . & . & . & . & \ldots & \ldots & . & . \\ . & . & . & . & \ldots & \ldots & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \ldots & \cosh\alpha & -i\sinh\alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \ldots & i\sinh\alpha & \cosh\alpha \end{pmatrix}$$

$O(A^{1/2})$ est diagonale par bloc :

$$O(A^{1/2}) = \begin{pmatrix} a & 0 & \ldots & O \\ 0 & a & \ldots & O \\ . & . & \ldots & . \\ 0 & 0 & \ldots & a \end{pmatrix} \text{ avec } a = \begin{pmatrix} \cosh\alpha & -i\sinh\alpha \\ i\sinh i\alpha & \cosh\alpha \end{pmatrix}$$

écriture de $O(B)$: On procède de même pour $O(B)$. A partir de $B = e^{-i\beta \sum_{k=1}^{n} Y_k X k+1}$, on a $O(B) = O(e^{-i\beta \sum_{k=1}^{n} Y_k X k+1})$ (ici, c'est 2β qui joue les rôles des θ_k)

$$O(B)=\begin{pmatrix}\cosh 2\beta & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & i\sinh 2\beta\\ 0 & \cosh 2\beta & -i\sinh 2\beta & \dots & \dots & 0 & 0 & 0\\ 0 & i\sinh 2\beta & \cosh 2\beta & \dots & \dots & 0 & 0 & 0\\ . & . & . & \dots & \dots & . & . & .\\ . & . & . & \dots & \dots & . & . & .\\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \cosh 2\beta & -i\sinh 2\beta & 0\\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & i\sinh 2\beta & \cosh 2\beta & 0\\ -i\sinh 2\beta & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & \cosh 2\beta\end{pmatrix}$$

$O(B)$ s'écrit ausii par bloc : $O(B)=\begin{pmatrix} b & c^* & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & c\\ c & b & c^* & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0\\ 0 & c & b & c^* & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0\\ . & . & . & \dots & \dots & \dots & \dots & . & . & .\\ . & . & . & \dots & \dots & \dots & \dots & . & . & .\\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & c & b & c^* & 0\\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & c & b & c^*\\ c^* & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & c & b\end{pmatrix}$

avec $b=\begin{pmatrix}\cosh 2\beta & 0\\ 0 & \cosh 2\beta\end{pmatrix}$ et $c=\begin{pmatrix}0 & i\sinh 2\beta\\ 0 & 0\end{pmatrix}$

écriture et valeurs propres de $O(A^{1/2}BA^{1/2})$: le fait qu'on ait $O(A^{1/2})$ diagonal par bloc rend le produit de matrice facile à effectuer :

$$O(A^{1/2}BA^{1/2})=\begin{pmatrix} u & v^* & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & v\\ v & u & v^* & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0\\ 0 & v & u & v^* & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0\\ . & . & . & \dots & \dots & \dots & \dots & . & . & .\\ . & . & . & \dots & \dots & \dots & \dots & . & . & .\\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & v & u & v^* & 0\\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & v & u & v^*\\ v^* & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & v & u\end{pmatrix}$$

avec $u=aba$, $v=aca$, et $v^*=ac^*a=(aca)^*$.

après calculs, on obtient

$$u=\cosh 2\beta\begin{pmatrix}\cosh 2\alpha & -i\sinh 2\alpha\\ i\sinh 2\alpha & \cosh 2\alpha\end{pmatrix},$$

$$v=-\sinh 2\beta\begin{pmatrix}\sinh\alpha\cosh\alpha & -i\cosh^2\alpha\\ i\sinh^2\alpha & \sinh\alpha\cosh\alpha\end{pmatrix}.$$

On a affaire à une matrice *cyclique* de matrice 2×2. Il n'est pas difficile d'établir les valeurs propres et les vecteurs propres d'une telle matrice : soit $\epsilon_k=e^{ik\frac{2\pi}{n}}$ une racine n-ième de l'unité. Considerons la matrice $M_k=u+\epsilon_k v+\epsilon_k^{n-1}v^*$ et supposons qu'on arrive à lui trouver 2 valeurs propres χ_k et χ'_k et les 2 vecteurs propres associés $g_k=\begin{pmatrix}g_{k,1}\\ g_{k,2}\end{pmatrix}$ et $g'_k=\begin{pmatrix}g'_{k,1}\\ g'_{k,2}\end{pmatrix}$. Alors peut vérifier que $h_k = \begin{pmatrix} g_k \\ \epsilon_k g_k \\ \epsilon_k^2 g_k \\ . \\ . \\ \epsilon_k^{n-1} g_k \end{pmatrix}$ et $h'_k = \begin{pmatrix} g'_k \\ \epsilon_k g'_k \\ \epsilon_k^2 g'_k \\ . \\ . \\ \epsilon_k^{n-1} g'_k \end{pmatrix}$ sont des vecteurs propres pour $O(A^{1/2}BA^{1/2})$ associés au valeurs propres χ_k et χ'_k.

Il s'agit donc de calculer les valeurs propres et les vecteurs propres des n matrices M_k, ($k = 0, \ldots, n-1$). (On va faire des gros calculs !) On a

$$M_k = \begin{pmatrix} \lambda_k & \mu_k \\ \mu_k^* & \lambda_k \end{pmatrix}$$

avec

$$\lambda_k = \cosh 2\alpha \cosh 2\beta - \cos(k\frac{2\pi}{n}) \sinh 2\alpha \sinh 2\beta,$$

$$\mu_k = -\sin(k\frac{2\pi}{n}) \sinh 2\beta - i \cosh 2\beta \sinh 2\alpha + i \cos(k\frac{2\pi}{n}) \sinh 2\beta \cosh 2\alpha.$$

D'accord, l'expression de μ_k n'est pas très avenante, mais si on fait le calcul, on trouve $\det M_k = 1$, ce qui facilite les choses : on en déduit que les valeurs propres χ_k et χ'_k sont les racines (inverses l'une de l'autre) de

$$X^2 - 2\lambda_k + 1 = 0$$

et donc on a

$$\chi_k = \lambda_k + \sqrt{\lambda_k^2 - 1},$$
$$\chi'_k = \lambda_k - \sqrt{\lambda_k^2 - 1}.$$

On doit aussi chercher les vecteurs propres g_k et g'_k : $g_k = \begin{pmatrix} g_{k,1} \\ g_{k,2} \end{pmatrix}$ doit véfifier la relation

$$g_{k,1}(-\sqrt{\lambda_k^2 - 1}) + g_{k,2}\mu_k = 0$$

donc on peut prendre par exemple

$$g_k = \begin{pmatrix} \mu_k \\ \sqrt{\lambda_k^2 - 1} \end{pmatrix}.$$

De la même manière on prendra

$$g'_k = \begin{pmatrix} -\mu_k \\ \sqrt{\lambda_k^2 - 1} \end{pmatrix}.$$

On a donc trouvé les $2n$ valeurs propres et on peut sait maintenant écrire les $2n$ vecteurs propres de $O(A^{1/2}BA^{1/2})$ h_k et h'_k (pour $k = 0, \ldots, n-1$)

$$h_k = \begin{pmatrix} g_k \\ \epsilon_k g_k \\ \epsilon_k^2 g_k \\ . \\ . \\ \epsilon_k^{n-1} g_k \end{pmatrix}$$

$$h'_k = \begin{pmatrix} g'_k \\ \epsilon_k g'_k \\ \epsilon_k^2 g'_k \\ . \\ . \\ \epsilon_k^{n-1} g'_k \end{pmatrix}$$

Il reste maintenant à mettre en évidence que $O(A^{1/2}BA^{1/2})$ se décompose en n rotations dans n plans orthogonaux. On se souvient que les 2 valeurs propres d'une rotation sont inverses l'une de l'autre, et justement on a ici pour tout $k = 0, \dots, n-1$ (et en identifiant les indices n et 0)

$$\chi_k = \chi_{n-k} = \frac{1}{\chi'_k} = \frac{1}{\chi'_{n-k}}$$

(c'est une conséquence du fait $\lambda_k = \lambda_{n-k}$)

L'opérateur $O(A^{1/2}BA^{1/2})$ se décompose en n rotations dans n plans les n plans orthogonaux suivants

$$(h_0, h'_0), (h_1, h'_{n-1}), (h_2, h'_{n-2}), \dots, (h_{n-1}, h'_1)$$

En effet h_k est orthogonal à tous les h_j et les h'_j dès que $j \neq n-k$, car en appliquant la forme bilinéraire, on peut faire apparaître le facteur $\sum_{l=0}^{n-1} \epsilon^{k+j} = 0$. Ensuite on vérifie que h_k et h_{n-k} sont aussi orthogonaux, et de même pour h'_k et h'_{n-k} : la forme bilinéaire appliquée à h_k et à h_{n-k} fait apparaître le facteur

$$\begin{aligned} g_{k,1}g_{n-k,1} + g_{k,2}g_{n-k,2} &= \mu_k\mu_{n-k} + \lambda_k^2 - 1 \\ &= \dots \\ &= 0 \end{aligned}$$

Donc on a bien justifié qu'on pouvait appliquer les relations établies précédemment pour calculer les valeurs propres de T. Ces valeurs propres sont les 2^n nombres

$$((\lambda_0 \pm \sqrt{\lambda_0^2 - 1})(\lambda_1 \pm \sqrt{\lambda_1^2 - 1}) \dots (\lambda_{n-1} \pm \sqrt{\lambda_{n-1}^2 - 1}))^{1/2}$$

On a affaire à des valeurs réelles positives. Notons les $(xi_\alpha)_{\alpha=1,\dots,2^n}$, et appelons ξ_{max} la plus grande d'entre elles. C'est bien sûr celle où tous les $\pm$ sont des $+$. Elle s'écrit

$$\begin{aligned} \xi_{max}^2 \quad = \textstyle\prod_{k=0}^{n-1} \quad & \cosh 2\alpha \cosh 2\beta - \cos(k\frac{2\pi}{n}) \sinh 2\alpha \sinh 2\beta \\ & + \sqrt{(\cosh 2\alpha \cosh 2\beta - \cos(k\frac{2\pi}{n}) \sinh 2\alpha \sinh 2\beta)^2 - 1} \end{aligned}$$

En fait, c'est la seule qui va avoir un rôle dans l'étude du comportement assymptotique de $Z(\beta) = \sum_\alpha \xi_\alpha^m$.

C'est le moment de remettre le ρ^n qu'on avait laissé de côté au début. On peut aussi remplacer les termes avec des α par des termes avec des β (rappel : on a la relation $\tanh\alpha = e^{-2\beta}$) :

$$\cosh 2\alpha = \cosh^2\alpha(1 + \tanh^2\alpha) = \frac{1 + \tanh^2\alpha}{1 - \tanh^2\alpha} = \frac{\cosh 2\beta}{\sinh 2\beta}$$

et

$$\sinh 2\alpha = 2\cosh^2\alpha\tanh\alpha = 2\frac{\tanh\alpha}{1-\tanh^2\alpha} = \frac{1}{\sinh 2\beta}$$

Donc ξ_{max} s'écrit,(en tenant compte du $\rho^n = (2\sinh 2\beta)^{n/2}$)

$$\begin{aligned}\xi_{max}^2 \quad &= 2^n \textstyle\prod_{k=0}^{n-1} \quad \cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos(k\frac{2\pi}{n})\\ &\qquad + \sqrt{(\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos(k\frac{2\pi}{n}))^2 - \sinh^2 2\beta}\end{aligned}$$

3 La limite quand n et m tendent vers l'infini

On a au départ l'expression

$$Z(\beta) = \sum_\sigma e^{\beta\sum_{i,j}\sigma_i^j\sigma_{i+1}^j + \beta\sum_{i.j}\sigma_i^j\sigma_i^{j+1}}$$

avec les indices i et j variant de 1 à n et de 1 à m. On s'attend donc à ce que la quantité $Z(\beta)$ soit de l'ordre de grandeur de e^{mn}. Pour cette raison, on va étudier le comportement de

$$F(\beta) = \lim_{m,n\to\infty}\frac{1}{mn}\ln Z(\beta)$$

cette quantité est appelée «énergie libre».

quand m tend vers l'infini : On voit que la contribution de ξ_{max} va écraser les contributions fournies par les autres valeurs propres

$$\frac{1}{mn}\ln Z(\beta) = \frac{1}{mn}\ln\sum_\alpha \xi_\alpha^m = \frac{1}{n}\ln\xi_{max} + \frac{1}{mn}\ln(1+\sum_{\xi_\alpha\neq\xi_{max}}(\frac{\xi_\alpha}{\xi_{max}})^m)$$

$$\lim_{m\to\infty}\frac{1}{mn}\ln Z(\beta) = \frac{1}{n}\ln\xi_{max}$$

quand n tend vers l'infini : La quantité $\frac{1}{n}\ln\xi_{max}$ va faire apparaître une somme de Riemann :

$$\begin{aligned}\frac{1}{n}\ln\xi_{max} \quad &= \quad \frac{1}{2n}\left(\ln 2^n + \ln\prod_{k=0}^{n-1}\left(\begin{array}{l}\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos(k\frac{2\pi}{n})\\ \qquad + \sqrt{(\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos(k\frac{2\pi}{n}))^2 - \sinh^2 2\beta}\end{array}\right)\right)\\ &= \quad \frac{\ln 2}{2} + \frac{1}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}\ln\left(\begin{array}{l}\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos(k\frac{2\pi}{n})\\ \qquad + \sqrt{(\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos(k\frac{2\pi}{n}))^2 - \sinh^2 2\beta}\end{array}\right)\end{aligned}$$

Par le théorème des sommes de Riemann, on trouve enfin

$$\begin{aligned}F(\beta) \quad &= \quad \lim_{m,n\to\infty}\frac{1}{mn}\ln Z(\beta)\\ &= \quad \frac{\ln 2}{2} + \frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\ln\left(\begin{array}{l}\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos\theta\\ \qquad + \sqrt{(\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta\cos\theta)^2 - \sinh^2 2\beta}\end{array}\right)\frac{d\theta}{2\pi}\end{aligned}$$

Voila, on est arrivé au bout de ce calcul. Ce résultat a été établi pour la première fois par Onsager en 1944. En 1949, Kaufman obtient ce résultat avec une méthode simplifiée, et c'est celle que nous venons de voir.

Il existe encore d'autres méthodes pour y parvenir. Dans certains livres, le résultat apparaît sous une écriture plus compacte :

$$F(\beta) = \ln 2 + \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta(\cos\theta_1 + \cos\theta_2)) \frac{d\theta_1 d\theta_2}{4\pi^2}$$

Avec un peu de travail sur les intégrales de fonctions analytiques, on arrive à se convaincre que les deux expressions sont égales. Ce travail est fait dans [3], p.86.

Il reste à mettre en application tous ces résultats, c'est-à-dire mettre en évidence la température critique et les phénomènes de transitions de phases du modèle d'Ising.

la température critique : Dans l'expression

$$F(\beta) = \ln 2 + \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta(\cos\theta_1 + \cos\theta_2)) \frac{d\theta_1 d\theta_2}{4\pi^2}$$

la quantité sous le ln doit être strictement positive (a priori). Et en effet, elle atteint son minimum pour $\theta_1 = 0$ et $\theta_2 = 0$ et ce minimum est :

$$\cosh^2 2\beta - 2\sinh 2\beta = (\sinh 2\beta - 1)^2$$

Il est bien strictement positif, sauf pour la valeur critique β_c qui vérifie

$$\sinh 2\beta_c = 1$$

En fait, la quantité $F(\beta_c)$ est quand même bien définie, mais si on pousse les calculs, on peux mettre en évidence que F cesse d'être analityque juste en la valeur β_c. C'est la particularité mathématique la plus remarquable de cette fonction «énergie libre». $\frac{1}{\beta_c}$ s'appelle la température critique et c'est au niveau de cette température que le modèle change sensiblement de comportement : en dessous de cette température, les spins ont fortement tendance à s'aligner, tandis qu'au-dessus les configurations sont plus désordonnées, et plus homogènes.

Références

[1] J. Azema, P.A. Meyer, M.Yor, *Séminaire de probabilité 25*, Springer, 1991.

[2] B. Kaufman, *Physical Review 76*, 1949.

[3] McCoy, Barry, Wu, Tai Tsun, *The two dimensional Ising model*, Harvard University Press, 1973.

[4] C. Itzykson, J.M. Drouffe, *Théorie statistique des champs*, InterEditions et Editions du CNRS, 1989.