

Direction des bibliothèques

AVIS

Ce document a été numérisé par la Division de la gestion des documents et des archives de l'Université de Montréal.

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

This document was digitized by the Records Management & Archives Division of Université de Montréal.

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal

**Un calcul algébrique détaillé de la fonction
de partition du modèle d'Ising bidimensionnel**

Francis Loranger

Département de physique
Faculté des arts et des sciences

Septembre 2007



Université de Montréal

Ce mémoire intitulé
*Un calcul algébrique détaillé de la fonction
de partition du modèle d'Ising bidimensionnel*

fut déposé le 20 septembre 2007 par
Francis Loranger

à la Faculté des études supérieures et postdoctorales en vue de l'obtention
du diplôme de Maîtrise ès sciences en physique

et évalué par un jury composé des personnes suivantes

Véronique Hussin

(présidente-rapporteuse)

Yvan Saint-Aubin

(directeur de recherche)

Richard MacKenzie

(membre du jury)

© Francis Loranger, 2007

Ce document est protégé par le droit d'auteur et distribué sous la licence publique Creative Commons. Sa reproduction et sa diffusion sont librement autorisées pourvu que le contenu n'en soit pas altéré, que la paternité de l'œuvre soit mentionnée explicitement et que cette distribution soit restreinte à des fins non commerciales. Le texte intégral de la licence peut être consulté à l'adresse suivante : <http://www.creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.5/ca/legalcode.fr>.

Il dépend de celui qui passe
Que je sois tombe ou trésor
Que je parle ou me taise
Ceci ne tient qu'à toi
Ami n'entre pas sans désir
— Paul Valéry, fronton du Palais de Chaillot

Résumé

Le modèle d'Ising fut proposé au début du XX^e siècle pour décrire les phénomènes magnétiques observés dans certains corps solides. Dans sa formulation bidimensionnelle, il constitue le système physique le plus simple qui subisse une transition de phases et dont les variables thermodynamiques puissent être exprimées analytiquement en termes de ses paramètres fondamentaux. De nos jours encore, il forme le fondement de la compréhension théorique de la transition de phases ferromagnétique.

Ce mémoire présente un calcul exact détaillé de la fonction de partition du modèle d'Ising bidimensionnel sur un réseau carré en l'absence de champ magnétique externe. En nous inspirant de l'approche algébrique de Lars Onsager, nous démontrons l'existence d'une transition de phases pour ce système et calculons sa température critique de même que ses variables thermodynamiques.

Mots-clés : physique mathématique, physique statistique, algèbre linéaire, modèle d'Ising, phénomènes magnétiques, ferromagnétisme, phénomènes critiques, transition de phases, fonction de partition, matrice de transfert

Abstract

The Ising model was introduced at the beginning of the 20th century to describe the magnetic phenomena observed in certain solid bodies. In its two-dimensional formulation, it constitutes the simplest physical system which undergoes a phase transition and whose thermodynamical variables may be analytically expressed in terms of its fundamental parameters. It still forms nowadays the foundation of the theoretical understanding of the ferromagnetic phase transition.

This thesis offers a detailed exact derivation of the partition function for the two-dimensional Ising model on a square lattice with a vanishing external magnetic field. Following Lars Onsager's algebraic approach, we prove the existence of a phase transition for this system and calculate its critical temperature as well as its thermodynamical variables.

Keywords : mathematical physics, statistical physics, linear algebra, Ising model, magnetic phenomena, ferromagnetism, critical phenomena, phase transition, partition function, transfer matrix

Table des matières

1	Énoncé du problème	1
1.1	Le contexte physique du modèle d'Ising	1
1.2	Définition mathématique du modèle d'Ising	4
1.2.1	Le modèle général	4
1.2.2	Le modèle bidimensionnel sur un réseau carré	7
1.3	Survol historique du problème	8
2	Définitions et résultats préalables	10
2.1	Rappels d'algèbre matricielle	10
2.2	Le produit tensoriel et l'exponentielle de matrices	12
2.3	Les matrices et tenseurs de spin de Pauli	15
3	Calcul algébrique de la fonction de partition	17
3.1	La notion de matrice de transfert	17
3.1.1	Définition générale	17
3.1.2	Cas particuliers et exemples	20
3.1.3	Interprétation géométrique	22
3.2	Calcul du spectre de la matrice de transfert	22
3.2.1	Expression de la fonction de partition en termes de la matrice de transfert	23
3.2.2	Formulation de la matrice de transfert en termes des tenseurs de Pauli	26
3.2.3	Interprétation physique des opérateurs de Pauli	31
3.2.4	Formulation de la matrice de transfert en termes des opérateurs de spin	33
3.2.5	Formulation de la matrice de transfert en termes des opérateurs de création et d'annihilation	37
3.2.6	Interprétation physique des opérateurs fermioniques	41
3.2.7	Formulation de la matrice de transfert en termes des opérateurs de propagation d'onde et de dénombrement	43
3.2.8	Interprétation physique des opérateurs de propagation d'onde	49
3.2.9	Représentation des opérateurs fermioniques dans l'espace des impulsions	50
3.2.10	Valeurs propres de la matrice de transfert	57
3.3	Évaluation de la fonction de partition	65
3.3.1	La fonction de partition exacte	65
3.3.2	La limite thermodynamique de la fonction de partition	67

4	La transition de phases	68
4.1	Les propriétés thermodynamiques du système	68
4.2	Le comportement du modèle au point critique	73
5	Synthèse	76
	Remerciements	83
	Bibliographie	84

Table des figures

1.1	L'alignement des spins sur des domaines mésoscopiques dans un matériau magnétique	2
1.2	Un exemple de transition de phases	3
1.3	Un réseau bidimensionnel quelconque	5
1.4	Les trois réseaux bidimensionnels réguliers	6
1.5	Une configuration des spins sur un réseau carré	7
1.6	Les conditions de périodicité appliquées au réseau carré	8
3.1	La rectification des réseaux triangulaire et hexagonal sur une maille carrée	18
3.2	L'interprétation géométrique de la matrice de transfert	22
3.3	L'action de l'opérateur de création de particules sur une unité de configuration du réseau	42
3.4	Le spectre de la matrice de transfert	64
3.5	La distribution des valeurs propres pour une température fixée	65
3.6	La fonction de partition exacte	66
4.1	Le comportement critique de l'énergie interne et de la chaleur spécifique	72

Chapitre 1

Énoncé du problème

Der Anfang ist der Anfang nur am Ende.
– Friedrich Wilhelm Joseph von Schelling

Ce chapitre présente d'abord le modèle d'Ising dans le contexte des phénomènes magnétiques qu'il décrit. Il donne ensuite sa définition mathématique dans le cadre général d'un réseau quelconque puis dans le cas particulier d'un réseau carré. Il offre enfin un survol des principales contributions à la résolution de ce problème marquant de la physique mathématique moderne.

1.1 Le contexte physique du modèle d'Ising

Le *modèle d'Ising* — parfois nommé *modèle de Lenz–Ising* — fut proposé au début du XX^e siècle pour décrire les phénomènes du ferromagnétisme et de l'antiferromagnétisme observés dans certains solides. Nous expliquons d'abord la nature physique de ces phénomènes.

En raison de la charge électrique portée par les électrons et les noyaux atomiques, la plupart des corps solides réagissent aux champs magnétiques. Un matériau *paramagnétique* se distingue par la grandeur de cette réaction : les moments dipolaires magnétiques de ses particules constituantes tendent fortement à s'aligner lorsqu'un champ magnétique lui est appliqué. Dans un corps *ferromagnétique*, les particules voisines adoptent une configuration parallèle même en l'absence de tout champ externe, tandis que dans une substance *antiferromagnétique*, elles s'alignent antiparallèlement. Cet alignement de particules microscopiques sur des domaines mésoscopiques se traduit à l'échelle macroscopique par l'apparition d'un champ magnétique observable. Il est illustré schématiquement à la figure 1.1 pour les matériaux ferromagnétiques et antiferromagnétiques.

Chaque corpuscule composant un aimant est influencé à la fois par le champ électrique de ses voisins et par le champ magnétique externe. En vertu des lois de la mécanique quantique, son moment

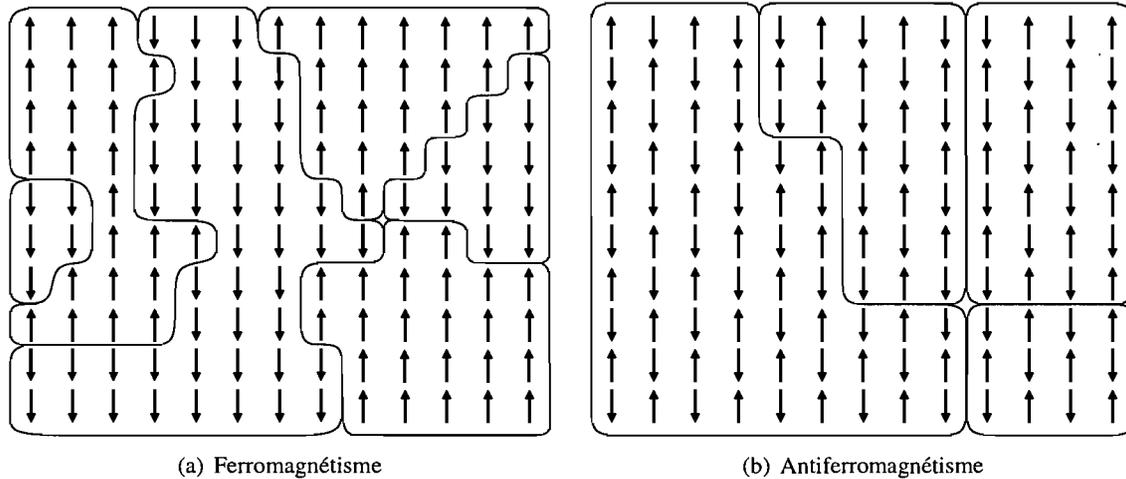


FIG. 1.1 – L’alignement des spins sur des domaines mésoscopiques dans un matériau magnétique

dipolaire magnétique est quantifié et colinéaire à son vecteur de moment cinétique. (Sa valeur étant par ailleurs dictée par le spin, nous confondrons par abus de langage les orientations du moment dipolaire magnétique d’une particule et ses états de spin.) En particulier, pour tout axe de quantification, le moment dipolaire des fermions de spin $l = \frac{1}{2}\hbar$ peut uniquement occuper les états correspondant aux valeurs de spin permises, soit $s = +\frac{1}{2}\hbar$ et $s = -\frac{1}{2}\hbar$, ainsi que les combinaisons linéaires de ces valeurs. Une version simplifiée de cette situation, qui prévaut précisément pour les électrons des corps ferromagnétiques et antiferromagnétiques, est représentée à la figure 1.1 par les deux orientations des flèches. Le plus souvent, il existe dans ces matériaux un axe de quantification privilégié. Le principe d’exclusion de Pauli est responsable du couplage entre les spins des électrons d’atomes voisins, puisqu’il fixe la valeur du spin total d’une configuration engendrée par la répulsion électrostatique des électrons. L’interaction physique à l’origine de ce couplage électronique est donc électrostatique, et non magnétique. Il existe bien un effet de couplage magnétique entre les spins, mais il est faible.

Les observations expérimentales révèlent que les aimants permanents peuvent exister sous deux régimes, magnétique ou non magnétique, et qu’ils subissent une transition de phases entre ces deux régimes lorsque leur température varie. Une *transition de phases*, phénomène caractéristique des systèmes de mécanique statistique, consiste en une variation discontinue des propriétés macroscopiques d’un système lorsque son environnement subit une altération infinitésimale. Une transition de phases de *premier ordre* présente un seuil et implique une chaleur latente, tandis qu’une transition de phases *continue* n’implique aucune chaleur latente. Dans ce dernier cas, les propriétés du système varient continûment, mais le taux de variation de l’une de ces quantités subit une discontinuité. L’ensemble des valeurs prises conjointement par les variables d’état du système à une transition de phases est nommé *courbe critique*. Le *point critique* désigne l’extrémité d’une courbe critique, lorsqu’elle existe ; il caractérise le passage d’une transition de premier ordre à une transition continue. Une transition de phases typique est illustrée à la figure 1.2. Plusieurs variables peuvent affecter la phase d’une substance ; à titre d’exemple, l’eau

liquide est transformée en vapeur soit par l'augmentation de sa température, soit par la diminution de sa pression.

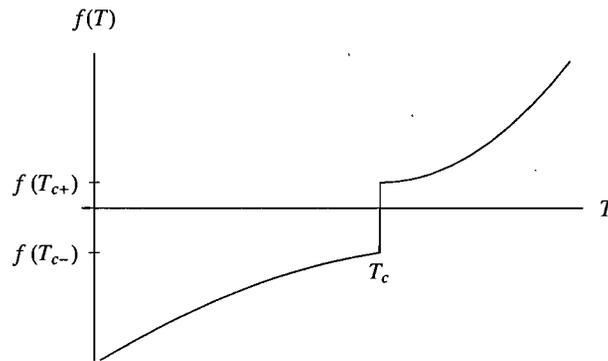


FIG. 1.2 – Un exemple de transition de phases

Dans un aimant, on observe expérimentalement l'existence d'une transition de phases entre deux types de comportements magnétiques, laquelle est régie par la température et le champ magnétique externe. Pour un champ nul, la chaleur spécifique subit une discontinuité à une température critique T_c qui varie selon le matériau. Cette transition de phases est continue, contrairement à celle des états fondamentaux de la matière, qui exhibent une transition de premier ordre. Dans un aimant, les hautes températures $T > T_c$ déterminent un régime paramagnétique : l'aimantation croît linéairement avec le champ magnétique externe selon $\vec{m} \approx \alpha \vec{B}$, pour $\alpha > 0$, et en particulier s'annule en l'absence de champ. Les basses températures $T < T_c$ définissent en revanche un régime ferromagnétique : l'aimantation n'est jamais nulle, mais s'accroît abruptement en présence d'un champ magnétique externe.

Rappelons brièvement la définition des principales quantités thermodynamiques que nous avons précédemment mentionnées ou que nous emploierons dans la suite. Nous noterons k la constante de Boltzmann, T la température absolue d'un système, $\beta = \frac{1}{kT}$ sa température inverse, N le nombre de particules qu'il contient, V son volume et Z sa fonction de partition. Avec ces conventions, l'énergie libre de Helmholtz

$$F = -kT \log Z \quad (1.1)$$

et l'entropie

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V} \quad (1.2)$$

définissent l'énergie interne

$$U = F + TS = \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{kT}\right), \quad (1.3)$$

laquelle détermine à son tour la chaleur spécifique

$$C = \frac{\partial U}{\partial T}. \quad (1.4)$$

Nous noterons par des lettres minuscules les quantités intensives correspondantes.

Le modèle d'Ising, plutôt simpliste sur le plan physique, ne tient compte que des deux principales contributions au magnétisme, soit l'interaction dipolaire entre les électrons d'atomes voisins et l'interaction entre le champ magnétique externe et les électrons. Il néglige tout autre effet, tant l'interaction nucléaire entre les atomes, l'interaction électromagnétique entre électrons et atomes, le déplacement des électrons, que le couplage entre le spin et l'orbite électronique. De prime abord, ces simplifications peuvent sembler outrancières, mais il n'en est rien. En effet, puisque chaque électron de valence d'un aimant solide forme un dipôle magnétique, les phénomènes magnétiques résultent essentiellement de l'alignement des moments dipolaires des électrons sur des plages mésoscopiques d'atomes. L'omission des autres effets physiques, qui interviennent à une échelle microscopique, apparaît conséquemment fondée. Par ailleurs, la réduction du problème à une interaction entre les plus proches atomes voisins est légitimée par les observations suivantes : d'abord, puisque le champ d'un dipôle magnétique décroît selon le cube de la distance, son effet sur les atomes éloignés s'avère négligeable ; ensuite, si la transition de phases se produit pour une interaction de courte portée, elle surviendra à plus forte raison pour une interaction de longue portée, laquelle accroît la corrélation entre les spins et leur tendance à s'aligner. Par conséquent, ce modèle simplifié devrait, en première approximation, décrire convenablement les phénomènes magnétiques.

Précisons enfin que le modèle d'Ising bidimensionnel est le système physique le plus simple qui subisse une transition de phases et dont les variables thermodynamiques puissent être calculées analytiquement, les modèles plus sophistiqués exigeant en effet un traitement numérique. En outre, il reproduit au point critique tous les comportements propres aux systèmes magnétiques. Pour ces raisons, il forme encore de nos jours le fondement de la compréhension théorique de la transition de phases ferromagnétique.

Maintenant que nous avons motivé l'intérêt pour ce modèle, nous en énonçons sans plus tarder la définition formelle.

1.2 Définition mathématique du modèle d'Ising

1.2.1 Le modèle général

Considérons un graphe connexe G quelconque (un *réseau*) occupant d dimensions de l'espace euclidien et comportant N sommets (les *sites*) reliés entre eux par des arêtes (les *liens*) arbitraires. L'ensemble des sites du réseau est noté $R_N(G) = \{1, 2, \dots, N\}$. Pour un site donné, on nomme *voisins* les autres sites du réseau auxquels il est directement relié par un lien. Dans un réseau régulier périodique, le nombre de voisins est identique pour tous les sites, mais cette condition n'est pas nécessairement vérifiée

dans un réseau quelconque. La figure 1.3 fournit un exemple de réseau bidimensionnel irrégulier dont les sites sont identifiés par des points et les liens, par des segments de courbe ; le site S y a pour voisins les sites A, B, C, D, E et F .

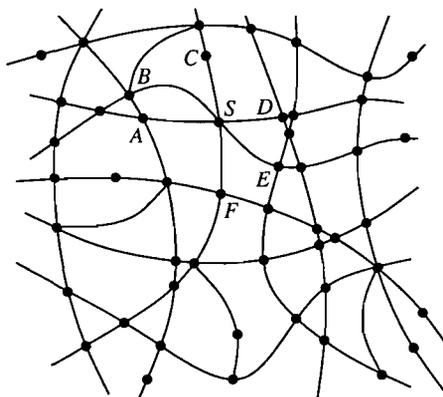


FIG. 1.3 – Un réseau bidimensionnel quelconque

Chaque site du réseau représente un atome du substrat, que nous supposons pourvu d'un seul électron de valence, tandis que les liens décrivent les interactions entre leurs spins électroniques. La grandeur de ces interactions est mesurée par une constante de couplage¹ $J \in \mathbb{R}$. Sur le réseau, nous définissons une variable de spin scalaire

$$\mu : R_N(G) \longrightarrow \{+1, -1\}$$

dont les valeurs correspondent aux deux orientations opposées des spins fermioniques $l = \frac{1}{2}\hbar$. Nous notons $\mu_s := \mu(s)$ la valeur du spin au site $s \in R_N(G)$ et

$$\{\mu\} := \{(s, \mu_s) \mid s \in R_N(G)\}$$

une configuration donnée parmi les 2^N configurations de spins possibles pour le réseau G . L'ensemble du système baigne dans un champ magnétique externe $\vec{H} \in \mathbb{R}^d$, dont la composante dans l'axe d'orientation des spins est désignée par la variable scalaire $H \in \mathbb{R}$.

Pour une configuration donnée, l'énergie totale de ce système est définie selon

$$E(\{\mu\}) := -J \sum_{\langle s, t \rangle} \mu_s \mu_t - H \sum_s \mu_s, \quad (1.5)$$

où la première contribution représente l'énergie d'interaction entre les paires de spins voisins, notées $\langle s, t \rangle$, et la seconde, l'énergie d'interaction entre les spins individuels et le champ magnétique externe.

¹La constante de couplage pourrait différer pour chaque couple de sites voisins, mais cette contrainte encombrante et peu réaliste saperait tout l'intérêt du modèle en le rendant réfractaire aux calculs. Pour simplifier, nous supposons donc cette quantité constante ou à tout le moins, pour les réseaux réguliers, constante sur chaque direction spatiale génératrice.

La fonction de partition du système s'écrit alors

$$Z = \sum_{\{\mu\}} e^{-\beta E(\{\mu\})} = \sum_{\{\mu\}} \exp \left[\beta J \sum_{\langle s,t \rangle} \mu_s \mu_t + \beta H \sum_s \mu_s \right]. \quad (1.6)$$

Pour toute configuration, le produit des spins dans l'argument de la première somme de l'équation (1.5) ne peut prendre que deux valeurs :

$$\mu_s \mu_t = \begin{cases} 1 & \text{lorsque } \mu_s = \mu_t \\ -1 & \text{lorsque } \mu_s \neq \mu_t. \end{cases}$$

Par conséquent, pour un champ magnétique externe faible, l'état fondamental survient lorsque les spins sont alignés dans le cas où $J > 0$, tandis que l'énergie minimale est atteinte lorsque les spins sont essentiellement opposés dans le cas où $J < 0$. La première situation décrit donc le phénomène du ferromagnétisme et la seconde situation, l'antiferromagnétisme. Pour un réseau périodique dont le nombre moyen de voisins est q , l'énergie de l'état fondamental ferromagnétique vaut

$$E_0 = \min_{\{\mu\}} E(\{\mu\}) = -\frac{1}{2} J N q - N |H|; \quad (1.7)$$

cette valeur est atteinte lorsque tous les spins du substrat sont alignés dans la direction du champ magnétique externe \vec{H} . L'énergie de l'état fondamental antiferromagnétique dépend de la géométrie particulière du réseau.

Ces prescriptions définissent le modèle d'Ising en toute généralité, c'est-à-dire indépendamment de la dimension et de la géométrie particulière du réseau. En une dimension spatiale, le réseau se réduit à une chaîne linéaire de spins reliés. En deux dimensions, il existe trois pavages du plan par des polygones réguliers, lesquels engendrent trois réseaux réguliers, soit carré, triangulaire, et hexagonal, dont chacun des sites possède respectivement quatre, six et trois voisins. Ces réseaux sont reproduits à la figure 1.4. En trois dimensions, il existe près d'une vingtaine de réseaux réguliers.

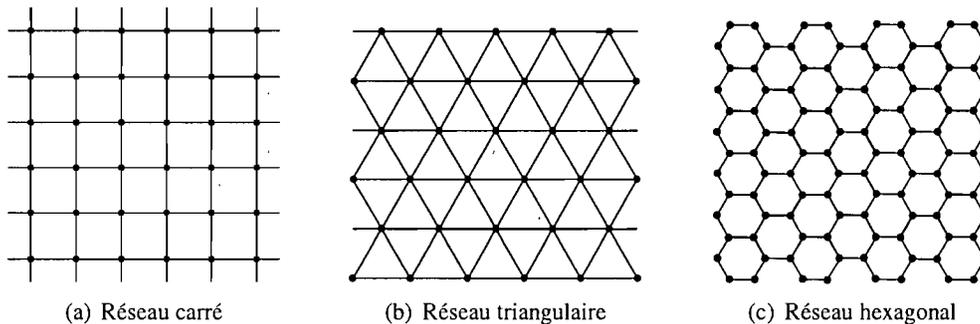


FIG. 1.4 – Les trois réseaux bidimensionnels réguliers

Le problème consiste à exprimer la fonction de partition donnée par la relation (1.6) comme fonction analytique de la température afin de calculer, par le truchement des équations (1.3) et (1.4), la chaleur

spécifique du système. Son comportement permettra alors de déterminer l'existence ou l'inexistence de la transition de phases et, le cas échéant, d'en établir les propriétés.

La généralité de ce problème contrariant sa résolution, nous le particularisons au modèle bidimensionnel sur un réseau carré.

1.2.2 Le modèle bidimensionnel sur un réseau carré

Considérons un modèle d'Ising défini sur un réseau carré doté de m lignes et de n colonnes dont le spin à l'intersection de la ligne i et de la colonne j est noté $\mu_{i,j}$ et dont les constantes de couplage horizontale et verticale valent respectivement J_1 et J_2 . L'énergie de ce système se réduit alors à

$$E_{m,n}(\{\mu\}) = -J_1 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} \mu_{i,j} \mu_{i,j+1} - J_2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n \mu_{i,j} \mu_{i+1,j} - H \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mu_{i,j}. \quad (1.8)$$

Un exemple de configuration possible pour un tel système est esquissé à la figure 1.5.

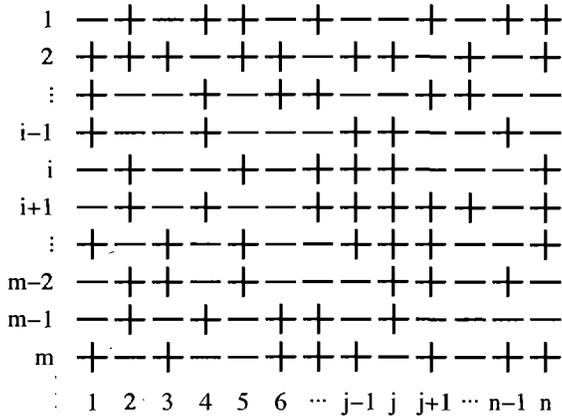


FIG. 1.5 – Une configuration des spins sur un réseau carré

Le plus souvent, l'imposition de conditions de périodicité à un réseau simplifie considérablement la supputation de la fonction de partition. En effet, elle uniformise le problème par l'élimination de l'effet de frontière, puisque contrairement à ceux d'un réseau ouvert, tous les sites d'un réseau périodique possèdent un même nombre de voisins et de liens. Pour appliquer au réseau carré la périodicité dans les deux dimensions spatiales, on relie les sites opposés de la frontière selon les identifications

$$\begin{aligned} \mu_{i,n+1} &\equiv \mu_{i,1} \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, m\}, \\ \mu_{m+1,j} &\equiv \mu_{1,j} \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Ces opérations équivalent au repliement successif du réseau en un cylindre plat, puis en un tore plat, tel qu'illustré à la figure 1.6. Elles n'affectent pas la topologie du réseau et ne lui confèrent aucune

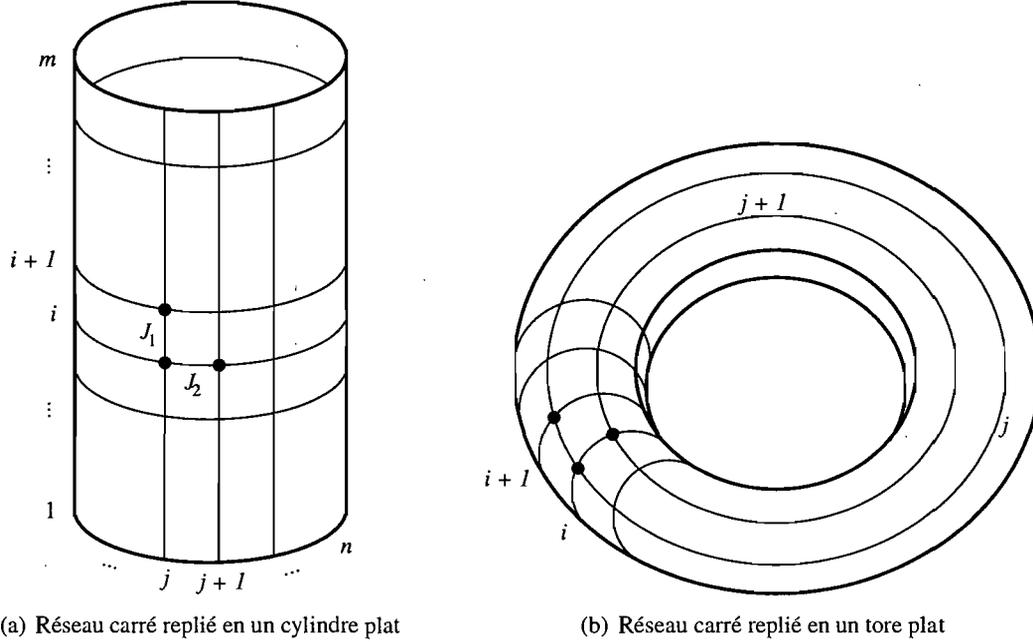


FIG. 1.6 – Les conditions de périodicité appliquées au réseau carré

« courbure » ; la définition du modèle, en particulier son énergie, ne dépend pas de la géométrie de la surface. Pour un réseau carré périodique dans les deux dimensions spatiales, l'énergie du système s'écrit alors

$$E_{m,n}(\{\mu\}) = -J_1 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mu_{i,j} \mu_{i,j+1} - J_2 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mu_{i,j} \mu_{i+1,j} - H \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mu_{i,j} \quad (1.9)$$

et sa fonction de partition,

$$Z_{m,n} = \sum_{\{\mu\}} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (J_1 \mu_{i,j} \mu_{i,j+1} + J_2 \mu_{i,j} \mu_{i+1,j} + H \mu_{i,j}) \right]. \quad (1.10)$$

Dans sa version bidimensionnelle, le problème consiste à exprimer la fonction de partition uniquement en termes des variables thermodynamiques macroscopiques — la température T et le champ externe H —, des paramètres du modèle — les constantes de couplage J_i , le nombre m de lignes, le nombre n de colonnes — et de constantes déterminées, sans référence aucune aux états de spin des sites individuels formant le réseau, afin de calculer analytiquement la chaleur spécifique du système et caractériser une éventuelle transition de phases.

1.3 Survol historique du problème

Le modèle de Lenz–Ising fut défini en 1920 par Wilhelm Lenz [1] dans un article portant sur les phénomènes magnétiques dans les corps solides. En 1925, Ernst Ising [2] publia la première solution

exacte du modèle unidimensionnel baigné d'un champ magnétique externe. Il démontra que ce dernier ne subissait aucune transition de phases et ne pouvait donc représenter adéquatement un corps ferromagnétique. Ising ne parvint pas à résoudre le problème bidimensionnel, même en l'absence de champ magnétique externe, mais sur la foi de ses résultats, il conclut erronément que les modèles bidimensionnel et tridimensionnel ne subissaient similairement aucune transition de phases.

Les tentatives ultérieures de résolution du problème bidimensionnel, tant par l'approche algébrique que combinatoire, se révélèrent longtemps infructueuses. En 1941, Hendrik Kramers et Gregory Wannier [3, 4] obtinrent l'expression exacte de la température critique du réseau carré, sans toutefois démontrer l'existence d'une transition de phases.

Dans son magistral article de 1944, Lars Onsager [5] résolut le problème bidimensionnel sur un réseau carré pour un champ magnétique externe nul : il obtint analytiquement la forme exacte de la fonction de partition du modèle d'Ising en termes des seules variables macroscopiques et paramètres du réseau. Sa fastidieuse démonstration subit ensuite maintes améliorations successives. Bruria Kaufman [6] réduisit tangiblement la taille de l'arsenal algébrique déployé par Lars Onsager en introduisant de nouveaux opérateurs, puis Theodore Schultz, Daniel Mattis et Elliott Lieb [8] fournirent une édifiante interprétation du modèle d'Ising comme système fermionique, laquelle simplifia davantage encore la démarche.

Les articles [22], [23] et [24] dressent une revue exhaustive des diverses contributions au calcul de la fonction de partition du modèle d'Ising jusque vers 1965. À ce jour, on ne connaît encore aucune solution exacte au problème bidimensionnel pour un champ magnétique externe non nul, ni d'ailleurs au problème tridimensionnel dépourvu de champ.

Dans le présent mémoire, nous offrons une version simplifiée et détaillée de la laborieuse démonstration de Lars Onsager qui inclut les améliorations précédemment citées et en propose de nouvelles. Nous adoptons donc une approche exclusivement algébrique et omettons son pendant combinatoire. Notre démarche s'inspire fortement du traitement présenté par Colin Thompson dans son ouvrage *Mathematical Statistical Mechanics* [10], que nous avons complété en fournissant les calculs intermédiaires et auquel nous avons apporté certains amendements.

Chapitre 2

Définitions et résultats préalables

Quand on veut plaire dans le monde, il faut se résoudre à se laisser apprendre beaucoup de choses que l'on sait par des gens qui les ignorent.
— Nicolas de Chamfort, *Maximes et pensées*

Ce chapitre regroupe les définitions et résultats utiles à la compréhension de la démarche. La démonstration des théorèmes notoires recensés dans les ouvrages élémentaires ou les tables mathématiques sera omise. Nous osons espérer qu'à l'instar des mondains, le lecteur averti souffrira sans rechigner ces indispensables rappels.

2.1 Rappels d'algèbre matricielle

Nous rappelons d'abord la définition de quelques outils d'usage courant.

Définition 1 (commutateur)

Le commutateur de deux opérateurs $A : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}$ et $B : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}$ est défini selon

$$[A, B] := AB - BA.$$

Si $[A, B] = 0$, on dit des opérateurs A et B qu'ils commutent.

Proposition 1

Les commutateurs satisfont aux propriétés élémentaires suivantes :

$$\begin{aligned} [A, B] &= -[B, A], \\ [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B. \end{aligned}$$

Définition 2 (anticommutateur)

L'anticommutateur de deux opérateurs $A : \mathbb{V} \longrightarrow \mathbb{V}$ et $B : \mathbb{V} \longrightarrow \mathbb{V}$ est défini selon

$$\{A, B\} := AB - BA.$$

Si $\{A, B\} = 0$, on dit des opérateurs A et B qu'ils anticommutent.

Proposition 2

La propriété élémentaire $\{A, B\} = \{B, A\}$ est vérifiée par tout anticommutateur.

Définition 3 (tenseur de Levi-Civita)

Le tenseur antisymétrique

$$\varepsilon_{abc} := \begin{cases} 1 & \text{si } (abc) \text{ forme un cycle pair de } (123) \\ -1 & \text{si } (abc) \text{ forme un cycle impair de } (123) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

est nommé tenseur de Levi-Civita de rang 3.

Nous adopterons la convention selon laquelle les indices latins désignent un élément de l'ensemble $\mathbb{N}^* = \mathbb{N} \setminus \{0\}$, cependant que les indices grecs désignent un élément de l'ensemble \mathbb{N} . En outre, nous noterons respectivement \mathbb{I}_d et \mathbb{O}_d les matrices identité et nulle de taille $d \times d$.

Nous énonçons ensuite quelques propriétés générales du spectre d'une matrice.

Proposition 3

Soient $M \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(d, d)$ une matrice carrée quelconque et

$$S(M) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d\}$$

l'ensemble de ses valeurs propres, possiblement dégénérées. Alors le spectre de cette même matrice élevée à la puissance n vaut

$$S(M^n) = \{\lambda_1^n, \lambda_2^n, \dots, \lambda_d^n\}.$$

Proposition 4

Les trace et déterminant de toute matrice carrée $M \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(d, d)$ valent

$$\text{tr}(M) = \sum_{i=1}^d \lambda_i \quad \text{et} \quad \det(M) = \prod_{i=1}^d \lambda_i,$$

respectivement.

Proposition 5 (Frobenius–Perron)

Une matrice non nulle dont tous les éléments sont positifs admet une valeur propre maximale dont les multiplicités algébrique et géométrique valent $d = g = 1$. De plus, le vecteur propre associé à cette valeur propre maximale peut être choisi tel que toutes ses coordonnées soient positives.

2.2 Le produit tensoriel et l'exponentielle de matrices

Nous définissons l'exponentielle de matrices et en soulignons les propriétés essentielles.

Définition 4 (exponentielle de matrices)

L'exponentielle d'une matrice carrée $M \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(d, d)$ est définie par sa série de Taylor,

$$e^{Mx} := \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(Mx)^k}{k!} = \mathbb{I}_d + Mx + \frac{M^2 x^2}{2!} + \dots,$$

pour toute variable scalaire $x \in \mathbb{K}$. Sa taille est identique à celle de la matrice M .

Proposition 6

Cette série converge toujours.

Proposition 7

Soient $M \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(d, d)$ une matrice carrée quelconque et $x, y \in \mathbb{K}$ des variables scalaires. L'exponentielle d'une matrice satisfait aux propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} e^{Mx} e^{My} &= e^{M(x+y)}, \\ e^{Mx} e^{-Mx} &= \mathbb{I}_d, \\ \frac{d}{dx} e^{Mx} &= M e^{Mx}, \\ \det[\exp(Mx)] &= \exp[\text{tr}(Mx)], \\ M = S \Lambda S^{-1} &\implies e^{Mx} = S e^{\Lambda x} S^{-1}. \end{aligned}$$

En particulier, lorsque la matrice M est diagonalisable, la dernière propriété est vérifiée pour les matrices de diagonalisation.

Proposition 8 (identité de Baker–Hausdorff)

Pourvu que les matrices A et B commutent toutes deux avec leur commutateur $[A, B]$, l'exponentielle d'une somme de matrices vaut

$$e^{(A+B)} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}$$

et le produit de deux exponentielles,

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}.$$

En particulier, si $[A, B] = 0$, alors

$$e^{(A+B)} = e^A e^B = e^B e^A.$$

Nous présentons ensuite la définition et les principales propriétés du produit tensoriel de matrices.

Définition 5 (produit tensoriel de matrices)

Le produit tensoriel ou produit de Kronecker de deux matrices $A = (a_{ij}) \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(m, n)$ et $B = (b_{ij}) \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(p, q)$ est un tenseur de rang 4 formé des éléments

$$(A \otimes B)_{i'v', j'v''} := A_{ij} B_{v'v''}.$$

Il correspond à la matrice par blocs

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}$$

de taille $mp \times nq$.

Proposition 9

Le produit tensoriel respecte les propriétés suivantes.

- (a) Si α est une constante scalaire, alors $(\alpha A) \otimes B = A \otimes (\alpha B) = \alpha(A \otimes B)$.
- (b) En général, le produit tensoriel est non commutatif : $A \otimes B \neq B \otimes A$.
- (c) Le produit tensoriel est associatif : $A \otimes (B \otimes C) = (A \otimes B) \otimes C$.
- (d) Le produit tensoriel est distributif relativement à l'addition : $(A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C$ et $A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$.
- (e) La multiplication matricielle est distribuée sur les arguments correspondants : $(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$.
- (f) Si les inverses matriciels existent, alors $(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$.

Proposition 10

Soient $\{\lambda_i | 1 \leq i \leq n\}$ les valeurs propres et $\{x_i | 1 \leq i \leq n\}$ les vecteurs propres de la matrice diagonalisable $A \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(n, n)$, puis $\{\mu_j | 1 \leq j \leq m\}$ et $\{y_j | 1 \leq j \leq m\}$ ceux de la matrice diagonalisable $B \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(m, m)$. Alors les valeurs propres de leur produit tensoriel valent

$$\mathcal{S}(A \otimes B) = \{\lambda_i \mu_j | 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}$$

et ses vecteurs propres,

$$\mathcal{V}(A \otimes B) = \{x_i \otimes y_j | 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}.$$

Proposition 11

Soient les matrices $A \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(m, n)$ et $B \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(p, q)$. La trace de leur produit tensoriel se factorise en

$$\text{tr}(A \otimes B) = (\text{tr } A)(\text{tr } B).$$

Si de plus les matrices sont carrées, c'est-à-dire $m = n$ et $p = q$, alors le déterminant du produit tensoriel se décompose en

$$\det(A \otimes B) = (\det A)^m (\det B)^p.$$

Proposition 12

Le produit tensoriel d'exponentielles de matrices obéit à l'identité

$$\exp(A_{n \times n}) \otimes \exp(B_{m \times m}) = \exp(A_{n \times n} \otimes \mathbb{I}_m + \mathbb{I}_n \otimes B_{m \times m}) = \exp(A_{n \times n} \otimes \mathbb{I}_m) \exp(\mathbb{I}_n \otimes B_{m \times m}).$$

Démonstration

Soient les matrices carrées $A \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(n, n)$ et $B \in \text{Mat}_{\mathbb{K}}(m, m)$. Définissons les matrices $\tilde{A} := A_{n \times n} \otimes \mathbb{I}_m$ et $\tilde{B} := \mathbb{I}_n \otimes B_{m \times m}$, toutes deux de taille $nm \times nm$.

Nous montrons d'abord que

$$\exp A \otimes \exp B = \exp(\tilde{A} + \tilde{B}).$$

Le membre de gauche vaut

$$\exp(A_{n \times n}) \otimes \exp(B_{m \times m}) = \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{A^i}{i!} \right) \otimes \left(\sum_{j=0}^{\infty} \frac{B^j}{j!} \right)$$

et le membre de droite,

$$\exp(\tilde{A} + \tilde{B}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\tilde{A} + \tilde{B})^k}{k!}.$$

Pour que s'applique le théorème binomial à cette dernière équation, les matrices doivent commuter, ce qui est le cas en raison de leur définition particulière :

$$\tilde{A}\tilde{B} = (A_{n \times n} \otimes \mathbb{I}_m)(\mathbb{I}_n \otimes B_{m \times m}) = A_{n \times n} \mathbb{I}_n \otimes \mathbb{I}_m B_{m \times m} = \mathbb{I}_n A_{n \times n} \otimes B_{m \times m} \mathbb{I}_m = (\mathbb{I}_n \otimes B_{m \times m})(A_{n \times n} \otimes \mathbb{I}_m) = \tilde{B}\tilde{A}.$$

Le membre de droite s'écrit alors

$$\exp(\tilde{A} + \tilde{B}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left[\sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \tilde{A}^i \tilde{B}^{k-i} \right] = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=0}^k \frac{\tilde{A}^i \tilde{B}^{k-i}}{i!(k-i)!} = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tilde{A}^i \tilde{B}^j}{i! j!}$$

après le changement de variable $j = k - i$, en sommant sur les éléments diagonaux. En remarquant que

$$\tilde{A}^i = (A \otimes \mathbb{I})^i = (A \otimes \mathbb{I})(A \otimes \mathbb{I}) \cdots (A \otimes \mathbb{I}) = A^i \otimes \mathbb{I}$$

et de même pour \tilde{B} , nous obtenons enfin

$$\begin{aligned} \exp(\tilde{A} + \tilde{B}) &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\tilde{A}^i}{i!} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tilde{B}^j}{j!} = \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{A^i \otimes \mathbb{I}}{i!} \right) \left(\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\mathbb{I} \otimes B^j}{j!} \right) \\ &= \left[\left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{A^i}{i!} \right) \otimes \mathbb{I} \right] \left[\mathbb{I} \otimes \left(\sum_{j=0}^{\infty} \frac{B^j}{j!} \right) \right] \\ &= [(\exp A) \otimes \mathbb{I}] [\mathbb{I} \otimes (\exp B)] = \exp A \otimes \exp B. \end{aligned}$$

De plus, puisque $[A_{n \times n} \otimes \mathbb{I}_m, \mathbb{I}_n \otimes B_{m \times m}] = \mathbb{O}$, l'identité de Baker–Hausdorff permet de conclure que

$$\exp(\tilde{A} + \tilde{B}) = \exp(\tilde{A}) \exp(\tilde{B}),$$

ce qui complète la preuve. □

2.3 Les matrices et tenseurs de spin de Pauli

Nous rappelons la définition des matrices de Pauli et présentons la notion de tenseur de Pauli en soulignant les propriétés algébriques de ces objets.

Définition 6 (matrices de spin de Pauli)

Les matrices complexes $\sigma_i \in \text{Mat}_{\mathbb{C}}(2, 2)$ définies selon

$$\sigma_0 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

portent le nom de matrices de spin de Pauli.

Proposition 13

Les matrices de Pauli satisfont aux propriétés suivantes.

- (a) Elles sont idempotentes : $\sigma_\alpha^2 = \mathbb{I}_2$ pour $\alpha \in \{0, 1, 2, 3\}$.
- (b) Elles anticommulent : $\{\sigma_a, \sigma_b\} = \mathbb{O}_2$ pour $a, b \in \{1, 2, 3\}, a \neq b$.
- (c) Elles forment une algèbre de Lie : $[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\varepsilon_{abc}\sigma_c$ pour $a, b, c \in \{1, 2, 3\}$.
- (d) Elles s'obtiennent les unes des autres par la relation $\sigma_a = -i\sigma_b\sigma_c$, valide pour tout cycle (abc) pair.
- (e) Leur trace est nulle : $\text{tr}(\sigma_a) = 0$ pour $a \in \{1, 2, 3\}$.

Nous avons défini les matrices de Pauli par leur valeur matricielle dans la représentation du nombre d'occupation de l'espace des positions. Il eût cependant été loisible de les définir en toute généralité par leurs propriétés algébriques intrinsèques, sans référence à aucune représentation particulière.

Nous introduisons maintenant un objet dont nous userons abondamment dans la suite.

Définition 7 (tenseurs de spin de Pauli)

Pour $1 \leq k \leq m$, on définit le produit tensoriel de matrices de Pauli

$$\sigma_{\alpha,k,m} := \left(\bigotimes_{i=1}^{k-1} \mathbb{I}_2 \right) \otimes \sigma_\alpha \otimes \left(\bigotimes_{i=k+1}^m \mathbb{I}_2 \right) = \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \overbrace{\sigma_\alpha}^k \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2,$$

de taille matricielle $2^m \times 2^m$. Lorsque le contexte le permettra sans risque de confusion, nous omettrons le troisième indice.

La somme et le produit matriciels de tenseurs de Pauli, $s = \sigma_{\alpha,k,m} + \sigma_{\beta,l,n}$ et $p = \sigma_{\alpha,k,m} \cdot \sigma_{\beta,l,n}$, ne sont définis que si les tailles des deux tenseurs sont égales, c'est-à-dire si $n = m$. À titre d'exemples de la précédente définition, nous donnons

$$\sigma_{1,1,2} = \sigma_1 \otimes \mathbb{I}_2 = \left(\begin{array}{c|cc} & 1 & 0 \\ & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & \\ 0 & 1 & \end{array} \right), \quad \sigma_{1,2,2} = \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_1 = \left(\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & \\ \hline 1 & 0 & \\ \hline & 0 & 1 \\ & 1 & 0 \end{array} \right),$$

$$\sigma_{2,2,3} = \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_2 \otimes \mathbb{I}_2 = \left(\begin{array}{cc|cc} & & & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & \\ & & & \\ & & & \end{array} \right)$$

Proposition 14

Les tenseurs de Pauli satisfont aux mêmes propriétés que les matrices de Pauli.

- (a) Ils sont idempotents : $\sigma_{\alpha,k,m}^2 = \mathbb{I}_{2^m}$ pour $\alpha \in \{0, 1, 2, 3\}$, $1 \leq k \leq m$.
- (b) Ils anticommulent ou commutent, selon la position de la matrice de Pauli dans le tenseur :
 $\{\sigma_{a,k,m}, \sigma_{b,k,m}\} = \mathbb{O}_{2^m}$ et $[\sigma_{a,k,m}, \sigma_{b,l,m}] = \mathbb{O}_{2^m}$ pour $a, b \in \{1, 2, 3\}$, $1 \leq k, l \leq m$ avec $a \neq b$ dans le premier cas et $k \neq l$ dans le second.
- (c) Ils forment une algèbre de Lie pour un paramètre k fixé : $[\sigma_{a,k,m}, \sigma_{b,k,m}] = 2i\varepsilon_{abc}\sigma_{c,k,m}$ pour $a, b, c \in \{1, 2, 3\}$, $1 \leq k \leq m$.
- (d) Ils s'obtiennent les uns des autres par la relation $\sigma_{a,k,m} = -i\sigma_{b,k,m}\sigma_{c,k,m}$, valable pour tout cycle (abc) pair avec $a, b, c \in \{1, 2, 3\}$ et $1 \leq k \leq m$.
- (e) Leur trace est nulle : $\text{tr}(\sigma_{a,k,m}) = 0$ pour $a \in \{1, 2, 3\}$, $1 \leq k \leq m$.

Démonstration

Ces résultats découlent immédiatement de la définition 7 et des propositions 9, 11 et 13. La propriété 9.e de la multiplication tensorielle implique en effet respectivement, pour $k = l$ et $k \neq l$, les relations

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha,k,m}\sigma_{\beta,k,m} &= \left(\mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_{\alpha}^k \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \right) \left(\mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_{\beta}^k \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \right) \\ &= \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes (\sigma_{\alpha}^k \sigma_{\beta}^k) \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2, \\ \sigma_{\alpha,k,m}\sigma_{\beta,l,m} &= \left(\mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_{\alpha}^k \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \right) \left(\mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_{\beta}^l \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \right) \\ &= \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_{\alpha}^k \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_{\beta}^l \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2, \end{aligned}$$

dont dérivent les quatre premières propriétés. D'après la proposition 11, la trace se décompose en le produit

$$\text{tr}(\sigma_{\alpha,k,m}) = \text{tr}(\sigma_{\alpha}) \prod_{i=1}^{m-1} \text{tr}(\mathbb{I}_2) = 2^{m-1} \text{tr}(\sigma_{\alpha}),$$

dont s'ensuit la cinquième propriété. □

Chapitre 3

Calcul algébrique de la fonction de partition

Lasciate ogni speranza, voi ch'entrate !
— Dante Alighieri, *La divina commedia (Inferno)*

Ce chapitre renferme le calcul détaillé de la fonction de partition du modèle d'Ising bidimensionnel sur le réseau carré périodique.

3.1 La notion de matrice de transfert

Avant d'entamer la démarche proprement dite, nous introduisons la notion de matrice de transfert, un outil clé intervenant dans la résolution de nombreux problèmes de mécanique statistique. Nous définissons d'abord cette notion dans toute sa généralité avant d'en fournir une interprétation géométrique et de l'illustrer par des cas particuliers.

3.1.1 Définition générale

Considérons un réseau régulier en d dimensions spatiales et reportons-le sur un réseau hypercubique de même dimension par déformation continue des sites et des liens. Cette opération de *rectification*, purement pratique, n'affecte pas les propriétés topologiques du réseau, mais permet de définir plus aisément une base pour le motif du réseau. Elle est schématisée à la figure 3.1 pour les réseaux triangulaire et hexagonal. Nous supposons le réseau de taille $n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d$ et le divisons en n_d unités de configuration regroupant chacune les $p = n_1 \times n_2 \times \dots \times n_{d-1}$ spins des $d - 1$ premières dimensions. En une dimension spatiale, l'unité de configuration coïncide avec un site individuel ; en deux dimensions, avec une ligne

ou une colonne ; en trois dimensions, elle correspond à un plan sur le réseau rectifié. Afin de simplifier le traitement algébrique des réseaux de dimension supérieure à un, nous considérerons les interactions entre ces unités de configuration plutôt qu'entre les spins individuels.

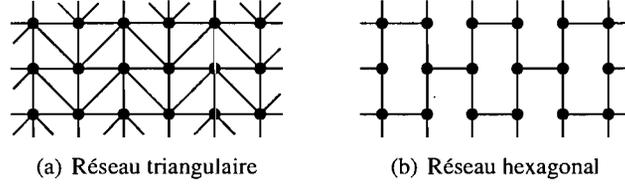


FIG. 3.1 – La rectification des réseaux triangulaire et hexagonal sur une maille carrée

Notons par la variable \square une unité de configuration du réseau et par

$$\{\square\} = \{\square_k \mid 1 \leq k \leq n_d\}$$

l'ensemble de toutes ces unités formant la configuration complète du système. En toute généralité, la fonction de partition d'un modèle d'Ising peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\mu\}} \exp\left(\beta J \sum_{\langle s,t \rangle} \mu_s \mu_t + \beta H \sum_s \mu_s\right) \\ &= \sum_{\{\mu\}} \exp\left(\beta \sum_{k_1} \sum_{k_2} \cdots \sum_{k_d} \left[f_1(\mu_{k'_1, k'_2, \dots, k'_d}, \mu_{k''_1, k''_2, \dots, k''_d}) + f_2(\mu_{k'''_1, k'''_2, \dots, k'''_d}) \right]\right), \end{aligned} \quad (3.1)$$

où k'_i , k''_i et k'''_i sont des fonctions affines de k_i dépendant de la géométrie particulière du réseau. À titre d'exemple, en deux dimensions spatiales, sur un réseau carré, l'équation (3.1) se réduit à la relation (1.10) avec

$$\begin{aligned} f_1(\mu_{i', j'}, \mu_{i'', j''}) &= J_1 \mu_{i, j} \mu_{i+1, j} + J_2 \mu_{i, j} \mu_{i, j+1}, \\ f_2(\mu_{i''', j'''}) &= H \mu_{i, j}. \end{aligned}$$

Définissons ensuite les fonctions

$$X_1(\square_{k'_1}, \square_{k'_1}) := \beta \sum_{k_2} \sum_{k_3} \cdots \sum_{k_d} f_1(\mu_{k'_1, k'_2, \dots, k'_d}, \mu_{k''_1, k''_2, \dots, k''_d}), \quad (3.2)$$

$$X_2(\square_{k'''_1}) := \beta \sum_{k_2} \sum_{k_3} \cdots \sum_{k_d} f_2(\mu_{k'''_1, k'''_2, \dots, k'''_d}), \quad (3.3)$$

qui désignent respectivement l'énergie d'interaction entre deux unités de configuration distinctes $\square_{k'_1}$ et $\square_{k'_1}$, puis l'énergie d'interaction au sein d'une même unité $\square_{k'''_1}$. En sommant sur l'ensemble des configurations accessibles à chaque unité composant le réseau (site, ligne, plan ou autre, selon sa dimension), nous obtenons

$$Z = \sum_{\{\square\}} \exp\left(\beta \sum_{k_1} [X_1(\square_{k_1}, \square_{k_1+1}) + X_2(\square_{k_1})]\right)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\{\square\}} \prod_{k_1} \exp[\beta X_1(\square_{k_1}, \square_{k_1+1})] \exp[\beta X_2(\square_{k_1})] \\
&= \sum_{\{\square\}} \prod_k L(\square_k, \square_{k+1}),
\end{aligned} \tag{3.4}$$

où la fonction

$$L(\square, \square') := \exp[\beta X_1(\square, \square')] \exp[\beta X_2(\square)], \tag{3.5}$$

strictement positive, représente le facteur du poids de Gibbs associé à l'énergie totale de l'unité de configuration \square et à l'énergie d'interaction entre les unités \square et \square' .

La *matrice de transfert* est la matrice $L := [L(\square, \square')]_{i,j}$ composée des éléments (3.5) évalués dans l'ordre imposé par la base binaire décroissante des spins,

$$\mathcal{B}_p = \{|+\cdots+\rangle, |+\cdots+\rangle, |+\cdots+\rangle, \dots, |+\cdots-\rangle, |-\cdots-\rangle\}, \tag{3.6}$$

où nous notons les états selon la convention

$$|\pm \pm \cdots \pm \pm \pm\rangle := |\pm\rangle_1 \otimes |\pm\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |\pm\rangle_{p-2} \otimes |\pm\rangle_{p-1} \otimes |\pm\rangle_p$$

avec $p = n_1 \times n_2 \times \cdots \times n_{d-1}$. Cette matrice recense tous les états accessibles au système, ou plus précisément tous les états accessibles à deux unités de configuration voisines dans ce système, et leur attribue un poids statistique. Elle n'est pas unique en raison d'une certaine liberté dans la définition des fonctions (3.2) et (3.3), de même que dans le choix arbitraire de la base \mathcal{B} . Son principal intérêt réside précisément dans la factorisation de la fonction de partition en des termes n'impliquant chacun que deux unités de configuration voisines.

Chaque terme $L(\square, \square')$ de l'équation (3.4) représente une probabilité conditionnelle, à une normalisation près, tandis que la somme sur les unités de configuration apparaissant dans cette équation correspond à un produit matriciel. Grâce à cette observation, la fonction de partition se réduit récursivement à

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\square_1} \sum_{\square_2} \cdots \sum_{\square_{n_d}} L(\square_1, \square_2) L(\square_2, \square_3) \cdots L(\square_{n_d-1}, \square_{n_d}) L(\square_{n_d}, \square_1) \\
&= \sum_{\square_1} \sum_{\square_2} \cdots \sum_{\square_{n_d-1}} L(\square_1, \square_2) L(\square_2, \square_3) \cdots L(\square_{n_d-2}, \square_{n_d-1}) \left(\sum_{\square_{n_d}} L(\square_{n_d-1}, \square_{n_d}) L(\square_{n_d}, \square_1) \right) \\
&= \sum_{\square_1} \sum_{\square_2} \cdots \sum_{\square_{n_d-2}} L(\square_1, \square_2) L(\square_2, \square_3) \cdots L(\square_{n_d-3}, \square_{n_d-2}) \left(\sum_{\square_{n_d-1}} L(\square_{n_d-2}, \square_{n_d-1}) L^2(\square_{n_d-1}, \square_1) \right) \\
&= \cdots \\
&= \sum_{\square_1} L^{n_d}(\square_1, \square_1),
\end{aligned}$$

où $L^{n_d}(\square, \square')$ désigne l'élément (\square, \square') de la matrice L^{n_d} . Cette somme des éléments diagonaux équivaut à la trace d'une matrice, soit

$$Z = \text{tr}(L^{n_d}). \tag{3.7}$$

Cette remarquable propriété des matrices de transfert les rend fort utiles à la résolution de maints problèmes de mécanique statistique impliquant des réseaux réguliers.

3.1.2 Cas particuliers et exemples

Afin d'illustrer concrètement la définition abstraite d'une matrice de transfert, nous présentons les cas particuliers des réseaux rectifiables unidimensionnel, bidimensionnel et tridimensionnel. Pour chacun de ces cas, nous proposons l'exemple explicite des réseaux linéaire, carré et cubique, respectivement.

Soient μ et ν deux sites voisins d'un réseau unidimensionnel. La matrice de transfert unidimensionnelle s'écrit alors, en toute généralité,

$$L_{2 \times 2}^{(1)} = [L(\mu, \nu)] = \begin{pmatrix} L(\mu^1, \nu^1) & L(\mu^1, \nu^2) \\ L(\mu^2, \nu^1) & L(\mu^2, \nu^2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(+1, +1) & L(+1, -1) \\ L(-1, +1) & L(-1, -1) \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

En une dimension spatiale, la chaîne linéaire de spins est le seul réseau régulier possible. Sa matrice de transfert est composée des éléments

$$L^{(1)}(\mu, \mu') = \exp[\beta J \mu \mu'] \exp[\beta H \mu] \quad (3.9)$$

et vaut explicitement

$$L_{2 \times 2}^{(1)} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{\beta(-J-H)} \\ e^{\beta(-J+H)} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

dans la base $\mathcal{B}_1 = \{|+\rangle, |-\rangle\}$.

Si τ et κ désignent deux lignes (ou deux colonnes) voisines d'un réseau bidimensionnel rectifié comprenant chacune m sites, alors la matrice de transfert bidimensionnelle revêt la forme générale

$$L_{2^m \times 2^m}^{(2)} = [L(\tau, \kappa)] = \begin{pmatrix} L(\tau^1, \kappa^1) & \cdots & L(\tau^1, \kappa^j) & L(\tau^1, \kappa^{j+1}) & \cdots & L(\tau^1, \kappa^{2^m}) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ L(\tau^i, \kappa^1) & \cdots & L(\tau^i, \kappa^j) & L(\tau^i, \kappa^{j+1}) & \cdots & L(\tau^i, \kappa^{2^m}) \\ L(\tau^{i+1}, \kappa^1) & \cdots & L(\tau^{i+1}, \kappa^j) & L(\tau^{i+1}, \kappa^{j+1}) & \cdots & L(\tau^{i+1}, \kappa^{2^m}) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ L(\tau^{2^m}, \kappa^1) & \cdots & L(\tau^{2^m}, \kappa^j) & L(\tau^{2^m}, \kappa^{j+1}) & \cdots & L(\tau^{2^m}, \kappa^{2^m}) \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

En deux dimensions spatiales, le plan admet plusieurs pavages réguliers distincts. En particulier, la matrice de transfert du réseau carré a pour éléments

$$\begin{aligned} L(\tau, \tau') &= \exp[-\beta X_1(\tau, \tau')] \exp[-\beta X_2(\tau)] \\ &= \exp\left[\beta J_1 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu'_i\right] \exp\left[\beta J_2 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu_{i+1} + \beta H \sum_{i=1}^m \mu_i\right], \end{aligned} \quad (3.12)$$

où les variables μ_i identifient les sites au sein d'une unité de configuration. Nous pourrions alternativement définir la matrice de transfert

$$\begin{aligned} \tilde{L}(\tau, \tau') &= \exp\left[-\frac{\beta}{2} X_2(\tau)\right] \exp[-\beta X_1(\tau, \tau')] \exp\left[-\frac{\beta}{2} X_2(\tau')\right] \\ &= \exp\left[\frac{\beta J_2}{2} \sum_{i=1}^m \mu_i \mu_{i+1} + \frac{\beta H}{2} \sum_{i=1}^m \mu_i\right] \exp\left[\beta J_1 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu'_i\right] \exp\left[\frac{\beta J_2}{2} \sum_{i=1}^m \mu'_i \mu'_{i+1} + \frac{\beta H}{2} \sum_{i=1}^m \mu'_i\right], \end{aligned}$$

qui est invariante dans la permutation des unités τ et τ' , donc symétrique. Cette forme présente l'avantage d'une diagonalisation par des matrices orthogonales, mais n'affecte en rien le spectre. Pour nos besoins, nous retiendrons dans la suite la première version. Le calcul explicite des éléments (3.12) pour un réseau carré comprenant deux sites par ligne (ou encore par colonne) produit la matrice

$$L_{4 \times 4}^{(2)} = \begin{pmatrix} e^{2\beta(J_1+J_2+H)} & e^{2\beta(J_2+H)} & e^{2\beta(J_2+H)} & e^{2\beta(-J_1+J_2+H)} \\ e^{-2\beta J_2} & e^{2\beta(J_1-J_2)} & e^{2\beta(-J_1-J_2)} & e^{-2\beta J_2} \\ e^{-2\beta J_2} & e^{2\beta(-J_1-J_2)} & e^{2\beta(J_1-J_2)} & e^{-2\beta J_2} \\ e^{2\beta(-J_1+J_2-H)} & e^{2\beta(J_2-H)} & e^{2\beta(J_2-H)} & e^{2\beta(J_1+J_2-H)} \end{pmatrix}$$

dans la base binaire

$$\mathcal{B}_2 = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}. \quad (3.13)$$

Pour un réseau comportant trois sites par ligne avec une unique constante de couplage $J = J_1 = J_2$, on obtient la matrice de transfert

$$L_{8 \times 8}^{(2)} = \begin{pmatrix} e^{\beta(6J+3H)} & e^{\beta(4J+3H)} & e^{\beta(4J+3H)} & e^{\beta(2J+3H)} & e^{\beta(4J+3H)} & e^{\beta(2J+3H)} & e^{\beta(2J+3H)} & e^{3\beta H} \\ e^{\beta H} & e^{\beta(2J+H)} & e^{\beta(-2J+H)} & e^{\beta H} & e^{\beta(-2J+H)} & e^{\beta H} & e^{\beta(-4J+H)} & e^{\beta(-2J+H)} \\ e^{\beta H} & e^{\beta(-2J+H)} & e^{\beta(2J+H)} & e^{\beta H} & e^{\beta(-2J+H)} & e^{\beta(-4J+H)} & e^{\beta H} & e^{\beta(-2J+H)} \\ e^{\beta(-2J-H)} & e^{-\beta H} & e^{-\beta H} & e^{\beta(2J-H)} & e^{\beta(-4J-H)} & e^{\beta(-J-2H)} & e^{\beta(-2J-H)} & e^{-\beta H} \\ e^{\beta H} & e^{\beta(-2J+H)} & e^{\beta(-2J+H)} & e^{\beta(-4J+H)} & e^{\beta(2J+H)} & e^{\beta H} & e^{\beta H} & e^{\beta(-2J+H)} \\ e^{\beta(-2J-H)} & e^{-\beta H} & e^{\beta(-4J-H)} & e^{\beta(-2J-H)} & e^{-\beta H} & e^{\beta(2J-H)} & e^{\beta(-2J-H)} & e^{-\beta H} \\ e^{\beta(-2J-H)} & e^{\beta(-4J-H)} & e^{-\beta H} & e^{\beta(-2J-H)} & e^{-\beta H} & e^{\beta(-2J-H)} & e^{\beta(2J-H)} & e^{-\beta H} \\ e^{-3\beta H} & e^{\beta(2J-3H)} & e^{\beta(2J-3H)} & e^{\beta(4J-3H)} & e^{\beta(2J-3H)} & e^{\beta(4J-3H)} & e^{\beta(4J-3H)} & e^{\beta(6J-3H)} \end{pmatrix}$$

exprimée dans la base

$$\mathcal{B}_3 = \{|+, +, +\rangle, |+, +, -\rangle, |+, -, +\rangle, |+, -, -\rangle, |-, +, +\rangle, |-, +, -\rangle, |-, -, +\rangle, |-, -, -\rangle\}. \quad (3.14)$$

Si ζ et ξ désignent deux plans voisins d'un réseau tridimensionnel rectifié comportant chacun $m \times n$ sites, alors

$$L_{2^{mn} \times 2^{mn}}^{(3)} = [L(\zeta, \xi)] = \begin{pmatrix} L(\zeta^1, \xi^1) & \dots & L(\zeta^1, \xi^j) & L(\zeta^1, \xi^{j+1}) & \dots & L(\zeta^1, \xi^{2^{mn}}) \\ & & \dots & \dots & & \dots \\ L(\zeta^i, \xi^1) & \dots & L(\zeta^i, \xi^j) & L(\zeta^i, \xi^{j+1}) & \dots & L(\zeta^i, \xi^{2^{mn}}) \\ L(\zeta^{i+1}, \xi^1) & \dots & L(\zeta^{i+1}, \xi^j) & L(\zeta^{i+1}, \xi^{j+1}) & \dots & L(\zeta^{i+1}, \xi^{2^{mn}}) \\ & & \dots & \dots & & \dots \\ L(\zeta^{2^{mn}}, \xi^1) & \dots & L(\zeta^{2^{mn}}, \xi^j) & L(\zeta^{2^{mn}}, \xi^{j+1}) & \dots & L(\zeta^{2^{mn}}, \xi^{2^{mn}}) \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

La matrice de transfert du réseau cubique est formée des éléments

$$\begin{aligned} L(\zeta, \zeta') &= \exp[-\beta X_1(\zeta, \zeta')] \exp[-\beta X_2(\zeta)] \\ &= \exp\left[\beta J_1 \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \mu_{i,j} \mu'_{i,j}\right] \exp\left[\beta J_2 \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \mu_{i,j} \mu_{i+1,j} + \beta J_3 \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \mu_{i,j} \mu_{i,j+1} + \beta H \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \mu_{i,j}\right], \end{aligned}$$

où nous avons omis l'indice désignant la troisième coordonnée spatiale. La matrice de transfert d'un réseau cubique ne comportant que deux lignes et deux colonnes par plan, donc avec $m = n = 2$, est de taille 16×16 . Nous renonçons par conséquent à en écrire explicitement un exemple.

La matrice de transfert de tout réseau de dimension supérieure à un revêt la forme (3.11) ou (3.15), qui ne diffèrent que par leur taille, laquelle croît rapidement avec la dimension du réseau.

3.1.3 Interprétation géométrique

Nous offrons à présent une interprétation géométrique intuitive de la notion de matrice de transfert afin d'en motiver l'intérêt.

La matrice de transfert $L(\square, \square')$ contient l'information relative à la paire (\square, \square') des unités de configuration du réseau, soit l'énergie totale de l'unité \square et l'énergie d'interaction entre les unités \square et \square' . Ses éléments recensent les états accessibles à ces unités en leur attribuant un poids statistique. Elle agit sur un vecteur représentant l'unité \square et produit un nouveau vecteur décrivant l'état de l'unité \square' .

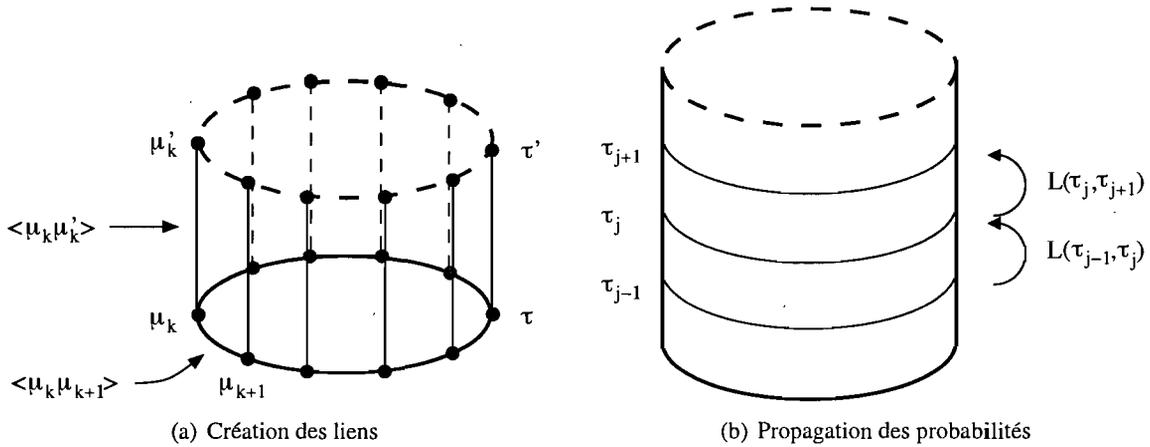


FIG. 3.2 – L'interprétation géométrique de la matrice de transfert

Lorsqu'elle est appliquée successivement aux unités de configuration voisines, la matrice de transfert crée les liens entre les sites qu'elles contiennent et propage à travers le réseau la probabilité d'un couplage entre les sites voisins. Ce procédé, qui explique le terme « matrice de transfert », est dépeint à la figure 3.2 pour un réseau carré replié sur un cylindre : la matrice de transfert crée d'abord les liens entre les sites du cercle τ et les liens entre les sites des cercles voisins τ et τ' , puis propage l'information d'un cercle de spins à l'autre le long du cylindre. Elle pourrait aussi agir sur les colonnes du cylindre plutôt que sur les lignes si l'on choisissait cette convention.

3.2 Calcul du spectre de la matrice de transfert

Nous entamons maintenant le calcul du spectre de la matrice de transfert du modèle d'Ising bi-dimensionnel sur un réseau carré périodique, démarche formant la clé de voûte de la résolution du pro-

blème.

3.2.1 Expression de la fonction de partition en termes de la matrice de transfert

Notons

$$\tau_j = \{\mu_{1,j}, \mu_{2,j}, \dots, \mu_{m,j}\}$$

la configuration de la colonne j du cylindre représenté à la figure 1.6(a) parmi les 2^m configurations possibles,

$$\tau_j \in [\tau] = \{\tau^k \mid 1 \leq k \leq 2^m\},$$

et posons

$$\{\tau\} = \{\tau_j \mid 1 \leq j \leq n\}$$

la configuration du réseau, c'est-à-dire l'ensemble de toutes les colonnes pour un état donné du système.

Sur le tore, définissons ensuite

$$X_1(\tau_j, \tau'_k) := -J_1 \sum_{i=1}^m \mu_{i,j} \mu'_{i,k}, \quad (3.16)$$

l'énergie d'interaction entre deux colonnes distinctes τ et τ' , puis

$$X_2(\tau_j) := -J_2 \sum_{i=1}^m \mu_{i,j} \mu_{i+1,j} - H \sum_{i=1}^m \mu_{i,j}, \quad (3.17)$$

l'énergie d'interaction au sein d'une colonne τ . L'énergie du système (1.9) se décompose alors en une somme de deux termes,

$$E_{m,n}(\{\tau\}) = \sum_{j=1}^n [X_1(\tau_j, \tau_{j+1}) + X_2(\tau_j)]; \quad (3.18)$$

de même pour sa fonction de partition,

$$Z_{m,n} = \sum_{\{\tau\}} e^{-\beta E(\{\tau\})} = \sum_{\{\tau\}} \exp \left(-\beta \sum_{j=1}^n [X_1(\tau_j, \tau_{j+1}) + X_2(\tau_j)] \right). \quad (3.19)$$

Afin de simplifier cette dernière expression, nous introduisons la matrice de transfert du réseau carré

$$\begin{aligned} L(\tau, \tau') &= \exp[-\beta X_1(\tau, \tau')] \exp[-\beta X_2(\tau)] \\ &= \exp \left[\nu_1 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu'_i \right] \exp \left[\nu_2 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu_{i+1} + B \sum_{i=1}^m \mu_i \right], \end{aligned} \quad (3.20)$$

où nous avons omis l'indice désignant la colonne puis posé pour la constante de couplage et le champ magnétique externe les changements de variable

$$\nu_i := \beta J_i, \quad B := \beta H. \quad (3.21)$$

En termes de cette matrice, la fonction de partition (3.19) devient

$$\begin{aligned}
Z_{m,n} &= \sum_{\{\tau\}} \prod_{j=1}^n \exp[-\beta X_1(\tau_j, \tau_{j+1})] \exp[-\beta X_2(\tau_j)] \\
&= \sum_{\{\tau\}} \prod_{j=1}^n L(\tau_j, \tau_{j+1}) \\
&= \sum_{\tau_1=\tau^1}^{\tau_1=2^m} \sum_{\tau_2=\tau^1}^{\tau_2=2^m} \cdots \sum_{\tau_n=\tau^1}^{\tau_n=2^m} L(\tau_1, \tau_2) L(\tau_2, \tau_3) \cdots L(\tau_{n-1}, \tau_n) L(\tau_n, \tau_1) \\
&= \sum_{\tau_1} L^n(\tau_1, \tau_1)
\end{aligned}$$

en vertu de l'argument exposé à la section précédente. Par les propositions 3 et 4, nous obtenons

$$Z_{m,n} = \text{tr}(L^n) = \sum_{k=1}^{2^m} \lambda_k^n, \quad (3.22)$$

où

$$\mathcal{S}(L) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2^m}\}$$

désigne le spectre de la matrice de transfert. Puisque pour toute valeur du paramètre $\nu_i \in \mathbb{R}$, chaque élément (3.20) de la matrice de transfert est strictement positif, le théorème de Frobenius–Perron assure que son spectre comporte une valeur propre maximale non dégénérée, c'est-à-dire que les valeurs propres peuvent être ainsi ordonnées après une éventuelle permutation des indices :

$$\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_{2^m}. \quad (3.23)$$

Nous avons établi le résultat suivant, qui joue un rôle crucial dans la résolution du problème posé par le modèle d'Ising.

Lemme 15

La fonction de partition du modèle d'Ising bidimensionnel sur un réseau carré s'écrit

$$Z_{m,n} = \text{tr}(L^n) = \sum_{k=1}^{2^m} \lambda_k^n(T, H, J_1, J_2, m), \quad (3.24)$$

où $\mathcal{S}(L) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2^m}\}$ désigne le spectre de la matrice de transfert L composée des éléments

$$L(\tau, \tau') = \exp \left[\nu_1 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu'_i \right] \exp \left[\nu_2 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu_{i+1} + B \sum_{i=1}^m \mu_i \right]. \quad (3.25)$$

La chaleur spécifique du système vaut alors

$$C = \frac{\partial}{\partial T} \left[kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\log \sum_{k=1}^{2^m} \lambda_k^n(T, H, J_1, J_2, m) \right) \right]. \quad (3.26)$$

En pratique, un matériau magnétique de taille macroscopique contient une quantité d'atomes avoisinant le nombre d'Avogadro, soit $N \simeq N_A \approx 10^{23}$, et comporte un nombre comparable de sites. Pour simplifier les calculs, nous pouvons donc considérer sans contrition la limite d'un nombre infini de sites ou, de façon équivalente, celle d'un pas de réseau infinitésimal. Dans cette limite, le réseau sous-jacent disparaît. La chaleur spécifique ne dépend plus alors du spectre entier de la matrice de transfert, mais uniquement de sa valeur propre maximale. Cette observation simplifiera considérablement l'évaluation des propriétés de la transition de phases.

Lemme 16

Dans la limite thermodynamique, l'énergie libre de Helmholtz par spin du modèle d'Ising sur réseau carré se réduit à

$$\psi = -kT \lim_{m \rightarrow \infty} m^{-1} \log \lambda_1(T, H, J_1, J_2, m) \quad (3.27)$$

et sa chaleur spécifique, à

$$c = \frac{\partial}{\partial T} \left[kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \log \lambda_1(T, H, J_1, J_2, m) \right) \right], \quad (3.28)$$

où λ_1 désigne la valeur propre maximale de la matrice de transfert L .

Démonstration

Par l'entremise de la propriété (3.23) des valeurs propres de la matrice de transfert, l'inégalité $\frac{\lambda_i}{\lambda_1} < 1$ est vérifiée pour tout $i \in \{2, 3, \dots, 2^m\}$, de telle sorte que dans la limite continue, l'énergie libre par spin vaut

$$\begin{aligned} \psi &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F}{mn} = \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{-kT}{mn} \log Z_{m,n} \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{-kT}{mn} \log \left[\lambda_1^n \left(1 + \sum_{k=2}^{2^m} \frac{\lambda_k^n}{\lambda_1^n} \right) \right] \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{-kT}{mn} \left\{ \log \lambda_1^n + \log \left(1 + \sum_{k=2}^{2^m} \frac{\lambda_k^n}{\lambda_1^n} \right) \right\} \\ &= -kT \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log \lambda_1}{m} - kT \lim_{m \rightarrow \infty} \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{mn} \log \left[1 + \sum_{k=2}^{2^m} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1} \right)^n \right] \right\} \\ &= -kT \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\log \lambda_1}{m} - kT \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log 1}{mn} \\ &= -kT \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\log \lambda_1(T, H, J, m)}{m} \end{aligned}$$

et l'énergie interne du système,

$$u = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{\psi}{kT} = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \log \lambda_1(T, H, J_1, J_2, m) \right).$$

(Nous avons calculé la limite sur le nombre de colonnes avant celle sur le nombre de lignes, mais cette convention arbitraire dictée par le choix des colonnes comme unité de configuration est sans conséquence

sur le résultat. La convention contraire eût régi l'ordre inverse pour les limites. Le calcul de la limite simultanée sur le nombre de lignes et de colonnes serait par contre délicat.) Il suffit de dériver l'énergie interne par rapport à la température pour recouvrer la chaleur spécifique. \square

Pour évaluer la fonction de partition d'un réseau fini, il suffit ainsi de déterminer le spectre de la matrice de transfert $L_{2^m \times 2^m}$ — et sa valeur propre maximale dans la limite d'un réseau infini. Cependant, ce calcul requiert la résolution d'un polynôme caractéristique d'ordre 2^m pour toute valeur de m ainsi que dans la limite continue $m \rightarrow \infty$, tâche que ne peuvent accomplir même les ordinateurs pourvus des algorithmes de manipulation symbolique les plus sophistiqués. On ne saurait donc aborder ce problème de front par la méthode usuelle de diagonalisation des matrices. Nous contournerons cette difficulté en introduisant un imposant attirail d'opérateurs algébriques qui permettront de factoriser la matrice de transfert en un produit tensoriel de matrices de plus petites dimensions. Après moult simplifications, le problème se réduira ultimement à la diagonalisation d'une matrice de taille 2×2 .

3.2.2 Formulation de la matrice de transfert en termes des tenseurs de Pauli

Afin de simplifier la manipulation de la matrice de transfert, nous l'exprimons en termes des tenseurs de Pauli définis précédemment. Pour ce faire, nous la décomposons d'abord en facteurs que nous examinerons ensuite individuellement.

Lemme 17

La matrice de transfert du réseau carré se factorise en un produit matriciel

$$L = V_3 V_2 V_1 \quad (3.29)$$

avec les facteurs

$$V_1(\tau, \tau') := \exp \left(v_1 \sum_{k=1}^m \mu_k \mu'_k \right) = \prod_{k=1}^m e^{v_1 \mu_k \mu'_k}, \quad (3.30)$$

$$V_2(\tau, \tau') := \prod_{l=1}^m \delta_{\mu_l, \mu'_l} \prod_{k=1}^m e^{v_2 \mu_k \mu_{k+1}}, \quad (3.31)$$

$$V_3(\tau, \tau') := \prod_{l=1}^m \delta_{\mu_l, \mu'_l} \prod_{k=1}^m e^{B \mu_k}. \quad (3.32)$$

Démonstration

Il suffit de calculer explicitement les éléments matriciels résultant du produit :

$$\begin{aligned} [V_3 V_2 V_1]_{\tau \tau'} &= \sum_{[\bar{\tau}]} \sum_{[\bar{\tau}]} V_3(\tau, \bar{\tau}) V_2(\bar{\tau}, \bar{\tau}) V_1(\bar{\tau}, \tau') \\ &= \sum_{[\bar{\tau}]} \sum_{[\bar{\tau}]} \left[\prod_{l=1}^m \delta_{\mu_l, \bar{\mu}_l} \prod_{k=1}^m \exp(B \mu_k) \right] \left[\prod_{l=1}^m \delta_{\bar{\mu}_l, \bar{\mu}_l} \prod_{k=1}^m \exp(v_2 \bar{\mu}_k \bar{\mu}_{k+1}) \right] \left[\prod_{k=1}^m \exp(v_1 \bar{\mu}_k \mu'_k) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{k=1}^m \exp(B \mu_k) \exp(\nu_2 \mu_k \mu_{k+1}) \exp(\nu_1 \mu_k \mu'_k) \\
&= L(\tau, \tau').
\end{aligned}$$

L'identité est bien vérifiée.¹ □

Cette factorisation naturelle sépare les trois contributions à l'énergie totale du système. La matrice V_1 comprend l'énergie résultant de l'interaction entre deux colonnes voisines du réseau, la matrice V_2 , l'énergie d'interaction entre sites voisins au sein d'une même colonne, et V_3 , l'énergie d'interaction entre le champ magnétique externe et les sites d'une colonne.

Nous exprimons ensuite ces matrices en termes des tenseurs de spin de Pauli

$$\sigma_{\alpha,k} = \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_{\alpha} \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2$$

introduits à la définition 7 afin d'en exploiter les propriétés.

Lemme 18

Avec le changement de variable

$$\varepsilon_i := \operatorname{atanh} e^{-2\nu_i}, \quad (3.33)$$

les matrices de factorisation deviennent

$$V_1 = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp\left(\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \sigma_{1,k}\right), \quad (3.34)$$

$$V_2 = \exp\left(\nu_2 \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1}\right), \quad (3.35)$$

$$V_3 = \exp\left(B \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k}\right). \quad (3.36)$$

Démonstration

Considérons la matrice

$$D_{2 \times 2} = e^{\nu} \sigma_0 + e^{-\nu} \sigma_1 = \begin{pmatrix} e^{\nu} & e^{-\nu} \\ e^{-\nu} & e^{\nu} \end{pmatrix},$$

qui n'est autre que la matrice de transfert (3.10) du modèle unidimensionnel en l'absence de champ magnétique externe. Comme nous le prouverons à l'instant, elle satisfait à la relation

$$D = \sqrt{2 \sinh 2\nu} \exp(\varepsilon \sigma_1). \quad (3.37)$$

¹ Dans son ouvrage *Mathematical Statistical Mechanics* [10], Colin Thompson écrit $L = V_1 V_2 V_3$ mais corrige implicitement cette erreur dans la suite du raisonnement.

Nous développons d'abord l'exponentielle en série de Taylor en invoquant l'idempotence des matrices de spin de Pauli,

$$\begin{aligned} e^{\varepsilon\sigma_1} &= \mathbb{I}_2 + \varepsilon\sigma_1 + \frac{1}{2!}(\varepsilon\sigma_1)^2 + \frac{1}{3!}(\varepsilon\sigma_1)^3 + \dots \\ &= \left(1 + \frac{1}{2!}\varepsilon^2 + \frac{1}{4!}\varepsilon^4 + \dots\right)\mathbb{I}_2 + \left(\varepsilon + \frac{1}{3!}\varepsilon^3 + \frac{1}{5!}\varepsilon^5 + \dots\right)\sigma_1 \\ &= (\cosh \varepsilon)\mathbb{I}_2 + (\sinh \varepsilon)\sigma_1, \end{aligned}$$

le réordonnement des termes de la série étant justifié par sa convergence uniforme. Par définition des fonctions hyperboliques,

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}, \quad \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad \tanh x = \frac{\sinh x}{\cosh x},$$

et en vertu de l'identité

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1,$$

le changement de variable (3.33) implique

$$2 \sinh 2\nu = e^{2\nu} - e^{-2\nu} = \frac{1}{\tanh \varepsilon} - \tanh \varepsilon = \frac{1}{\sinh \varepsilon \cdot \cosh \varepsilon}.$$

Par combinaison de ce résultat et de l'identité

$$\sinh 2x = 2 \sinh x \cosh x,$$

le changement de variable équivaut donc à

$$\sinh 2\varepsilon_i \cdot \sinh 2\nu_i = 1. \quad (3.38)$$

En appliquant ensuite cette nouvelle relation et les identités hyperboliques au premier facteur apparaissant dans l'expression (3.37), nous obtenons

$$\sqrt{2 \sinh 2\nu} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\sinh 2\varepsilon}} = \frac{1}{\sqrt{\sinh \varepsilon \cdot \cosh \varepsilon}},$$

puis, en rassemblant les précédents résultats,

$$\begin{aligned} \sqrt{2 \sinh 2\nu} \exp(\varepsilon\sigma_1) &= \frac{1}{\sqrt{\sinh \varepsilon \cdot \cosh \varepsilon}} (\mathbb{I}_2 \cosh \varepsilon + \sigma_1 \sinh \varepsilon) \\ &= \mathbb{I}_2 \sqrt{\coth \varepsilon} + \sigma_1 \sqrt{\tanh \varepsilon} \\ &= e^\nu \mathbb{I}_2 + e^{-\nu} \sigma_1 \\ &= D. \end{aligned}$$

La décomposition (3.37) est ainsi vérifiée.

Remarquons à présent le lien étroit unissant la matrice de factorisation V_1 à la matrice de transfert unidimensionnelle D . Puisque leurs éléments respectifs valent

$$V_1(\tau, \tau') = \prod_{k=1}^m e^{\nu_1 \mu_k \mu'_k} \quad \text{et} \quad D(\mu, \mu') = e^{\nu \mu_k \mu'_k},$$

la première correspond au produit tensoriel répété de la seconde avec $\nu = \nu_1$, nommément

$$V_1 = \bigotimes_{k=1}^m D = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \bigotimes_{k=1}^m e^{\varepsilon_1 \sigma_1}. \quad (3.39)$$

On peut effectivement exhiber le produit tensoriel par la forme

$$\begin{aligned} V_1 &= \left[e^{\nu_1 \mu_1 \mu'_1} \prod_{k=2}^m e^{\nu_1 \mu_k \mu'_k} \right]_{i,j} = \left(\frac{e^{\nu_1 \left[\prod_{k=2}^m e^{\nu_1 \mu_k \mu'_k} \right]_{i,j}}}{e^{-\nu_1 \left[\prod_{k=2}^m e^{\nu_1 \mu_k \mu'_k} \right]_{i,j}}} \middle| \frac{e^{-\nu_1 \left[\prod_{k=2}^m e^{\nu_1 \mu_k \mu'_k} \right]_{i,j}}}{e^{\nu_1 \left[\prod_{k=2}^m e^{\nu_1 \mu_k \mu'_k} \right]_{i,j}}} \right) \\ &= D \otimes \left[\prod_{k=2}^m e^{\nu_1 \mu_k \mu'_k} \right]_{i,j} = D \otimes \overset{m-2}{\dots} \otimes D, \end{aligned}$$

où les indices $i, j \in \{1, 2, \dots, 2^m\}$ désignent respectivement les ligne et colonne de la matrice et numérotent les configurations possibles du cercle de spins considéré. De la définition des tenseurs de Pauli et de la propriété 12 du produit tensoriel, il vient

$$\bigotimes_{k=1}^m e^{x \sigma_i} = \exp \left(\sum_{k=1}^m x \sigma_{i,k} \right) = \prod_{k=1}^m e^{x \sigma_{i,k}}, \quad (3.40)$$

ce qui, avec la relation (3.39), confirme l'identité (3.34) annoncée dans le lemme.

Posons ensuite

$$V'_3 := \exp \left(B \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k} \right) \quad \text{et} \quad V'_2 := \exp \left(\nu_2 \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1} \right)$$

en vue de vérifier les identités $V'_2 = V_2$ et $V'_3 = V_3$. D'une part, dans la base binaire \mathcal{B} des matrices D et V_1 , les matrices de factorisation V_2 et V_3 sont diagonales, puisque $V_2(\tau, \tau') = V_3(\tau, \tau') = 0$ dès que $\tau \neq \tau'$. D'autre part, la matrice de Pauli σ_3 étant diagonale, les tenseurs $\sigma_{3,k}$ et $\sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1}$ le sont aussi, de même que les sommes $\sum_{k=1}^m \sigma_{3,k}$ et $\sum_{k=1}^m \sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1}$. Par conséquent, les matrices V'_3 et V'_2 sont toutes deux diagonales. Or, la proposition 7 implique pour toute matrice diagonale l'identité

$$\exp \begin{pmatrix} x_1 & & & \\ & x_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{x_1} & & & \\ & e^{x_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{x_n} \end{pmatrix}.$$

Par un raisonnement semblable au précédent, nous pouvons donc factoriser la matrice V_3 en un produit tensoriel

$$V_3 = \left[\prod_{l=1}^m \delta_{\mu_l, \mu'_l} \prod_{k=1}^m e^{B \mu_k} \right]_{i,j} = \left(\frac{e^{B \left[\prod_{k=2}^m e^{B \mu_k} \right]_{i,j}}}{\mathbb{O}} \middle| \frac{\mathbb{O}}{e^{-B \left[\prod_{k=2}^m e^{B \mu_k} \right]_{i,j}}} \right) = \bigotimes_{k=1}^m \begin{pmatrix} e^B & 0 \\ 0 & e^{-B} \end{pmatrix} = \bigotimes_{k=1}^m e^{B \sigma_3}.$$

L'application à ce résultat de la relation (3.40) achève la démonstration de l'identité (3.36). Considérons enfin le cas de la matrice V_2 . Dans la base \mathcal{B} , puisque

$$\sigma_3 \otimes \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix},$$

le produit tensoriel $\sigma_{3,k}\sigma_{3,k+1}$ est diagonal et ses éléments revêtent la forme simple

$$\begin{aligned} (\sigma_{3,k}\sigma_{3,k+1})_{\mu,\mu'} &= (\mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes [\sigma_3 \otimes \sigma_3] \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2)_{\mu,\mu'} \\ &= \delta_{\mu_k, \mu'_k} \delta_{\mu_{k+1}, \mu'_{k+1}} \prod_{l \neq k, l \neq k+1} \delta_{\mu_l, \mu'_l} \times \begin{cases} 1 & \text{si } (\mu_k, \mu_{k+1}) = (1, 1) \\ -1 & \text{si } (\mu_k, \mu_{k+1}) = (1, -1) \\ -1 & \text{si } (\mu_k, \mu_{k+1}) = (-1, 1) \\ 1 & \text{si } (\mu_k, \mu_{k+1}) = (-1, -1) \end{cases} \\ &= \mu_k \mu_{k+1} \prod_l \delta_{\mu_l, \mu'_l}. \end{aligned}$$

L'équivalence des deux expressions de la matrice V_2 se déduit alors de l'identité

$$\exp \left(v_2 \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1} \right) = \prod_{k=1}^m \exp (v_2 \sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1}) = \left[\prod_{l=1}^m \delta_{\mu_l, \mu'_l} \prod_{k=1}^m e^{v_2 \mu_k \mu_{k+1}} \right]_{i,j},$$

ce qui parachève la démonstration. \square

Dans la généralité de sa formulation actuelle, le problème demeure non résolu. Avant de poursuivre, nous imposerons donc une hypothèse supplémentaire.

Hypothèse 1

Dorénavant, nous considérerons nul le champ magnétique externe, c'est-à-dire

$$H = kTB = 0.$$

Lemme 19

Avec cette hypothèse, la matrice de transfert se réduit à

$$L(\tau, \tau') = \exp \left[v_1 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu'_i \right] \exp \left[v_2 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu_{i+1} \right] \quad (3.41)$$

et se factorise en

$$L = V_2 V_1. \quad (3.42)$$

Démonstration

Ce résultat découle immédiatement de l'imposition de $B = 0$ dans les équations (3.25) et (3.36), qui entraîne $V_3 = \mathbb{I}_{2^m}$. \square

3.2.3 Interprétation physique des opérateurs de Pauli

L'apparition des tenseurs de Pauli dans les décompositions (3.34), (3.35) et (3.36) n'est pas fortuite, mais s'explique par des raisons physiques qu'il nous paraît instructif de préciser.

Examinons d'abord l'effet des matrices et tenseurs de Pauli sur les configurations de spins. Dans la représentation du nombre d'occupation de l'espace des positions, on associe un vecteur à chaque élément de la base usuelle

$$\mathcal{B}_m = \{|++\cdots++\rangle, |++\cdots+-\rangle, |++\cdots-+\rangle, \dots, |+-\cdots--\rangle, |--\cdots--\rangle\}$$

selon l'identification canonique

$$|+-\cdots-+\rangle \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dans cette représentation, la matrice $\sigma_1 : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ exerce une action remarquable : elle inverse le spin.² Elle produit de fait

$$\sigma_1 |\pm\rangle = |\mp\rangle \quad (3.43)$$

puisque

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

L'effet de la seconde matrice de Pauli est analogue, à un facteur multiplicatif près, soit

$$\sigma_2 |\pm\rangle = \pm i |\mp\rangle, \quad (3.44)$$

tandis que la troisième matrice n'inverse pas le spin mais mesure son signe,

$$\sigma_3 |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle. \quad (3.45)$$

Les tenseurs de Pauli

$$\sigma_{\alpha,k} = \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \overbrace{\sigma_{\alpha}}^k \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2$$

agissent sur le spin en position k comme la matrice de Pauli correspondante σ_{α} sans affecter les autres spins, chaque matrice du produit tensoriel agissant indépendamment des autres sur le spin qui lui est associé. Par exemple, pour $m = 3$,

$$\sigma_{2,2,3} |+-\rangle = (\mathbb{I}_2 \otimes \sigma_2 \otimes \mathbb{I}_2) \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \left[\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i |+-\rangle.$$

Ces observations permettent d'expliquer l'apparition des tenseurs de Pauli dans les décompositions du lemme 18. Chacune des matrices $\sigma_{3,k}$ est associée à l'unique site k d'une colonne donnée du

² Cette observation ne devrait pas étonner le lecteur averti, puisque nous avons précisément défini les matrices de Pauli par leur expression matricielle dans la représentation du nombre d'occupation.

réseau et recense avec l'occurrence appropriée l'ensemble des états accessibles à ce site, les éléments diagonaux représentant les différentes valeurs possibles du spin. Les produits matriciels $\sigma_{3,k}\sigma_{3,k+1}$ décrivent quant à eux l'interaction entre les sites k et $k+1$ au sein d'une même colonne du réseau. L'action de ces deux types de matrices est locale, car elle dépend de la configuration d'un unique site ou d'une paire de sites contigus.

Considérons en guise d'exemple le cas $m = 2$. Chaque colonne du réseau comprend alors deux spins pouvant chacun occuper les états $\mu_s = +1$ et $\mu_s = -1$. Les états μ_1 du premier spin sont énumérés sur la diagonale de la matrice

$$\sigma_{3,1,2} = \sigma_3 \otimes \mathbb{I}_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

tandis que les états μ_2 du second spin apparaissent dans un ordre différent sur la diagonale de

$$\sigma_{3,2,2} = \mathbb{I}_2 \otimes \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}.$$

Toutes les configurations $\mu_1 \otimes \mu_2$ de ces spins sont prises en compte par ces deux matrices, plus précisément par la comparaison des entrées correspondantes de ces deux matrices. Ainsi, leur somme recense tous les états accessibles au système avec leur dégénérescence respective,

$$\sum_{k=1}^m \sigma_{3,k} = \sigma_{3,1,2} + \sigma_{3,2,2} = \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & -2 \end{pmatrix},$$

de telle sorte que la matrice

$$V_3 = \begin{pmatrix} e^{2B} & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & e^{-2B} \end{pmatrix}$$

contient sur sa diagonale les facteurs de Gibbs associés à l'interaction entre le champ externe et les spins individuels. Similairement, les matrices

$$\sigma_{3,1,2}\sigma_{3,2,2} = \sigma_{3,2,2}\sigma_{3,1,2} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

expriment dans la base \mathcal{B} le produit des spins voisins d'une même colonne du réseau pour chaque confi-

guration possible. En sommant sur tous les sites de la colonne, on obtient la matrice

$$V_2 = \begin{pmatrix} e^{2\nu_2} & & & \\ & e^{-2\nu_2} & & \\ & & e^{-2\nu_2} & \\ & & & e^{2\nu_2} \end{pmatrix}$$

dont les éléments diagonaux correspondent aux facteurs de Boltzmann de l'interaction entre spins voisins. L'argument est identique pour toute valeur de m . Cette interprétation physique rend évidentes les identités énoncées dans le lemme 18.

3.2.4 Formulation de la matrice de transfert en termes des opérateurs de spin

Nous introduisons maintenant une algèbre d'opérateurs en termes desquels nous exprimerons la matrice de transfert.

Définition 8 (opérateurs de spin)

Pour toute valeur $k \in \{1, 2, \dots, m\}$, nous définissons les matrices

$$\rho_{k,m} := \left(\prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l,m} \right) \sigma_{3,k,m} = \left(\bigotimes_{l=1}^{k-1} \sigma_1 \right) \otimes \sigma_3 \otimes \left(\bigotimes_{l=k+1}^m \mathbb{I}_2 \right), \quad (3.46)$$

$$\varphi_{k,m} := \left(\prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l,m} \right) \sigma_{2,k,m} = \left(\bigotimes_{l=1}^{k-1} \sigma_1 \right) \otimes \sigma_2 \otimes \left(\bigotimes_{l=k+1}^m \mathbb{I}_2 \right), \quad (3.47)$$

$$\chi_m := \prod_{l=1}^m \sigma_{1,l,m} = \bigotimes_{l=1}^m \sigma_1, \quad (3.48)$$

de taille $2^m \times 2^m$. Nous omettons le dernier indice lorsque le contexte le permettra sans risque de confusion.

Les opérateurs ρ_k et φ_k furent proposés par Bruria Kaufman [6] dans sa simplification de la démarche de Lars Onsager. Ils constituent des réalisations particulières de l'algèbre d'opérateurs

$$\Gamma_k \Gamma_l + \Gamma_l \Gamma_k = 2\delta_{k,l} \mathbb{I}_{2^m},$$

laquelle est reliée aux représentations de dimension 2^m du groupe de rotation $\text{SO}(2m)$. Ce fait réduit considérablement la dimension du problème, donc sa complexité.

Lemme 20

En termes de ces nouveaux opérateurs, les matrices de factorisation s'écrivent

$$V_1 = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left(i\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_k \varphi_k \right),$$

$$V_2 = \exp(i\nu_2 \rho_1 \varphi_m \chi) \exp \left(-i\nu_2 \sum_{k=1}^{m-1} \rho_{k+1} \varphi_k \right).$$

Démonstration

Remarquons que les dimensions de toutes ces matrices concordent. Nous formons les produits des nouveaux opérateurs. Puisque les tenseurs de Pauli $\sigma_{\alpha,k}$ et $\sigma_{\beta,l}$ commutent dès que $k \neq l$ ou que $\alpha = \beta$, alors

$$\begin{aligned}\rho_k \varphi_k &= (\sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \cdots \sigma_{1,k-1}) \sigma_{3,k} (\sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \cdots \sigma_{1,k-1}) \sigma_{2,k} \\ &= \sigma_{3,k} \sigma_{2,k} \prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l}^2 \\ &= -i \sigma_{1,k}\end{aligned}\tag{3.49}$$

pour toute valeur $1 \leq k \leq m$, tandis que

$$\begin{aligned}\rho_{k+1} \varphi_k &= (\sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \cdots \sigma_{1,k}) \sigma_{3,k+1} (\sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \cdots \sigma_{1,k-1}) \sigma_{2,k} \\ &= \sigma_{3,k+1} \sigma_{1,k} \sigma_{2,k} \prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l}^2 \\ &= i \sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1}\end{aligned}$$

pour tout $1 \leq k \leq m-1$. Le terme à la frontière doit être traité séparément. Nous avons

$$\rho_1 \varphi_m = \sigma_{3,1} (\sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \cdots \sigma_{1,m-1}) \sigma_{2,m} = \sigma_{3,1} \sigma_{2,m} \prod_{l=1}^{m-1} \sigma_{1,l},$$

donc

$$i \rho_1 \varphi_m \chi = i \sigma_{3,1} \sigma_{2,m} \sigma_{1,m} \prod_{l=1}^{m-1} \sigma_{1,l}^2 = \sigma_{3,m} \sigma_{3,1}.$$

De ces résultats et de la relation de commutation

$$\begin{aligned}[\rho_1 \varphi_m \chi, \rho_{k+1} \varphi_k] &= [\sigma_{3,1} \sigma_{3,m}, \sigma_{3,1} \sigma_{3,2}] \delta_{k,1} + [\sigma_{3,1} \sigma_{3,m}, \sigma_{3,m-1} \sigma_{3,m}] \delta_{k,m-1} \\ &\quad + [\sigma_{3,1} \sigma_{3,m}, \sigma_{3,m} \sigma_{3,1}] \delta_{k,m} \\ &= \mathbb{O}\end{aligned}$$

suivent

$$\begin{aligned}V_1 &= (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left(\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \sigma_{1,k} \right) = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left(i \varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_k \varphi_k \right), \\ V_2 &= \exp \left(\nu_2 \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k} \sigma_{3,k+1} \right) = \exp (i \nu_2 \rho_1 \varphi_m \chi) \exp \left(-i \nu_2 \sum_{k=1}^{m-1} \rho_{k+1} \varphi_k \right),\end{aligned}$$

tel que prévu. □

Le gain apporté par ce changement de variables deviendra manifeste à la suite des deux prochains lemmes. Nous purgeons maintenant les précédentes expressions de l'encombrant terme frontalier.

Lemme 21

La matrice de transfert du réseau carré se décompose en deux termes selon

$$L = (2 \sinh 2v_1)^{m/2} \left[\frac{1}{2}(\mathbb{I}_{2^m} + \chi_m)V_+ + \frac{1}{2}(\mathbb{I}_{2^m} - \chi_m)V_- \right], \quad (3.50)$$

où nous posons

$$V_{\pm} = \exp \left(-iv_2 \sum_{k=1}^m \rho_{k+1} \varphi_k \right) \exp \left(i\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_k \varphi_k \right) \quad (3.51)$$

et adoptons pour V_{\pm} la convention

$$\rho_{m+1} = \mp \rho_1.$$

Démonstration

Soulignons d'abord les identités

$$\rho_k^2 = \varphi_k^2 = \chi^2 = \mathbb{I} \quad \text{et} \quad (i\rho_1 \varphi_m \chi)^2 = \mathbb{I}, \quad (3.52)$$

qui découlent immédiatement de la définition 8 et du précédent raisonnement. Développons ensuite le terme frontalier en série de puissances :

$$\begin{aligned} \exp(iv_2 \rho_1 \varphi_m \chi) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(v_2 \sigma_{3,1} \sigma_{3,m})^k}{k!} \\ &= \left(1 + \frac{v_2^2}{2!} + \frac{v_2^4}{4!} + \dots \right) \mathbb{I} + \left(v_2 + \frac{v_2^3}{3!} + \frac{v_2^5}{5!} + \dots \right) \sigma_{3,1} \sigma_{3,m} \\ &= \mathbb{I} \cosh v_2 + i\rho_1 \varphi_m \chi \sinh v_2 \\ &= \left[\frac{1}{2}(\mathbb{I} + \chi) + \frac{1}{2}(\mathbb{I} - \chi) \right] (\cosh v_2 + i\rho_1 \varphi_m \chi \sinh v_2). \end{aligned}$$

Puisque

$$\begin{aligned} [\rho_1 \varphi_m, \chi] &= \left[\sigma_{3,1} \sigma_{2,m} \prod_{k=1}^{m-1} \sigma_{1,k}, \prod_{l=1}^m \sigma_{1,l} \right] \\ &= \sigma_{3,1} \sigma_{2,m} \sigma_{1,m} - \sigma_{1,1} \sigma_{1,m} \sigma_{3,1} \sigma_{2,m} \sigma_{1,1} \\ &= -i\sigma_{3,1} \sigma_{3,m} - (-i\sigma_{2,1} i\sigma_{3,m} \sigma_{1,1}) \\ &= -i\sigma_{3,1} \sigma_{3,m} - (-i\sigma_{3,1} \sigma_{3,m}) \\ &= 0, \end{aligned}$$

nous pouvons factoriser l'opérateur χ selon

$$\exp(iv_2 \rho_1 \varphi_m \chi) = \frac{1}{2}(\chi + \mathbb{I}) (\cosh v_2 + i\rho_1 \varphi_m \sinh v_2) + \frac{1}{2}(\chi - \mathbb{I}) (-\cosh v_2 + i\rho_1 \varphi_m \sinh v_2),$$

si bien que le terme frontalier se réduit ultimement à l'expression

$$\exp(iv_2 \rho_1 \varphi_m \chi) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \chi) \exp(iv_2 \rho_1 \varphi_m) + \frac{1}{2}(\mathbb{I} - \chi) \exp(-iv_2 \rho_1 \varphi_m)$$

en vertu de la propriété

$$\begin{aligned}
(\rho_1 \varphi_m)^2 &= \left(\sigma_{3,1} \sigma_{2,m} \prod_{k=1}^{m-1} \sigma_{1,k} \right) \left(\sigma_{3,1} \sigma_{2,m} \prod_{l=1}^{m-1} \sigma_{1,l} \right) \\
&= (\sigma_{3,1} \sigma_{2,m}) \sigma_{1,1} (\sigma_{3,1} \sigma_{2,m}) \sigma_{1,1} \\
&= (i\sigma_{2,1})(\sigma_{2,m}^2)(i\sigma_{2,1}) \\
&= -\mathbb{I}
\end{aligned}$$

et des identités

$$\begin{aligned}
(-i\rho_1 \varphi_m)^{2n} &= \mathbb{I}, \\
(-i\rho_1 \varphi_m)^{2n+1} &= -i\rho_1 \varphi_m
\end{aligned}$$

qui en résultent pour toute valeur $n \in \mathbb{N}$. Il suffit alors de remplacer dans la matrice de transfert le terme frontalier par sa nouvelle expression. Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned}
L &= V_2 V_1 \\
&= \exp(i\nu_2 \rho_1 \varphi_m \chi) \exp\left(-i\nu_2 \sum_{k=1}^{m-1} \rho_{k+1} \varphi_k\right) \cdot (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp\left(i\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_k \varphi_k\right) \\
&= \frac{1}{2} (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \left[(\mathbb{I} + \chi) \exp(+i\nu_2 \rho_1 \varphi_m) + (\mathbb{I} - \chi) \exp(-i\nu_2 \rho_1 \varphi_m) \right] \times \\
&\quad \exp\left(-i\nu_2 \sum_{k=1}^{m-1} \rho_{k+1} \varphi_k\right) \exp\left(i\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_k \varphi_k\right) \\
&= \frac{1}{2} (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \left[(\mathbb{I} + \chi) \exp\left(-i\nu_2 \left\{ -\rho_1 \varphi_m + \sum_{k=1}^{m-1} \rho_{k+1} \varphi_k \right\}\right) + \right. \\
&\quad \left. (\mathbb{I} - \chi) \exp\left(-i\nu_2 \sum_{k=1}^m \rho_{k+1} \varphi_k\right) \right] \exp\left(i\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_k \varphi_k\right) \\
&= (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \left[\frac{1}{2} (\mathbb{I} + \chi) V_+ + \frac{1}{2} (\mathbb{I} - \chi) V_- \right],
\end{aligned}$$

ce qu'il fallait démontrer. □

Définition 9 (opérateurs de projection)

Nous posons $P_{\pm} := \frac{1}{2}(\mathbb{I}_{2^m} \pm \chi_m)$.

Considérons les matrices P_{\pm} de la précédente définition, qui apparaissent dans la décomposition (3.50) de la matrice de transfert. Puisque $P_{\pm}^2 = P_{\pm}$ et $P_{\pm}^{\dagger} = P_{\pm}$, elles représentent des opérateurs de projection sur les espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- respectivement associés aux matrices V_+ et V_- . Ces espaces sont par ailleurs orthogonaux, car $P_+ P_- = \mathbb{O}$.

Définition 10 (espaces de projection)

Les espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- sont les espaces de projection $\mathcal{E}_+, \mathcal{E}_- \subset \mathbb{R}^{2^m}$ pour lesquels

$$P_+|_{\mathcal{E}_+} = \mathbb{I}, \quad P_+|_{\mathcal{E}_-} = \mathbb{O}, \quad P_-|_{\mathcal{E}_-} = \mathbb{I}, \quad P_-|_{\mathcal{E}_+} = \mathbb{O}.$$

Nous prouverons que les espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- contiennent les vecteurs propres de V_+ et V_- , respectivement. Les valeurs propres de la matrice de transfert proviendront pour moitié du spectre de V_+ et pour moitié de celui de V_- .

3.2.5 Formulation de la matrice de transfert en termes des opérateurs de création et d'annihilation

Suivant l'interprétation du modèle d'Ising comme système fermionique proposée par Theodore Schultz, Daniel Mattis et Elliott Lieb [8], nous reformulons la matrice de transfert en termes d'opérateurs fermioniques de création et d'annihilation.

Définition 11 (opérateurs fermioniques de création et d'annihilation de particules)

Pour toute valeur $1 \leq k \leq m$, nous définissons l'opérateur

$$a_{k,m} := \frac{1}{2}(\varphi_{k,m} + i\rho_{k,m}) \quad (3.53)$$

et son adjoint hermitien

$$a_{k,m}^\dagger := \frac{1}{2}(\varphi_{k,m} - i\rho_{k,m}). \quad (3.54)$$

Nous omettrons au besoin le second indice dont sont affublés ces opérateurs ; le nombre m de lignes sera alors sous-entendu.

La dernière équation repose sur le fait que

$$\varphi_k^\dagger = \varphi_k \quad \text{et} \quad \rho_k^\dagger = \rho_k,$$

lequel découle de la propriété $\sigma_\alpha^\dagger = \sigma_\alpha$ des matrices de Pauli. Ces nouveaux opérateurs se réduisent à des combinaisons linéaires indépendantes et réversibles de quantités introduites précédemment. On retrouve ainsi

$$\begin{aligned} a_k + a_k^\dagger &= \varphi_k = (\sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \cdots \sigma_{1,k-1}) \sigma_{2,k}, \\ a_k - a_k^\dagger &= i\rho_k = i(\sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \cdots \sigma_{1,k-1}) \sigma_{3,k}. \end{aligned}$$

Ils se distinguent pourtant par des propriétés inestimables.

Lemme 22

Les opérateurs $a_{k,m}$ et $a_{k,m}^\dagger$ satisfont aux relations d'anticommutation des opérateurs fermioniques de création et d'annihilation de particules, soit

$$\begin{aligned} \{a_{k,m}, a_{l,m}^\dagger\} &= \delta_{k,l} \mathbb{I}_{2^m}, \\ \{a_{k,m}, a_{l,m}\} &= \mathbb{O}_{2^m}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

En particulier, ils sont nilpotents :

$$(a_{k,m})^2 = (a_{k,m}^\dagger)^2 = \mathbb{O}_{2^m}.$$

Démonstration

Considérons d'abord le premier anticommutateur. En développant les produits terme à terme, il vient

$$\begin{aligned} \{a_k, a_l^\dagger\} &= a_k a_l^\dagger + a_l^\dagger a_k \\ &= \frac{1}{4}(\varphi_k + i\rho_k)(\varphi_l - i\rho_l) + \frac{1}{4}(\varphi_l - i\rho_l)(\varphi_k + i\rho_k) \\ &= \frac{1}{4}(\varphi_k \varphi_l + \varphi_l \varphi_k + i\rho_k \varphi_l - i\rho_l \varphi_k - i\varphi_k \rho_l + i\varphi_l \rho_k + \rho_k \rho_l + \rho_l \rho_k) \\ &= \frac{1}{4}(\{\varphi_k, \varphi_l\} + i\{\rho_k, \varphi_l\} - i\{\varphi_k, \rho_l\} + \{\rho_k, \rho_l\}). \end{aligned}$$

Lorsque $k = l$, cet anticommutateur se réduit ainsi à

$$\{a_k, a_k^\dagger\} = \frac{1}{4}(2\varphi_k^2 + (i - i)\{\rho_k, \varphi_k\} + 2\rho_k^2) = \mathbb{I}$$

en vertu des identités (3.52). Pour $k \neq l$, posons sans perte de généralité $k < l$, le cas complémentaire étant symétrique. La relation d'anticommutation

$$\begin{aligned} \{\varphi_k, \varphi_l\} &= \varphi_k \varphi_l + \varphi_l \varphi_k \\ &= \sigma_{2,k} \sigma_{1,k} (\sigma_{1,k+1} \sigma_{1,k+2} \cdots \sigma_{1,l-1}) \sigma_{2,l} + \sigma_{1,k} \sigma_{2,k} (\sigma_{1,k+1} \sigma_{1,k+2} \cdots \sigma_{1,l-1}) \sigma_{2,l} \\ &= (-i\sigma_{3,k} + i\sigma_{3,k})(\sigma_{1,k+1} \sigma_{1,k+2} \cdots \sigma_{1,l-1}) \sigma_{2,l} \\ &= \mathbb{O} \end{aligned}$$

et son équivalent pour l'opérateur ρ_k de même que

$$\begin{aligned} \{\rho_k, \varphi_l\} &= \rho_k \varphi_l + \varphi_l \rho_k \\ &= (\sigma_{3,k} \sigma_{1,k} \sigma_{2,l} - \sigma_{1,k} \sigma_{2,l} \sigma_{3,k})(\sigma_{1,k+1} \sigma_{1,k+2} \cdots \sigma_{1,l-1}) \\ &= (i\sigma_{2,k} \sigma_{2,l} - i\sigma_{2,k} \sigma_{2,l})(\sigma_{1,k+1} \sigma_{1,k+2} \cdots \sigma_{1,l-1}) \\ &= \mathbb{O} \end{aligned}$$

impliquent alors

$$\{a_k, a_l^\dagger\} = \mathbb{O}.$$

Examinons à présent le second anticommutateur. Par un argument similaire au précédent, il se réduit à

$$\begin{aligned} \{a_k, a_l\} &= a_k a_l + a_l a_k \\ &= \frac{1}{4}(\varphi_k + i\rho_k)(\varphi_l + i\rho_l) + \frac{1}{4}(\varphi_l + i\rho_l)(\varphi_k + i\rho_k) \\ &= \frac{1}{4}(\{\varphi_k, \varphi_l\} + i\{\varphi_k, \rho_l\} + i\{\rho_k, \varphi_l\} - \{\rho_k, \rho_l\}). \end{aligned}$$

Pour $k \neq l$, nous retrouvons pour les mêmes raisons

$$\{a_k, a_l\} = \mathbb{O},$$

cependant que pour $k = l$, l'identité

$$\rho_k \varphi_k = \sigma_{3,k} \sigma_{2,k} = -i \sigma_{1,k} = -\varphi_k \rho_k$$

produit avec les propriétés (3.52) le résultat

$$\{a_k, a_k\} = \mathbb{O}.$$

En prenant l'adjoint hermitien de ces expressions, nous concluons de même que

$$\{a_k^\dagger, a_l^\dagger\} = \mathbb{O}$$

pour toutes valeurs $1 \leq k, l \leq m$. Ces deux dernières relations impliquent immédiatement la nilpotence des opérateurs a_k et a_k^\dagger . \square

Les opérateurs a_k^\dagger et a_k constituent donc respectivement des opérateurs de création et d'annihilation de particules. Nous exploiterons leurs propriétés pour simplifier l'expression de la matrice de transfert et en calculer le spectre.

Lemme 23

En termes des opérateurs de création et d'annihilation, les matrices de décomposition s'écrivent

$$V_\pm = \exp \left[v_2 \sum_{k=1}^m (a_{k+1}^\dagger - a_{k+1}) (a_k^\dagger + a_k) \right] \exp \left[-2\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \left(a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) \right], \quad (3.56)$$

avec la condition aux frontières

$$a_{m+1} = \mp a_1.$$

En outre,

$$\chi = (-i)^m \exp \left[i\pi \sum_{k=1}^m \left(a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) \right]. \quad (3.57)$$

Démonstration

Nous développons successivement les arguments des exponentielles apparaissant dans la matrice de décomposition (3.51). Nous obtenons d'abord

$$i\rho_{k+1} \varphi_k = (a_{k+1} - a_{k+1}^\dagger) (a_k + a_k^\dagger) = -(a_{k+1}^\dagger - a_{k+1}) (a_k^\dagger + a_k)$$

avec la condition aux frontières

$$i\rho_{m+1} \varphi_m = \mp i\rho_1 \varphi_m = \mp (a_1 - a_1^\dagger) (a_m + a_m^\dagger) = (a_{m+1} - a_{m+1}^\dagger) (a_m + a_m^\dagger),$$

puis

$$i\rho_k\varphi_k = (a_k - a_k^\dagger)(a_k + a_k^\dagger) = a_k a_k + (a_k a_k^\dagger - a_k^\dagger a_k) + a_k^\dagger a_k^\dagger = (a_k a_k^\dagger + a_k^\dagger a_k - 2a_k^\dagger a_k) = \mathbb{I} - 2a_k^\dagger a_k,$$

ce qui établit la relation (3.56). Enfin, puisque

$$\rho_k\varphi_k = -i\sigma_{1,k}, \quad (3.49)$$

nous avons

$$\exp\left(\frac{\pi}{2}\rho_k\varphi_k\right) = \cos\left(\frac{\pi}{2}\sigma_{1,k}\right) - i\sin\left(\frac{\pi}{2}\sigma_{1,k}\right) = \mathbb{I}\cos\frac{\pi}{2} - i\sigma_{1,k}\sin\frac{\pi}{2} = -i\sigma_{1,k},$$

ce qui implique

$$\chi = \prod_{k=1}^m \sigma_{1,k} = (-i)^m \prod_{k=1}^m \exp\left(\frac{\pi}{2}\rho_k\varphi_k\right) = (-i)^m \exp\left[i\pi \sum_{k=1}^m \left(a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2}\mathbb{I}\right)\right]$$

et prouve l'identité (3.57). \square

La décomposition (3.50) de la matrice de transfert en deux termes reliés à des espaces orthogonaux et l'introduction des opérateurs de création et d'annihilation permettent de simplifier davantage encore l'expression de la fonction de partition, dont le calcul exact représente l'ambition ultime de notre démarche.³

Lemme 24

La fonction de partition du modèle d'Ising bidimensionnel sur un réseau carré est donnée par la relation

$$Z_{m,n} = \frac{1}{2}(2\sinh 2\nu_1)^{mn/2} \left[\text{tr } V_+^n + \text{tr } V_-^n + \text{tr } \chi(V_+^n - V_-^n) \right] \quad (3.58)$$

avec la matrice

$$L^n = (2\sinh 2\nu_1)^{mn/2} \left[\frac{1}{2}(\mathbb{I} + \chi)V_+^n + \frac{1}{2}(\mathbb{I} - \chi)V_-^n \right]. \quad (3.59)$$

Démonstration

Cette forme particulière de la matrice L^n repose sur l'orthogonalité des projecteurs $P_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \chi)$ et sur le fait qu'ils commutent avec les matrices de décomposition V_\pm . Ces propriétés permettent en effet d'écrire

$$L^n = (P_+V_+ + P_-V_-)^n = (P_+V_+)^n + (2^n - 2)\mathbb{O} + (P_-V_-)^n = P_+^nV_+^n + P_-^nV_-^n = P_+V_+^n + P_-V_-^n$$

³ La matrice de décomposition V_3 résiste à toute réduction par cette transformation, ce qui explique que la présente méthode ne fournisse aucune solution au problème d'Ising pour un champ magnétique non nul. La présence d'un champ externe sape en effet la bilinéarité des opérateurs, condition essentielle à la réussite de la démarche. De plus, la factorisation par des opérateurs de création et d'annihilation ne s'avère utile que lorsque les spins au sein d'une unité de configuration peuvent être ordonnés et que leurs interactions sont confinées aux voisins immédiats dans cette ordonnance. Cette condition n'étant pas respectée pour les dimensions supérieures à deux, la méthode ne s'applique pas à ces cas.

par l'annulation de tous les termes comprenant à la fois P_+ et P_- puis par le réordonnement des matrices au sein des deux autres contributions. Nous démontrons maintenant ces deux propriétés. Nous avons d'abord

$$P_+P_- = \frac{1}{4}(\mathbb{I} + \chi)(\mathbb{I} - \chi) = \frac{1}{4}(\mathbb{I} - \chi + \chi - \chi^2) = \mathbb{O}.$$

Puisque

$$[P_{\pm}, V_{\pm}] = \left[\frac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \chi), V_{\pm} \right] = \pm \frac{1}{2}[\chi, V_{\pm}],$$

il suffit ensuite de vérifier que les exponentielles non identiques contenues dans les opérateurs χ et V_{\pm} commutent. Grâce aux conjugués

$$\chi(a_k + a_k^{\dagger})\chi^{-1} = \left(\prod_{i=1}^m \sigma_{1,i} \right) \left(\prod_{j=1}^{k-1} \sigma_{1,j} \cdot \sigma_{2,k} \right) \left(\prod_{l=1}^m \sigma_{1,l} \right) = \left(\prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l} \right) (\sigma_{1,k} \sigma_{2,k} \sigma_{1,k}) = -(a_k + a_k^{\dagger})$$

et

$$\chi(a_k - a_k^{\dagger})\chi^{-1} = \left(\prod_{i=1}^m \sigma_{1,i} \right) \left(i \prod_{j=1}^{k-1} \sigma_{1,j} \cdot \sigma_{3,k} \right) \left(\prod_{l=1}^m \sigma_{1,l} \right) = i \left(\prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l} \right) (\sigma_{1,k} \sigma_{3,k} \sigma_{1,k}) = -(a_k - a_k^{\dagger})$$

qui interviennent dans le commutateur, nous formons le produit

$$\chi(a_{k+1}^{\dagger} - a_{k+1})(a_k^{\dagger} + a_k)\chi^{-1} = (a_{k+1}^{\dagger} - a_{k+1})(a_k^{\dagger} + a_k),$$

lequel implique

$$\chi V_{\pm} \chi^{-1} = V_{\pm}.$$

Cette dernière identité équivaut par ailleurs à

$$[\chi, V_{\pm}] = \mathbb{O},$$

dont il s'ensuit

$$[P_{\pm}, V_{\pm}] = \mathbb{O}, \quad (3.60)$$

ce qui corrobore la relation (3.59). L'équation (3.58) découle alors immédiatement de la propriété

$$Z_{m,n} = \text{tr}(L_{2^m \times 2^m}^n)$$

et de la linéarité de la trace. □

3.2.6 Interprétation physique des opérateurs fermioniques

Les opérateurs χ , ρ_k , φ_k et a_k admettent eux aussi une édifiante interprétation physique, qui se déduit de l'action des matrices dont ils se composent.

Puisque chaque tenseur de Pauli $\sigma_{1,k}$ inverse le spin situé en position k d'une colonne donnée, la matrice

$$\chi = \sigma_{1,1}\sigma_{1,2}\cdots\sigma_{1,k-1}\sigma_{1,k}$$

inverse tous les spins de cette colonne. Elle admet pour vecteurs propres les combinaisons d'un état de spin $|\pm\pm\cdots\pm\rangle \in \mathcal{B}_m$ et de son « inverse » spinoriel, avec une valeur propre $\lambda_+ = 1$ lorsque les états portent le même signe et $\lambda_- = -1$ dans le cas contraire. Conséquemment, les opérateurs de projection $P_{\pm} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \chi)$ partagent les vecteurs propres de χ en deux ensembles de valeurs propres $\lambda = 0$ et $\lambda = 1$. Les espaces orthogonaux \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- contiennent les vecteurs formés d'un élément de la base \mathcal{B}_m et de son inverse, puisque

$$P_{\pm}v = v \pm \chi v \in \mathcal{E}_{\pm}$$

pour tout vecteur $v \in [\mathcal{B}_m]$. Ils correspondent ainsi aux espaces propres de χ . L'invariance de la matrice de transfert dans l'inversion de l'ensemble des spins du réseau, manifeste par l'équation (3.41), explique qu'elle commute avec l'opérateur χ , comme nous le calculâmes explicitement dans la démonstration du lemme 24.

La matrice

$$\rho_k = (\sigma_{1,1}\sigma_{1,2}\cdots\sigma_{1,k-1})\sigma_{3,k}$$

inverse les $k - 1$ premiers spins d'une colonne et multiplie le vecteur entier par le signe du spin situé en position k , tandis que

$$\varphi_k = (\sigma_{1,1}\sigma_{1,2}\cdots\sigma_{1,k-1})\sigma_{2,k}$$

inverse les k premiers spins et multiplie le vecteur par une constante complexe. Les opérateurs d'annihilation

$$a_k = \frac{1}{2}(\sigma_{1,1}\sigma_{1,2}\cdots\sigma_{1,k-1})(\sigma_{2,k} + i\sigma_{3,k})$$

et de création

$$a_k^{\dagger} = \frac{1}{2}(\sigma_{1,1}\sigma_{1,2}\cdots\sigma_{1,k-1})(\sigma_{2,k} - i\sigma_{3,k})$$

combinent ces deux derniers effets : ils inversent les $k - 1$ premiers spins puis remplacent la valeur du spin en position k par une combinaison linéaire des deux états. Cette action est schématisée à la figure 3.3.

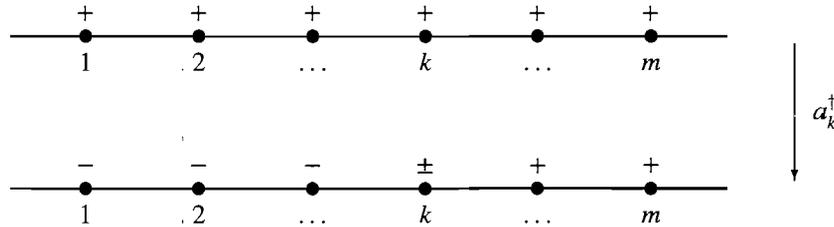


FIG. 3.3 – L'action de l'opérateur de création de particules sur une unité de configuration du réseau

3.2.7 Formulation de la matrice de transfert en termes des opérateurs de propagation d'onde et de dénombrement

Nous effectuons une transformation vers l'espace des impulsions depuis l'espace des positions afin d'exploiter l'invariance du système dans la rotation d'un cercle du tore. Les valeurs propres de la matrice de transfert seront calculées dans cet espace, dans la représentation du nombre d'occupation.

Définition 12 (opérateurs de propagation d'onde)

Les opérateurs de propagation d'onde résultent de la transformée de Fourier discrète des opérateurs de création et d'annihilation selon

$$\eta_{q,m} = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{k=1}^m e^{-iqk} a_{k,m} \quad \text{et} \quad \eta_{q,m}^\dagger = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{k=1}^m e^{iqk} a_{k,m}^\dagger \quad (3.61)$$

avec les indices

$$q \in Q_m^+ = \left\{ \frac{(2j-1)\pi}{m} \mid j = -\frac{m}{2} + 1, -\frac{m}{2} + 2, \dots, \frac{m}{2} - 1, \frac{m}{2} \right\} \quad (3.62)$$

pour les opérateurs apparaissant dans V_+ et

$$q \in Q_m^- = \left\{ \frac{2j\pi}{m} \mid j = -\frac{m}{2} + 1, -\frac{m}{2} + 2, \dots, \frac{m}{2} - 1, \frac{m}{2} \right\} \quad (3.63)$$

pour ceux de V_- , lorsque le nombre m de sites est pair. Des définitions similaires existent lorsqu'il est impair.

Cette transformée de Fourier accomplit une transition de l'espace des positions à l'espace des impulsions. La phase complexe $e^{\pm i\pi/4}$ n'apparaît dans la définition 12 que pour rendre les coefficients finaux réels. Les domaines Q_m^+ et Q_m^- du paramètre de la transformée de Fourier sont imposés par les conditions anticyclique $a_{m+1} = -a_1$ et cyclique $a_{m+1} = a_1$, respectivement. En effet, la relation

$$\sum_{j=-m/2+1}^{m/2} \exp \left[i(2j-1) \frac{(m+1)\pi}{m} \right] \eta_{q(j)} = - \sum_{j=-m/2+1}^{m/2} \exp \left[i(2j-1) \frac{\pi}{m} \right] \eta_{q(j)}$$

découle de l'identité

$$\exp \left[\frac{i(m+1)\pi}{m} \right] = e^{i\pi} \exp \left[\frac{i\pi}{m} \right] = - \exp \left[\frac{i\pi}{m} \right],$$

et similairement pour l'autre condition. La cardinalité de ces domaines, $|Q_m^\pm| = m$, implique en outre que les opérateurs de propagation d'onde η_q et η_q^\dagger sont deux fois plus nombreux que les opérateurs d'annihilation et de création, a_k et a_k^\dagger . Ce dédoublement sera compensé lors du calcul des valeurs propres par la rétention de la moitié du spectre de chacune des matrices V_\pm .

Hypothèse 2

Par souci de simplicité, nous supposons désormais que $m \in 2\mathbb{N}$, l'autre cas étant semblable.

Lemme 25

La restriction du domaine des transformées de Fourier discrètes au sous-ensemble des valeurs paires Q_m^+ ou impaires Q_m^- n'affecte pas ses propriétés usuelles. En effet, les relations d'orthogonalité

$$\sum_{k=1}^m e^{i(q-q')k} = m\delta_{q,q'} \quad \text{et} \quad \sum_{q \in Q_m^\pm} e^{iq(k-k')} = m\delta_{k,k'} \quad (3.64)$$

sont vérifiées pour toutes valeurs $q, q' \in Q_m^\pm$ et $k, k' \in \{1, 2, \dots, m\}$, respectivement.

Démonstration

Remarquons d'emblée que les ensembles Q_m^+ et Q_m^- contiennent respectivement des multiples impairs et pairs de $\frac{\pi}{m}$. Pour $N \geq 2$ et $t, t' \in \mathbb{N}$, définissons la quantité

$$S_N(t, t') = \sum_{n=0}^{N-1} \exp\left[i(t-t')\frac{2n\pi}{N}\right] = \sum_{n=1}^N \exp\left[i(t-t')\frac{2n\pi}{N}\right].$$

Lorsque $t = t' \pmod N$, chaque exponentielle se réduit à l'unité et la somme vaut alors $S_N = N$. Si $t \neq t' \pmod N$, la condition $e^{i(t-t')2\pi/N} \neq 1$ est respectée et la série géométrique s'annule :

$$S_N = \frac{1 - e^{i(t-t')2\pi}}{1 - e^{i(t-t')2\pi/N}} = 0.$$

Par conséquent, la relation d'orthogonalité

$$S_N(t, t') = N\delta_{t,t'} \quad (3.65)$$

est vérifiée pour toutes valeurs $t, t' \in \mathbb{N}$. Or, les sommes de Fourier (3.64) s'écrivent respectivement

$$\sum_{k=1}^m e^{i(q-q')k} = \sum_{k=1}^m \exp\left[i(j-j')\frac{2k\pi}{m'}\right] \quad \text{pour } q \in Q_m^\pm$$

et

$$\sum_{q \in Q_m^\pm} e^{iq(k-k')} = \begin{cases} \sum_{j=-m/2+1}^{m/2} \exp\left[i(k-k')\frac{(2j-1)\pi}{m}\right] & \text{pour } q \in Q_m^+ \\ \sum_{j=-m/2+1}^{m/2} \exp\left[i(k-k')\frac{2j\pi}{m}\right] & \text{pour } q \in Q_m^- \end{cases}$$

En portant l'identité (3.65) dans ces expressions, nous obtenons dans le premier cas

$$\sum_{k=1}^m e^{i(q-q')k} = S_m(q, q') = m\delta_{q,q'}$$

et dans le second, après le changement de variable $l = j - (-\frac{m}{2} + 1)$,

$$\sum_{q \in Q_m^\pm} e^{iq(k-k')} = \sum_{l=0}^{m-1} \exp\left[i(k-k')\frac{(2l-m+1)\pi}{m}\right] = \exp\left[i(k-k')\frac{(-m+1)\pi}{m}\right] S_m(k, k') = m\delta_{k,k'}$$

puis

$$\sum_{q \in Q_m^-} e^{iq(k-k')} = \sum_{l=0}^{m-1} \exp \left[i(k-k') \frac{(2l-m+2)\pi}{m} \right] = \exp \left[i(k-k') \frac{(-m+2)\pi}{m} \right] S_m(k, k') = m\delta_{k,k'},$$

ce qu'il fallait démontrer. \square

Lemme 26

Les transformées de Fourier inverses des opérateurs de propagation d'onde valent

$$a_{k,m} = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{q \in Q_m^+} e^{iqk} \eta_{q,m} \quad \text{et} \quad a_{k,m}^\dagger = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{q \in Q_m^+} e^{-iqk} \eta_{q,m}^\dagger, \quad (3.66)$$

où la sommation est entendue sur les ensembles définis précédemment.

Démonstration

En appliquant les relations d'orthogonalité du lemme 25 à la transformée de Fourier, nous obtenons

$$\sqrt{m} e^{i\pi/4} \sum_{q \in Q_m^+} e^{iqk} \eta_q = \sum_{k'=1}^m \sum_{q \in Q_m^+} e^{iq(k-k')} a_{k'} = \sum_{k'=1}^m m\delta_{k,k'} a_{k'} = m a_k.$$

En isolant l'opérateur d'annihilation puis en calculant son adjoint, nous recouvrons le résultat désiré. \square

L'intérêt de cette transformation réside dans ce qu'elle préserve les relations fermioniques d'anticommution, comme nous le montrons à l'instant, tout en facilitant le calcul du spectre de la matrice de transfert et en dévoilant le lien profond unissant le modèle d'Ising aux systèmes fermioniques.

Lemme 27

Les opérateurs $\eta_{q,m}$ et $\eta_{q,m}^\dagger$ sont aussi fermioniques, car

$$\begin{aligned} \{\eta_{q,m}, \eta_{p,m}^\dagger\} &= \delta_{p,q} \mathbb{I}_{2^m}, \\ \{\eta_{q,m}, \eta_{p,m}\} &= \mathbb{O}_{2^m}. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Ils sont donc nilpotents :

$$(\eta_{q,m})^2 = (\eta_{q,m}^\dagger)^2 = \mathbb{O}_{2^m}.$$

Démonstration

Il suffit d'appliquer les relations d'anticommution (3.55) à la définition 12 des transformées de Fourier.

Nous obtenons ainsi

$$\{\eta_q, \eta_p^\dagger\} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m e^{i(pk-ql)} \{a_k, a_l^\dagger\} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m e^{i(p-q)k} \mathbb{I} = \delta_{p,q} \mathbb{I}$$

et

$$\{\eta_q, \eta_p\} = \frac{-i}{m} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m e^{-i(pk+ql)} \{a_k, a_l\} = \mathbb{O}.$$

La nilpotence découle de cette dernière identité. \square

Nous procédons enfin à un dernier changement de variables pour les opérateurs fermioniques.

Définition 13 (opérateurs de dénombrement)

Pour toute valeur $q \in Q_m^\pm$, nous définissons la famille des opérateurs de dénombrement

$$\Omega_{1,q,m} := \eta_{-q,m} \eta_{q,m} + \eta_{q,m}^\dagger \eta_{-q,m}^\dagger, \quad (3.68)$$

$$\Omega_{2,q,m} := i(\eta_{-q,m} \eta_{q,m} - \eta_{q,m}^\dagger \eta_{-q,m}^\dagger), \quad (3.69)$$

$$\Omega_{3,q,m} := \eta_{q,m}^\dagger \eta_{q,m} + \eta_{-q,m}^\dagger \eta_{-q,m} - \mathbb{I}_{2^m}. \quad (3.70)$$

Dans la suite, le dernier indice ne sera pas toujours noté explicitement, mais demeurera sous-entendu.

L'opérateur $\Omega_{3,q}$, le plus significatif des opérateurs de dénombrement, mesure le nombre d'occupation pour la paire de secteurs tensoriels $(q, -q)$. Les deux autres opérateurs complètent l'algèbre de Lie et ne remplissent qu'un rôle secondaire.

Lemme 28

Les opérateurs de dénombrement satisfont aux relations de commutation et d'anticommutation

$$[\Omega_{a,q,m}, \Omega_{b,q',m}] = 2i\delta_{q,q'} \varepsilon_{abc} \Omega_{c,q,m}, \quad (3.71)$$

$$\{\Omega_{a,q,m}, \Omega_{b,q,m}\} = \mathbb{O}_{2^m}, \quad (3.72)$$

avec $a \neq b$ dans le dernier cas.

Démonstration

Il suffit d'appliquer les relations d'anticommutation (3.67) et la définition 13 aux six commutateurs distincts de l'équation (3.71) puis aux trois anticommutateurs distincts de l'équation (3.72). Nous détaillons trois exemples représentatifs de ces calculs et confions la démonstration des autres identités aux soins du lecteur. Dans un premier temps, nous vérifions

$$\begin{aligned} [\Omega_{1,q}, \Omega_{2,q}] &= i[\eta_{-q} \eta_q + \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-q} \eta_q - \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger] \\ &= i\{[\eta_{-q} \eta_q, \eta_{-q} \eta_q] - [\eta_{-q} \eta_q, \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger] + [\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-q} \eta_q] - [\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger]\} \\ &= 2i[\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-q} \eta_q] \\ &= 2i(\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \eta_q - \eta_{-q} \eta_q \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger) \\ &= 2i\{\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \eta_q - \eta_{-q} (\mathbb{I} - \eta_q^\dagger \eta_q) \eta_{-q}^\dagger\} \\ &= 2i\{\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \eta_q + \eta_q^\dagger \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q - \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger\} \\ &= 2i\{\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \eta_q + \eta_q^\dagger (\mathbb{I} - \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) \eta_q - \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger\} \\ &= 2i(\mathbb{O} + \eta_q^\dagger \eta_q - \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger) \\ &= 2i(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - \mathbb{I}) \\ &= 2i\Omega_{3,q}. \end{aligned}$$

Ensuite, puisque les opérateurs de propagation d'onde sont nilpotents, l'anticommutateur de ces mêmes opérateurs de dénombrement vaut

$$\begin{aligned}
\{\Omega_{1,q}, \Omega_{2,q}\} &= i \left(\left\{ \eta_{-q} \eta_q, \eta_{-q} \eta_q \right\} - \left\{ \eta_{-q} \eta_q, \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \right\} + \left\{ \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-q} \eta_q \right\} - \left\{ \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \right\} \right) \\
&= i \left(- \left\{ \eta_{-q} \eta_q, \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \right\} + \left\{ \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-q} \eta_q \right\} \right) \\
&= i \left(- \left\{ \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-q} \eta_q \right\} + \left\{ \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-q} \eta_q \right\} \right) \\
&= \mathbb{O},
\end{aligned}$$

comme il se doit. Nous évaluons enfin

$$\begin{aligned}
[\Omega_{1,q}, \Omega_{3,p}] &= \left[\eta_{-q} \eta_q + \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_p^\dagger \eta_p + \eta_{-p}^\dagger \eta_{-p} - \mathbb{1} \right] \\
&= \left[\eta_{-q} \eta_q, \eta_p^\dagger \eta_p \right] + \left[\eta_{-q} \eta_q, \eta_{-p}^\dagger \eta_{-p} \right] + \left[\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_p^\dagger \eta_p \right] + \left[\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger, \eta_{-p}^\dagger \eta_{-p} \right] \\
&= \left(\eta_{-q} \eta_q \eta_p^\dagger \eta_p - \eta_p^\dagger \eta_p \eta_{-q} \eta_q \right) + \left(\eta_{-q} \eta_q \eta_{-p}^\dagger \eta_{-p} - \eta_{-p}^\dagger \eta_{-p} \eta_{-q} \eta_q \right) \\
&\quad + \left(\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_p^\dagger \eta_p - \eta_p^\dagger \eta_p \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \right) + \left(\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_{-p}^\dagger \eta_{-p} - \eta_{-p}^\dagger \eta_{-p} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \right).
\end{aligned}$$

Puisque ces opérateurs de propagation d'onde anticommulent dès que $q \neq p$, le réordonnement des facteurs d'un terme du développement en un nombre pair de permutations n'affecte pas le signe de ce terme ; chaque commutateur s'annule donc indépendamment des autres, c'est-à-dire

$$[\Omega_{1,q}, \Omega_{3,p}] = \mathbb{O} \quad (3.73)$$

pour $q \neq p$. □

Si l'on considère que les opérateurs de dénombrement sont entièrement déterminés par leurs seules propriétés algébriques, réunies dans le lemme 28, la définition 13 induit une structure algébrique abstraite dont la forme matricielle dérivée des matrices de Pauli ne constitue alors qu'une représentation particulière. Selon cette interprétation, il existe ainsi pour ces opérateurs différentes représentations matricielles équivalentes préservant leurs propriétés algébriques. Nous présenterons prochainement l'une de ces représentations afin de les exprimer sous une forme simplifiée.

Entretemps, ces nouveaux opérateurs permettent une factorisation supplémentaire de la matrice de transfert.

Lemme 29

En termes des opérateurs de dénombrement, les matrices de décomposition se factorisent en

$$V_\pm = \prod_{q \in \mathcal{Q}_m^\pm, q > 0} U_{q,m}, \quad (3.74)$$

où nous avons défini les opérateurs

$$U_{q,m} := \exp \left[2\nu_2 \left(\Omega_{3,q,m} \cos q - \Omega_{1,q,m} \sin q \right) \right] \exp \left[-2\varepsilon_1 \Omega_{3,q,m} \right]. \quad (3.75)$$

Démonstration

Rappelons que d'après le lemme 23, ces matrices de décomposition valent

$$V_{\pm} = \exp \left[v_2 \sum_{k=1}^m (a_{k+1}^{\dagger} - a_{k+1}) (a_k^{\dagger} + a_k) \right] \exp \left[-2\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \left(a_k^{\dagger} a_k - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) \right]. \quad (3.56)$$

Nous développons successivement les arguments des exponentielles afin de les exprimer en termes des opérateurs de dénombrement. En usant des propriétés de la transformée de Fourier discrète, en particulier des relations d'orthogonalité garanties par le lemme 25, nous obtenons d'abord pour le second facteur

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m \left(a_k^{\dagger} a_k - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) &= \sum_{k=1}^m \left\{ \frac{1}{m} \left(\sum_{q \in Q_m^{\pm}} e^{-iqk} \eta_q^{\dagger} \right) \left(\sum_{q' \in Q_m^{\pm}} e^{iq'k} \eta_{q'} \right) - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right\} \\ &= \sum_{k=1}^m \left(\sum_{q, q' \in Q_m^{\pm}} \frac{e^{i(q'-q)k}}{m} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'} - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) \\ &= \sum_{q, q'} \delta_{q, q'} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'} - \frac{m}{2} \mathbb{I} \\ &= \sum_q \eta_q^{\dagger} \eta_q - \frac{m}{2} \mathbb{I} \\ &= \sum_{q>0} \eta_q^{\dagger} \eta_q + \sum_{q>0} \eta_{-q}^{\dagger} \eta_{-q} - \frac{m}{2} \mathbb{I} \\ &= \sum_{q>0} (\eta_q^{\dagger} \eta_q + \eta_{-q}^{\dagger} \eta_{-q} - \mathbb{I}) \\ &= \sum_{q>0} \Omega_{3, q}. \end{aligned}$$

Un développement analogue produit ensuite pour le premier facteur

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m (a_{k+1}^{\dagger} - a_{k+1}) (a_k^{\dagger} + a_k) &= \sum_{k=1}^m (a_{k+1}^{\dagger} a_k^{\dagger} + a_{k+1}^{\dagger} a_k - a_{k+1} a_k^{\dagger} - a_{k+1} a_k) \\ &= \sum_{k=1}^m \left(\frac{e^{-i\pi/2}}{m} \sum_{q, q' \in Q_m^{\pm}} e^{-i[q(k+1)+q'k]} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'}^{\dagger} + \frac{1}{m} \sum_{q, q' \in Q_m^{\pm}} e^{-i[q(k+1)-q'k]} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{m} \sum_{q, q' \in Q_m^{\pm}} e^{i[q(k+1)-q'k]} \eta_q \eta_{q'}^{\dagger} - \frac{e^{i\pi/2}}{m} \sum_{q, q' \in Q_m^{\pm}} e^{i[q(k+1)+q'k]} \eta_q \eta_{q'} \right) \\ &= \frac{1}{m} \sum_{q, q'} \sum_{k=1}^m \left(-i e^{-iq} e^{-i(q+q')k} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'}^{\dagger} + e^{-iq} e^{-i(q-q')k} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'} \right. \\ &\quad \left. - e^{iq} e^{i(q-q')k} \eta_q \eta_{q'}^{\dagger} - i e^{iq} e^{i(q+q')k} \eta_q \eta_{q'} \right) \\ &= \sum_{q, q'} \left(-i e^{-iq} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'}^{\dagger} \delta_{q, -q'} + e^{-iq} \eta_q^{\dagger} \eta_{q'} \delta_{q, q'} - e^{iq} \eta_q \eta_{q'}^{\dagger} \delta_{q, q'} - i e^{iq} \eta_q \eta_{q'} \delta_{q, -q'} \right) \\ &= \sum_q \left(-i e^{-iq} \eta_q^{\dagger} \eta_{-q}^{\dagger} + e^{-iq} \eta_q^{\dagger} \eta_q - e^{iq} \eta_q \eta_q^{\dagger} - i e^{iq} \eta_q \eta_{-q} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_q -i \left(e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger + e^{iq} \eta_q \eta_{-q} \right) + \sum_q \left(e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_q - e^{iq} \eta_q \eta_q^\dagger \right) \\
&= -i \sum_{q>0} \left(e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger + e^{iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger + e^{iq} \eta_q \eta_{-q} + e^{-iq} \eta_{-q} \eta_q \right) \\
&\quad + \sum_{q>0} \left(e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_q + e^{iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - e^{iq} \eta_q \eta_q^\dagger - e^{-iq} \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \right).
\end{aligned}$$

Par intercession des relations d'anticommutation (3.67) pour les opérateurs de propagation d'onde, ce facteur se réduit enfin à

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^m (a_{k+1}^\dagger - a_{k+1})(a_k^\dagger + a_k) &= -i \sum_{q>0} \left\{ (e^{-iq} - e^{iq}) \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger + (e^{-iq} - e^{iq}) \eta_{-q} \eta_q \right\} \\
&\quad + \sum_{q>0} \left\{ (e^{-iq} + e^{iq}) \eta_q^\dagger \eta_q - e^{iq} \mathbb{I} + (e^{iq} + e^{-iq}) \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - e^{-iq} \mathbb{I} \right\} \\
&= -i \sum_{q>0} \left(-2i \sin q \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger - 2i \sin q \eta_{-q} \eta_q \right) \\
&\quad + \sum_{q>0} \left(2 \cos q \eta_q^\dagger \eta_q + 2 \cos q \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 2 \cos q \mathbb{I} \right) \\
&= \sum_{q>0} \left(2 \cos q \Omega_{3,q} - 2 \sin q \Omega_{1,q} \right).
\end{aligned}$$

Du rassemblement de tous ces termes, il résulte

$$V_\pm = \exp \left[2\nu_2 \sum_{q>0} (\Omega_{3,q} \cos q - \Omega_{1,q} \sin q) \right] \exp \left[-2\varepsilon_1 \sum_{q>0} \Omega_{3,q} \right]. \quad (3.76)$$

En vertu de la propriété (3.71), les opérateurs $\Omega_{a,q}$ et $\Omega_{b,q'}$ commutent dès que $q \neq q'$. Or, cette condition est vérifiée pour tous les éléments d'une somme donnée de l'équation (3.76). Par conséquent, nous pouvons leur appliquer l'identité de Baker–Hausdorff et convertir l'exponentielle de ces sommes en un produit d'exponentielles, soit

$$V_\pm = \prod_{q>0} \exp \left[2\nu_2 (\Omega_{3,q} \cos q - \Omega_{1,q} \sin q) \right] \prod_{q>0} \exp \left[-2\varepsilon_1 \Omega_{3,q} \right].$$

En appliquant de nouveau l'identité de Baker–Hausdorff, nous regroupons enfin les facteurs partageant une même valeur du paramètre q . La décomposition énoncée dans le lemme s'ensuit. \square

3.2.8 Interprétation physique des opérateurs de propagation d'onde

Revenons sur l'interprétation physique des nouveaux opérateurs fermioniques.

Les opérateurs η_q et η_q^\dagger appliquent successivement à un état donné du système les opérateurs a_k ou a_k^\dagger pondérés par un poids $g_q(k) = \frac{e^{\pm i\pi/4}}{\sqrt{m}} e^{\pm i q k}$ et forment une combinaison linéaire de ces nouveaux états.

En raison de l'intercession de la transformée de Fourier, ils n'admettent pas une interprétation spinorielle aussi immédiate que les précédents opérateurs. Ce nonobstant, ils apportent un éclaircissement appréciable sur la nature fermionique du modèle d'Ising. En vertu des lemmes 28 et 30, que nous énoncerons dans les pages suivantes, la relation de commutation

$$[U_q, U_{q'}] = \mathbb{O}$$

est vérifiée pour tous paramètres $q, q' > 0$. On peut donc interpréter ce système comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques fermioniques découplés avec l'appariement exclusif des secteurs $q > 0$ et $q < 0$ correspondants. De plus, si $v_+, v_- \in \mathbb{C}^{2^m}$ sont des vecteurs propres de V_+ et V_- , respectivement, on peut démontrer l'équation algébrique

$$V_{\pm}(\eta_q^{\dagger} v_{\pm}) = \prod_{q' > 0} U_{q'} \eta_q^{\dagger} v_{\pm} = \prod_{q' > 0} ([U_{q'}, \eta_q^{\dagger}] + \eta_q^{\dagger} U_{q'}) v_{\pm} = (\mu + \lambda) \eta_q^{\dagger} v_{\pm},$$

laquelle implique que les vecteurs $\eta_q^{\dagger} v_{\pm}$ forment aussi des états propres de V_{\pm} . Ce fait garantit la compréhension de η_q^{\dagger} en tant qu'opérateur de création ou d'annihilation de particules, puisqu'il accroît ou réduit la valeur propre associée à l'état sur lequel il agit tout en préservant les propriétés de ce dernier. Puisque $(\eta_q^{\dagger})^2 = \mathbb{O}$, il n'existe qu'un seul état excité pour chaque tel opérateur, celui d'« impulsion » q . Sachant que $[\eta_q^{\dagger}, \eta_{q'}^{\dagger}] = \mathbb{O}$ pour $q \notin \{q', -q'\}$, chacun des états peut être excité indépendamment des autres. Ces remarques s'appliquent également à l'opérateur η_q . Dans cette perspective, l'opérateur du nombre d'occupation

$$\eta_q^{\dagger} \eta_q = \frac{1}{m} \sum_{k, k'=1}^m e^{iq(k-k')} a_k^{\dagger} a_{k'}$$

mesure le nombre d'états excités sur l'ensemble des sites d'une unité de configuration avec un poids $g_q(k, k') = \frac{1}{m} e^{iq(k-k')}$. Bien que remplissant un rôle comparable à celui des opérateurs d'impulsion coutumiers, les opérateurs η_q^{\dagger} et η_q n'en sont pas véritablement, puisqu'ils ne demeurent pas invariants dans la translation des sites, c'est-à-dire

$$T \eta_q^{\dagger} T^{-1} \neq \alpha_q \eta_q^{\dagger},$$

comme ils le devraient pour mériter ce titre. Une combinaison linéaire simple des opérateurs de propagation d'onde permettrait de recouvrer en partie les propriétés des opérateurs d'impulsion, mais nous nous en dispenserons.⁴

3.2.9 Représentation des opérateurs fermioniques dans l'espace des impulsions

Nous calculerons la trace de la matrice de transfert dans la représentation du nombre d'occupation de l'espace des impulsions, pour laquelle l'opérateur de dénombrement $\Omega_{3,q}$ est diagonal, plutôt que

⁴ À ce sujet, le lecteur intéressé consultera avec profit la référence [8].

dans la représentation du nombre d'occupation de l'espace des positions, pour laquelle les matrices U_q sont diagonales. Cette simplification est redevable à Colin Thompson [10].

Lemme 30

Il existe une base, nommée représentation du nombre d'occupation de l'espace des impulsions, dans laquelle les opérateurs de dénombrement revêtent la forme tensorielle

$$\Omega_{a,q} = \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \overbrace{\omega_{\pm,a}}^j \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4, \quad (3.77)$$

composée de $\frac{m}{2}$ termes, où les éléments

$$\omega_{+,a} := \begin{pmatrix} \sigma_a & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \omega_{-,a} := \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_a \end{pmatrix}, \quad (3.78)$$

associés respectivement aux espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- , apparaissent aux positions $j = \frac{1}{2} \left(\frac{mq}{\pi} + 1 \right)$ et $j = \frac{mq}{2\pi}$, avec $q > 0$. Dans cette représentation, l'opérateur $\Omega_{3,q}$ est diagonal.

Démonstration

Afin d'établir ce résultat, nous calculons le spectre de l'opérateur

$$\Omega_{3,q} = \eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - \mathbb{I}$$

en examinant séparément le polynôme caractéristique de chaque terme qui le compose, ce qui s'avère possible parce que les trois termes commutent. Pour $q > 0$, soient $N_{\pm q} := \eta_{\pm q}^\dagger \eta_{\pm q}$ les opérateurs du nombre d'occupation. Nous formons le polynôme $f(t) = t(t - 1)$, qui s'annule en $t = N_{\pm q}$:

$$\begin{aligned} f(N_{\pm q}) &= N_{\pm q}(N_{\pm q} - \mathbb{I}) \\ &= \eta_{\pm q}^\dagger \eta_{\pm q} \eta_{\pm q}^\dagger \eta_{\pm q} - \eta_{\pm q}^\dagger \eta_{\pm q} \\ &= \eta_{\pm q}^\dagger (-\eta_{\pm q}^\dagger \eta_{\pm q} + \mathbb{I}) \eta_{\pm q} - \eta_{\pm q}^\dagger \eta_{\pm q} \\ &= \mathbb{O}. \end{aligned}$$

Par construction et puisque $N_{\pm q} \notin \{\mathbb{O}, \mathbb{I}\}$, $f(t)$ est donc le polynôme minimal des matrices $N_{\pm q}$, lesquelles admettent conséquemment pour seules valeurs propres les racines de ce polynôme, soit $\lambda \in \{0, 1\}$. Nous montrons maintenant que ces valeurs apparaissent dans le spectre avec une même multiplicité algébrique en calculant leur trace. Nous écrivons d'abord

$$\begin{aligned} \text{tr}(N_q) &= \text{tr}(\eta_q^\dagger \eta_q) \\ &= \text{tr} \left(\left[\frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{k=1}^m e^{iqk} a_k^\dagger \right] \left[\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{l=1}^m e^{-iq l} a_l \right] \right) \\ &= \frac{1}{m} \sum_{k,l=1}^m e^{iq(k-l)} \text{tr}(a_k^\dagger a_l) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{m} \sum_{k,l=1}^m e^{iq(k-l)} \operatorname{tr} \left(\left[\frac{1}{2}(\varphi_k - i\rho_k) \right] \left[\frac{1}{2}(\varphi_l + i\rho_l) \right] \right) \\
&= \frac{1}{4m} \sum_{k,l=1}^m e^{iq(k-l)} \operatorname{tr} \{ \varphi_k \varphi_l + i\varphi_k \rho_l - i\rho_k \varphi_l + \rho_k \rho_l \}.
\end{aligned}$$

En vertu de la propriété 11 de la trace d'un produit tensoriel de matrices et de la nullité de la trace des matrices de Pauli, les traces de ces produits d'opérateurs s'annulent dès que $k \neq l$. À titre d'exemple,

$$\operatorname{tr}(\varphi_k \rho_l) = \operatorname{tr}(\sigma_2) \operatorname{tr}(\sigma_3) \prod_{j=1}^{m-2} \operatorname{tr}(\mathbb{I}_2) = 0.$$

La trace d'un opérateur du nombre d'occupation se réduit conséquemment aux valeurs particulières $k = l$, soit

$$\operatorname{tr}(N_q) = \frac{1}{4m} \sum_{k=1}^m \{ \operatorname{tr}(\varphi_k^2) + i \operatorname{tr}([\varphi_k, \rho_k]) + \operatorname{tr}(\rho_k^2) \}.$$

Or, puisque

$$\begin{aligned}
[\varphi_k, \rho_k] &= \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes [\sigma_3, \sigma_2] \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \\
&= \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes (-2i\sigma_1) \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2
\end{aligned}$$

et grâce à l'idempotence des matrices de Pauli, nous obtenons enfin

$$\operatorname{tr}(N_q) = \frac{1}{4} \left\{ 2 \cdot 2^m + 2 \operatorname{tr}(\sigma_1) \prod_{k=1}^{m-1} \operatorname{tr}(\mathbb{I}_2) \right\} = 2^{m-1},$$

tel que désiré. L'identité complémentaire

$$\operatorname{tr}(N_{-q}) = 2^{m-1}$$

est vérifiée par un calcul analogue, ce qui confirme l'équipartition du spectre de l'opérateur $\Omega_{3,q}$. Les matrices N_q et N_{-q} partagent ainsi les mêmes valeurs propres, mais associées à des vecteurs propres différents selon la correspondance $(1, 0, 1, 0) \longleftrightarrow (1, 0, 0, 1)$ dans la base des vecteurs propres communs et ce, indépendamment de l'ordre des éléments de la base. En effet, puisque ces matrices sont distinctes et simultanément diagonalisables, elles ne peuvent relier les mêmes valeurs propres et vecteurs propres. La dégénérescence du spectre réduit donc les permutations de l'ensemble $\{0, 0, 1, 1\}$ aux deux correspondances $(1, 1, 0, 0) \longleftrightarrow (1, 0, 1, 0)$ et $(1, 1, 0, 0) \longleftrightarrow (0, 0, 1, 1)$. Or, la seconde correspondance impliquerait $\mathcal{S}(\Omega_{3,q}) = \{0\}$, ce qui est impossible puisque les équations (3.71) et (3.72) entraîneraient alors $\Omega_{1,q} = \Omega_{2,q} = \Omega_{3,q} = \mathbb{O}$ pour toute valeur $q \in \mathcal{Q}_m^\pm$. La correspondance entre les valeurs propres est donc unique. D'après la définition du troisième opérateur de dénombrement, son spectre vaut donc $\mathcal{S}(\Omega_{3,q}) = \{1, -1, 0, 0\}$ avec une même multiplicité algébrique pour ces quatre valeurs. La représentation proposée dans le lemme décrit précisément ce fait puisque

$$\omega_{+,3} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \omega_{-,3} = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}.$$

Par construction, l'opérateur de dénombrement $\Omega_{3,q}$ est diagonal dans cette nouvelle représentation. Les matrices $\omega_{+,a}$ et $\omega_{-,a}$ sont mutuellement orthogonales afin d'assurer l'orthogonalité des espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- . D'autres représentations diagonales eussent toutefois été possibles.

Les deux autres opérateurs de dénombrement s'obtiennent du précédent par le truchement des relations de commutation du lemme 28. Puisque leurs éléments $\omega_{\pm,1}$ et $\omega_{\pm,2}$ contiennent des valeurs hors diagonale, ils ne sont pas diagonaux dans cette représentation.

Nous avons établi l'existence de la représentation diagonale (3.77) pour une valeur donnée de $q \in Q_m^\pm$. Il nous faut ensuite démontrer que cette factorisation tensorielle est possible simultanément pour toutes les valeurs de ce paramètre, c'est-à-dire qu'il existe une base commune à tous les q dans laquelle l'ordonnement d'un secteur tensoriel ne compromette pas la structure tensorielle des secteurs voisins. Ce résultat s'obtient par récurrence sur le paramètre q . Nous ne détaillerons pas le raisonnement. \square

Afin d'élucider l'origine de cette représentation diagonale, nous déterminons une expression des opérateurs de propagation d'onde η_q et η_q^\dagger dans cette même représentation. (Nous restreindrons notre étude à l'espace \mathcal{E}_+ , le cas de l'espace \mathcal{E}_- étant symétrique.) À l'instar des opérateurs de dénombrement, ils seront composés d'un produit tensoriel de la forme

$$\eta_{\pm q} = \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \tilde{\eta}_\pm \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4,$$

où les matrices $\tilde{\eta}_\pm$, de taille 4×4 , correspondent aux éléments $\omega_{\pm,a}$ de $\Omega_{a,q}$. Pour parvenir à cette expression, il suffit de trouver pour $\tilde{\eta}_\pm$ une réalisation matricielle de dimension 4 quelconque satisfaisant aux propriétés du lemme 27, puis de lui appliquer le changement de base unitaire diagonalisant l'opérateur hermitien

$$\tilde{\Omega}_3 = \tilde{\eta}_+^\dagger \tilde{\eta}_+ + \tilde{\eta}_-^\dagger \tilde{\eta}_- - \mathbb{I}_4.$$

Toutes les matrices unitaires commutant avec $\omega_{+,a}$ induisent un changement de base acceptable. Puisque de telles matrices dépendent de quatre paramètres réels, ces transformations existent en nombre infini et la réalisation résultante n'est pas uniquement définie. Nous en exhiberons une.⁵

En fait, nous connaissons déjà une telle réalisation de dimension 4, nommément celle fournie par les opérateurs de propagation d'onde dans le cas particulier $m = 2$ et $q = \pm \frac{\pi}{2}$ de l'espace des positions. Grâce aux définitions 12, 11 et 8, on montre aisément qu'ils valent

$$\eta_{\frac{\pi}{2},2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} - \frac{i}{4} & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} + \frac{i}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} - \frac{i}{4} & -\frac{1}{4} - \frac{i}{4} & \frac{i}{2} \\ -\frac{i}{2} & \frac{1}{4} + \frac{i}{4} & -\frac{1}{4} + \frac{i}{4} & 0 \\ -\frac{1}{4} - \frac{i}{4} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{4} + \frac{i}{4} \end{pmatrix}, \quad \eta_{-\frac{\pi}{2},2} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} + \frac{i}{4} & 0 & -\frac{i}{2} & \frac{1}{4} + \frac{i}{4} \\ 0 & -\frac{1}{4} + \frac{i}{4} & -\frac{1}{4} - \frac{i}{4} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} + \frac{i}{4} & \frac{1}{4} - \frac{i}{4} & 0 \\ -\frac{1}{4} - \frac{i}{4} & \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{4} - \frac{i}{4} \end{pmatrix}.$$

⁵ La règle de commutation (3.71) des opérateurs $-i\Omega_{a,q}$ définit, pour un indice $q \in Q_m^\pm$ fixé, une algèbre de Lie isomorphe à $\mathfrak{su}(2)$. On peut donc considérer que les valeurs matricielles qui leur sont associées dans les bases du nombre d'occupation de l'espace des positions et de l'espace des impulsions définissent deux représentations matricielles équivalentes de $\mathfrak{su}(2)$ de dimension 2^m . La structure algébrique des opérateurs η_q ne constituant pas une algèbre de Lie, nous parlerons pour ceux-ci de réalisations matricielles plutôt que de représentations matricielles.

L'opérateur de dénombrement

$$\Omega_{3,\frac{\pi}{2},2} = \eta_{\frac{\pi}{2},2}^\dagger \eta_{\frac{\pi}{2},2} + \eta_{\frac{-\pi}{2},2}^\dagger \eta_{\frac{-\pi}{2},2} - \mathbb{I}_4 = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

en résulte, dans l'espace des positions. Ces matrices satisfont aux relations d'anticommutation des opérateurs fermioniques, comme nous l'avons démontré dans le cas général. Par sa construction même, la matrice $\Omega_{3,\frac{\pi}{2},2}$ est hermitienne, donc diagonalisable par une matrice de changement de base unitaire, que l'on peut choisir

$$P = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & -\sqrt{2} \\ -1 & 1 & \sqrt{2} & 0 \\ -1 & 1 & -\sqrt{2} & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

La réalisation des opérateurs de propagation d'onde dans l'espace des impulsions dérive de l'application de cette transformation à leur réalisation dans l'espace des positions :

$$\begin{aligned} \tilde{\eta}_+ &= P^{-1} \eta_{\frac{\pi}{2},2} P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \tilde{\eta}_- &= P^{-1} \eta_{\frac{-\pi}{2},2} P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \tilde{\eta}_+^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \tilde{\eta}_-^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

L'imposition de la condition d'unitarité à la matrice P assure que les opérateurs d'annihilation et de création sont reliés par la même transformation, car

$$\tilde{\eta}_\pm^\dagger = (P^{-1} \eta_{\pm\frac{\pi}{2},2} P)^\dagger = P^\dagger \eta_{\pm\frac{\pi}{2},2}^\dagger (P^{-1})^\dagger = P^{-1} \eta_{\pm\frac{\pi}{2},2}^\dagger P.$$

Nous pourrions vérifier explicitement que ces matrices satisfont aux relations d'anticommutation du lemme 27. Nous nous contenterons toutefois de rappeler que ces relations sont préservées par tout changement de base unitaire. En colligeant les précédents résultats, nous recouvrons

$$\tilde{\Omega}_3 = \tilde{\eta}_+^\dagger \tilde{\eta}_+ + \tilde{\eta}_-^\dagger \tilde{\eta}_- - \mathbb{I}_4 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} = \omega_{+,3}.$$

Dans cette nouvelle réalisation, les opérateurs généraux de propagation d'onde sont engendrés par le produit tensoriel

$$\eta_{\pm q} = \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \tilde{\eta}_\pm \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4,$$

dans lequel l'opérateur $\tilde{\eta}_{\pm}$ apparaît à la position $j = \frac{1}{2} \left(\frac{mq}{\pi} + 1 \right)$. Ils ne sont pas diagonaux. Nous retrouvons ainsi l'expression

$$\Omega_{3,q} = \eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - \mathbb{I} = \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \omega_{\pm,3} \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4$$

annoncée dans le lemme 30.

Lemme 31

Dans la base de la représentation du nombre d'occupation de l'espace des impulsions, l'opérateur χ revêt la forme diagonale

$$\chi_{\pm} = \bigotimes_{q>0} \left(-e^{i\pi\omega_{\pm,3}} \right), \quad (3.79)$$

qui se réduit à

$$\chi_{\pm} = \bigotimes_{q>0} \pm \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

pour les espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- , respectivement.

Démonstration

Selon l'équation (3.57) et la démarche du lemme 29, cet opérateur s'écrit

$$\chi = (-i)^m \exp \left[i\pi \sum_{k=1}^m \left(a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2} \mathbb{I} \right) \right] = (-i)^m \exp \left[i\pi \sum_{q>0} \Omega_{3,q} \right].$$

Puisque les opérateurs de dénombrement $\Omega_{3,q}$ et $\Omega_{3,p}$ commutent pour tous $p, q > 0$, l'expression devient

$$\chi = (-i)^m \prod_{q>0} \exp \left(i\pi \Omega_{3,q} \right).$$

Dans l'espace des impulsions, l'opérateur χ prend donc la forme

$$\chi_{\pm} = (-i)^m \prod_{q>0} \exp \left[i\pi \left(\mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \omega_{\pm,3} \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \right) \right].$$

De la proposition 12, nous tirons ensuite les équations

$$\begin{aligned} \exp(A_{n \times n}) \otimes \mathbb{I}_m &= \exp(A_{n \times n} \otimes \mathbb{I}_m), \\ \mathbb{I}_n \otimes \exp(B_{m \times m}) &= \exp(\mathbb{I}_n \otimes B_{m \times m}), \end{aligned}$$

qui impliquent

$$\exp(\mathbb{I}_n \otimes M_{p \times p} \otimes \mathbb{I}_m) = \mathbb{I}_n \otimes \exp(M_{p \times p} \otimes \mathbb{I}_m) = \mathbb{I}_n \otimes \exp(M_{p \times p}) \otimes \mathbb{I}_m. \quad (3.80)$$

Grâce à cette identité, nous obtenons

$$\chi_{\pm} = (-i)^m \prod_{q>0} \left(\mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \exp[i\pi\omega_{\pm,3}] \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \right)$$

$$\begin{aligned}
&= (-i)^m \bigotimes_{q>0} \exp [i\pi \omega_{\pm,3}] \\
&= \bigotimes_{q>0} (-e^{i\pi \omega_{\pm,3}})
\end{aligned}$$

puisque le paramètre m est pair et que le produit tensoriel comporte $\frac{m}{2}$ facteurs. Enfin, pour l'espace \mathcal{E}_+ , l'argument de cette expression s'écrit

$$-e^{i\pi \omega_{+,3}} = -\exp \left[i\pi \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix},$$

tandis que sa valeur est opposée pour l'espace \mathcal{E}_- . \square

Nous pourrions poursuivre cette démarche afin d'exprimer les opérateurs a_k , φ_k et ρ_k dans la représentation de l'espace des impulsions. Ils n'y seraient toutefois pas tous diagonaux ni ne se factoriseraient en un produit tensoriel. Les précédents résultats suffiront à la résolution du problème.

Grâce à la forme simple des opérateurs de dénombrement $\Omega_{a,q}$ et $\Omega_{a,q}^\dagger$ dans l'espace des impulsions et à la décomposition introduite dans le lemme 29, nous factorisons à présent les matrices V_\pm en un produit tensoriel de matrices de taille 4×4 . Cette réduction draconienne de la dimension du problème constitue un progrès notable au détour duquel se profile enfin la silhouette évanescence d'une solution.

Lemme 32

Les matrices de décomposition se réduisent aux produits tensoriels

$$V_+ = \bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{+,2j-1} \quad \text{et} \quad V_- = \bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{-,2j}, \quad (3.81)$$

où nous avons défini les matrices $W_{\pm,k} \in \text{Mat}_{\mathbb{C}}(4,4)$ selon

$$W_{\pm,k} := \exp \left[2\nu_2 \left(\omega_{\pm,3} \cos \frac{k\pi}{m} - \omega_{\pm,1} \sin \frac{k\pi}{m} \right) \right] \exp \left[-2\varepsilon_1 \omega_{\pm,3} \right]. \quad (3.82)$$

Démonstration

Considérons le cas de l'espace \mathcal{E}_+ . D'après le lemme 29, nous avons

$$V_+ = \prod_{q>0} \exp \left[2\nu_2 \left(\Omega_{3,q} \cos q - \Omega_{1,q} \sin q \right) \right] \exp \left[-2\varepsilon_1 \Omega_{3,q} \right].$$

En appliquant l'identité (3.80) à la matrice de décomposition, il vient

$$\begin{aligned}
V_+ &= \prod_{q>0} \left(\mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \exp \left[2\nu_2 (\omega_{+,3} \cos q - \omega_{+,1} \sin q) \right] \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \right) \times \\
&\quad \left(\mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \exp \left[-2\varepsilon_1 \omega_{+,3} \right] \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{j=1}^{m/2} \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \exp \left[2\nu_2 \left(\omega_{+,3} \cos \frac{(2j-1)\pi}{m} - \omega_{+,1} \sin \frac{(2j-1)\pi}{m} \right) \right] \exp [-2\varepsilon_1 \omega_{+,3}] \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \\
&= \prod_{j=1}^{m/2} \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes W_{+,2j-1} \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4,
\end{aligned}$$

où les matrices différentes de l'identité apparaissent en position $j = \frac{1}{2} \left(\frac{mq}{\pi} + 1 \right)$ dans le produit tensoriel. Par la propriété 9.e de la multiplication tensorielle, nous obtenons enfin

$$V_+ = \bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{+,2j-1}.$$

La preuve pour la matrice V_- est en tous points semblable. \square

3.2.10 Valeurs propres de la matrice de transfert

Grâce à cette représentation diagonale, nous calculons enfin le spectre de la matrice de transfert, qui détermine entièrement la fonction de partition du modèle d'Ising, selon une nouvelle approche simplifiée.

Lemme 33

Le spectre des matrices $W_{\pm,k}$ vaut

$$S(W_{\pm,k}) = \{1, 1, e^{+\gamma_k}, e^{-\gamma_k}\}, \quad (3.83)$$

où nous avons posé

$$\cosh \gamma_k := \cosh 2\varepsilon_1 \cosh 2\nu_2 - \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m}. \quad (3.84)$$

Démonstration

Afin de déterminer le spectre des matrices $W_{\pm,k}$, nous calculons leur expression matricielle dans l'espace des impulsions. Nous traiterons le cas de l'espace \mathcal{E}_+ , l'autre cas étant symétrique.

En raison de l'idempotence des matrices de Pauli, le carré d'un élément $\omega_{+,a}$ vaut

$$\omega_{+,a}^2 = \begin{pmatrix} \sigma_a^2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix}$$

et son exponentielle,

$$\exp(x\omega_{+,a}) = \mathbb{I}_4 + \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} (\cosh x - 1) + \begin{pmatrix} \sigma_a & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \sinh x,$$

si bien que le deuxième facteur de la matrice $W_{+,k}$ revêt la forme

$$\exp(x\omega_{+,3}) = \left(\begin{array}{cc|cc} e^x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-x} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right).$$

Pour le premier facteur, les relations

$$\alpha \omega_{+,3} + \beta \omega_{+,1} = \left(\begin{array}{cc|cc} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \beta & -\alpha & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad \text{et} \quad (\alpha \omega_{+,3} + \beta \omega_{+,1})^2 = \left(\begin{array}{cc|cc} \alpha^2 + \beta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^2 + \beta^2 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

impliquent

$$\exp \left[x \left(\omega_{+,3} \cos \frac{k\pi}{m} - \omega_{+,1} \sin \frac{k\pi}{m} \right) \right] = \left(\begin{array}{cc|cc} \cosh x + \sinh x \cos \frac{k\pi}{m} & -\sinh x \sin \frac{k\pi}{m} & 0 & 0 \\ -\sinh x \sin \frac{k\pi}{m} & \cosh x - \sinh x \cos \frac{k\pi}{m} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

En rassemblant ces résultats, nous obtenons donc la matrice

$$W_{+,k} = \left(\begin{array}{cc|cc} e^{-2\varepsilon_1} \left[\cosh 2\nu_2 + \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right] & -e^{2\varepsilon_1} \sinh 2\nu_2 \sin \frac{k\pi}{m} & 0 & 0 \\ -e^{-2\varepsilon_1} \sinh 2\nu_2 \sin \frac{k\pi}{m} & e^{2\varepsilon_1} \left[\cosh 2\nu_2 - \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right] & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

puis la matrice correspondante

$$W_{-,k} = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & e^{-2\varepsilon_1} \left[\cosh 2\nu_2 + \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right] & -e^{2\varepsilon_1} \sinh 2\nu_2 \sin \frac{k\pi}{m} \\ 0 & 0 & -e^{-2\varepsilon_1} \sinh 2\nu_2 \sin \frac{k\pi}{m} & e^{2\varepsilon_1} \left[\cosh 2\nu_2 - \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right] \end{array} \right),$$

qui contiennent toutes deux sur leur diagonale un bloc identité et le bloc non symétrique

$$\widetilde{W}_k = \left(\begin{array}{cc|cc} e^{-2\varepsilon_1} \left[\cosh 2\nu_2 + \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right] & -e^{2\varepsilon_1} \sinh 2\nu_2 \sin \frac{k\pi}{m} & & \\ -e^{-2\varepsilon_1} \sinh 2\nu_2 \sin \frac{k\pi}{m} & e^{2\varepsilon_1} \left[\cosh 2\nu_2 - \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right] & & \end{array} \right). \quad (3.85)$$

Leur spectre est ainsi composé des valeurs propres respectives des deux blocs diagonaux indépendants.

Nous calculons donc le spectre du bloc \widetilde{W}_k en résolvant son polynôme caractéristique. Puisque le déterminant de cette matrice vaut

$$\det(\widetilde{W}_k) = \cosh^2 2\nu_2 - \sinh^2 2\nu_2 \left(\cos^2 \frac{k\pi}{m} + \sin^2 \frac{k\pi}{m} \right) = 1$$

et sa trace

$$\text{tr}(\widetilde{W}_k) = 2 \cosh 2\varepsilon_1 \cosh 2\nu_2 - 2 \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m},$$

son polynôme caractéristique s'écrit

$$\begin{aligned} \Delta_k(t) &= t^2 - (\text{tr} \widetilde{W}_k)t + \det \widetilde{W}_k \\ &= t^2 + 2 \left[-\cosh 2\varepsilon_1 \cosh 2\nu_2 + \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right] t + 1 \\ &= t^2 + 2z t + 1, \end{aligned} \quad (3.86)$$

où nous avons défini

$$z := \cosh 2\varepsilon_1 \cosh 2\nu_2 - \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_2 \cos \frac{k\pi}{m}.$$

Il admet les racines

$$\tilde{\gamma}_{k,\pm} = z \pm \sqrt{z^2 - 1}.$$

Puisque $\det(\bar{W}_k) = 1$, les valeurs propres de cette matrice forment des inverses multiplicatifs :

$$\tilde{\gamma}_{k,+} \tilde{\gamma}_{k,-} = \left(z + \sqrt{z^2 - 1}\right) \left(z - \sqrt{z^2 - 1}\right) = 1.$$

Elles portent donc le même signe. De plus, elles sont toutes deux réelles puisque $z \geq \cosh^2(\varepsilon_1 - \nu_2) > 1$, et positives car $\text{tr}(\bar{W}_k) > 0$. À la lumière de ces observations, nous pouvons ainsi poser

$$\tilde{\gamma}_{k,\pm} := e^{\pm\gamma_k}$$

avec

$$\cosh \gamma_k = \frac{e^{+\gamma_k} + e^{-\gamma_k}}{2} = \frac{\tilde{\gamma}_{k,+} + \tilde{\gamma}_{k,-}}{2} = z,$$

qui n'est autre que l'équation (3.84) du lemme.

Puisque le bloc identité \mathbb{I}_2 admet pour unique valeur propre l'unité, le spectre des matrices $W_{\pm,k}$ est bien

$$\mathcal{S}(W_{\pm,k}) = \{1, 1, e^{+\gamma_k}, e^{-\gamma_k}\}$$

pour toute valeur donnée du paramètre k . □

Lemme 34

Les spectres des matrices de décomposition valent

$$\mathcal{S}(V_+) = \left\{ \exp(\pm\gamma_{k_1} \pm \gamma_{k_2} \pm \cdots \pm \gamma_{k_p}) \mid k_i \in \{1, 3, 5, \dots, m-1\}, 1 \leq i \leq p, 0 \leq p \leq \frac{m}{2} \right\}, \quad (3.87)$$

$$\mathcal{S}(V_-) = \left\{ \exp(\pm\gamma_{k_1} \pm \gamma_{k_2} \pm \cdots \pm \gamma_{k_p}) \mid k_i \in \{2, 4, 6, \dots, m\}, 1 \leq i \leq p, 0 \leq p \leq \frac{m}{2} \right\} \quad (3.88)$$

avec une multiplicité algébrique $d(p) = 2^{m/2-p}$ pour chacune de ces valeurs propres. Ils contiennent respectivement les composantes impaires et paires de γ_l .

Démonstration

De l'application de la propriété 10 des valeurs propres d'un produit tensoriel aux factorisations

$$V_+ = \bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{+,2j-1} \quad \text{et} \quad V_- = \bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{-,2j}, \quad (3.81)$$

il suit que les valeurs propres de V_{\pm} sont composées du produit de $\frac{m}{2}$ valeurs propres prélevées dans le spectre de chacun des éléments W_l . Les équations (3.87) et (3.88) reflètent précisément ce fait. La valeur propre $\lambda = 1$ apparaît ainsi $d(0) = 2^{m/2}$ fois dans le spectre, tandis que chacune des $2 \binom{m/2}{1} = m$ valeurs

propres de la forme $\lambda = e^{\pm\gamma_k}$ survient avec une multiplicité $d(1) = 2^{m/2-1}$. En général, les $2^p \binom{m/2}{p}$ valeurs propres de la forme $\lambda = e^{\pm\gamma_{k_1} \pm \gamma_{k_2} \pm \dots \pm \gamma_{k_p}}$, avec $0 \leq p \leq \frac{m}{2}$, sont donc dégénérées $d(p) = 2^{m/2-p}$ fois. Le spectre contient donc, en tenant compte de leur multiplicité algébrique,

$$\sum_{p=0}^{m/2} 2^p \binom{m/2}{p} \cdot 2^{m/2-p} = 2^{m/2} \sum_{p=0}^{m/2} \binom{m/2}{p} = 2^m$$

valeurs propres, ce qui correspond à la taille des matrices V_{\pm} . □

Lemme 35

Le spectre de la matrice de transfert vaut

$$S(L) = \Lambda_+ \cup \Lambda_-$$

avec

$$\Lambda_+ = \left\{ \lambda_+ \mid \lambda_+ = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (\pm 1)_{2j-1}^* \gamma_{2j-1} \right] \right\}, \quad (3.89)$$

$$\Lambda_- = \left\{ \lambda_- \mid \lambda_- = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (\pm 1)_{2j}^* \gamma_{2j} \right] \right\}, \quad (3.90)$$

où chaque somme contient un nombre pair de signes négatifs.

Démonstration

En invoquant la commutativité des opérateurs de projection et des matrices de décomposition,

$$[P_{\pm}, V_{\pm}] = \mathbb{O}, \quad (3.60)$$

et le lemme 21, nous réordonnons les termes la matrice de transfert en

$$L = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} [V_+ P_+ + V_- P_-] \quad (3.91)$$

avec

$$P_{\pm} = \frac{1}{2} (\mathbb{I} \pm \chi_{\pm}).$$

En raison de leur orthogonalité, les opérateurs de projection divisent donc le spectre de la matrice de transfert en deux parts égales : seuls les vecteurs propres de V_+ qui sont simultanément vecteurs propres de P_+ avec une valeur propre $\lambda_{P_+} = 1$ (donc $\lambda_{\chi_+} = 1$) contribuent au spectre de L , de même pour V_- et P_- avec la valeur propre $\lambda_{P_-} = 1$ (donc $\lambda_{\chi_-} = -1$). Déterminons à présent lesquels des vecteurs propres de V_+ et V_- satisfont à cette condition. Soit $w \in \mathcal{V}(V_{\pm})$ un vecteur propre de V_+ ou V_- . D'après la proposition 10, il est formé du produit tensoriel

$$w = w_1 \otimes w_2 \otimes \dots \otimes w_k \otimes \dots \otimes w_{m/2}$$

des vecteurs propres $w_k \in \mathcal{V}(W_{\pm,k})$. L'action du projecteur P_{\pm} sur le vecteur w est déterminée par l'action de l'opérateur χ_{\pm} sur ce dernier et se réduit donc à l'application de la matrice

$$\chi_{\pm,k} := -e^{i\pi\omega_{\pm,3}} = \pm \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

à chacun des éléments tensoriels w_k , pour $k = 1, 2, \dots, m/2$. Puisque

$$W_{+,k} = \left(\begin{array}{c|c} \widetilde{W}_k & \\ \hline & \mathbb{I}_2 \end{array} \right) \quad \text{et} \quad W_{-,k} = \left(\begin{array}{c|c} \mathbb{I}_2 & \\ \hline & \widetilde{W}_k \end{array} \right),$$

les valeurs propres de chaque secteur tensoriel subissent la transformation

$$\mathcal{S}(W_{\pm,k}) = (1, 1, e^{\gamma_k}, e^{-\gamma_k}) \xrightarrow{\chi_{\pm,k}} (-1, -1, e^{\gamma_k}, e^{-\gamma_k}) = \mathcal{S}(\chi_{\pm,k} W_{\pm,k}) \quad (3.92)$$

dans les deux espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- . Du fait que les valeurs propres « maximales »

$$\lambda_+^* = \exp(\gamma_1 + \gamma_3 + \gamma_5 \cdots + \gamma_{m-1}) \in \mathcal{S}(V_+) \quad \text{et} \quad \lambda_-^* = \exp(\gamma_2 + \gamma_4 + \gamma_6 \cdots + \gamma_m) \in \mathcal{S}(V_-)$$

ne contiennent aucun facteur $\lambda = 1$ prélevé dans le spectre de $W_{\pm,k}$, les vecteurs propres associés satisfont à la condition précédemment énoncée, soit

$$\chi_+ w_+^* = w_+^* \quad \text{et} \quad \chi_- w_-^* = -w_-^*,$$

respectivement. Ils appartiennent donc au sous-espace propre de la matrice de transfert, de dimension $d = 1$, relié aux valeurs propres

$$[2 \sinh 2\nu_1]^{m/2} \lambda_+^* \in \mathcal{S}(L) \quad \text{et} \quad [2 \sinh 2\nu_1]^{m/2} \lambda_-^* \in \mathcal{S}(L).$$

Le spectre entier de la matrice de transfert s'obtient de ces deux quantités. La transformation (3.92) implique en effet que chaque suppression d'un facteur γ_k dans l'une des formes « maximales » λ_{\pm}^* et son remplacement par un facteur 1 produit un changement de signe de la valeur propre de χ_{\pm} pour le vecteur propre associé. Ainsi, l'appartenance d'une valeur propre

$$\lambda = \exp(\pm \gamma_{k_1} \pm \gamma_{k_2} \pm \cdots \pm \gamma_{k_p}) \in \mathcal{S}(V_{\pm})$$

au spectre de la matrice de transfert est caractérisée par le critère de parité

$$p = \frac{m}{2} \bmod 2. \quad (3.93)$$

Le spectre de la matrice de transfert se décompose donc en deux ensembles

$$\Lambda'_+ = \left\{ \exp(\pm \gamma_{k_1} \pm \gamma_{k_2} \pm \cdots \pm \gamma_{k_p}) \mid \left(k_i \in \{1, 3, 5, \dots, m-1\} \wedge p = \frac{m}{2} \bmod 2 \right), 1 \leq i \leq p, 0 \leq p \leq \frac{m}{2} \right\},$$

$$\Lambda'_- = \left\{ \exp(\pm \gamma_{k_1} \pm \gamma_{k_2} \pm \cdots \pm \gamma_{k_p}) \mid \left(k_i \in \{2, 4, 6, \dots, m\} \wedge p = \frac{m}{2} \bmod 2 \right), 1 \leq i \leq p, 0 \leq p \leq \frac{m}{2} \right\},$$

qui diffèrent par leur forme des ensembles Λ_+ et Λ_- annoncés dans le lemme. Ils coïncident pourtant, comme nous l'expliquons à l'instant. Les sommes des expressions (3.89) et (3.90) contiennent deux fois plus de termes que celles de (3.87) et (3.88), mais n'admettent qu'un nombre pair de signes négatifs et sont pondérées d'un facteur $\frac{1}{2}$. Or, dans les ensembles Λ_{\pm} , les valeurs propres sont répétées, car par définition $\gamma_{2m-k} = \gamma_k$. Les couples $(\gamma_k, \gamma_{2m-k})$ dont les signes coïncident s'additionnent donc, tandis que s'annulent ceux dont les signes diffèrent, puisque leur nombre est pair. Par suite, la relation

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (\pm 1)_{2j-1}^* \gamma_{2j-1} = \sum_{j=1}^{m/2} (\pm 1)_{2j-1} \gamma_{2j-1}$$

est vérifiée dans l'espace \mathcal{E}_+ , et la relation correspondante dans l'espace \mathcal{E}_- . La condition de parité imposée dans le lemme trouve précisément son utilité dans la réalisation de cette propriété remarquable. Nous avons donc établi

$$\Lambda'_{\pm} \equiv \Lambda_{\pm}$$

avec $\Lambda_+ \subset \mathcal{S}([2 \sinh 2\nu_1]^{m/2} V_+)$ et $\Lambda_- \subset \mathcal{S}([2 \sinh 2\nu_1]^{m/2} V_-)$. Nous confions à l'attention du lecteur la vérification de la coïncidence des multiplicités algébriques des valeurs propres correspondantes de ces ensembles. Enfin, puisque

$$|\mathcal{S}(L)| = |\Lambda_+| + |\Lambda_-| = 2^{m-1} + 2^{m-1} = 2^m,$$

les dimensions des spectres concordent. □

Lemme 36

Les valeurs propres maximales dans chacun des sous-espaces Λ_+ et Λ_- valent respectivement

$$\lambda_+^{(M)} = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m \gamma_{2j-1} \right], \quad (3.94)$$

$$\lambda_-^{(M)} = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m \gamma_{2j} \right], \quad (3.95)$$

et la valeur propre maximale de la matrice de transfert,

$$\lambda_1 = \lambda_+^{(M)}. \quad (3.96)$$

Démonstration

Puisque $\cosh \gamma_k \geq 1$, tous les termes γ_k apparaissant dans l'argument de la fonction exponentielle des équations (3.89) et (3.90) sont strictement positifs. Par conséquent, la valeur maximale de chacun de ces ensembles contient les $\frac{m}{2}$ facteurs γ_k affectés d'un signe positif, ce qu'énoncent les équations (3.94) et (3.95).

En vertu du théorème de Frobenius–Perron, l'une de ces deux valeurs propres est strictement supérieure à l'autre et non dégénérée. L'inégalité stricte est donc respectée pour toute valeur $m \in 2\mathbb{N}$. Par

continuité, il suffit ainsi de déterminer la valeur propre maximale dans la limite $m \rightarrow \infty$. Remarquons d'abord que pour $k, k+1 \neq 0 \pmod m$,

$$\lim_{m \rightarrow \infty} (\cosh \gamma_k - \cosh \gamma_{k+1}) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_2 \left[-\cos \frac{k\pi}{m} + \cos \frac{(k+1)\pi}{m} \right] = 0,$$

ce qui implique le comportement $\gamma_{2j} \sim \gamma_{2j-1}$ dans la limite thermodynamique. La fonction hyperbolique $\gamma_0 = \gamma_{2m}$ fait exception, puisque

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \cosh \gamma_0 = \cosh \gamma_0.$$

En raison de l'annulation de son facteur périodique, elle se réduit à

$$\begin{aligned} \cosh \gamma_0 &= \cosh 2\varepsilon_1 \cosh 2\nu_2 - \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_2 \\ &= \frac{1}{4} (e^{2\varepsilon_1} + e^{-2\varepsilon_1})(e^{2\nu_2} + e^{-2\nu_2}) + \frac{1}{4} (e^{2\varepsilon_1} - e^{-2\varepsilon_1})(e^{2\nu_2} - e^{-2\nu_2}) \\ &= \cosh 2(\varepsilon_1 - \nu_2). \end{aligned}$$

L'analyse détaillée de la contribution spectrale du sous-espace Λ_- démontre que la définition correcte de ce paramètre, tel qu'il apparaît dans les équations (3.90) et (3.95), est en fait

$$\gamma_0 = -2(\varepsilon_1 - \nu_2). \quad (3.97)$$

Ce choix est imposé pour des raisons physiques que nous éluciderons ultérieurement.⁶ La valeur propre γ_0 subit un changement de signe au point critique $\varepsilon_1 = \nu_2$, de telle sorte que

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \cosh \gamma_1 = \operatorname{acosh} [\cosh 2(\varepsilon_1 - \nu_2)] = \begin{cases} +\gamma_0 & \text{pour } \varepsilon_1 < \nu_2 \\ -\gamma_0 & \text{pour } \varepsilon_1 > \nu_2 \end{cases}.$$

Le rapport des valeurs propres maximales de chaque sous-espace vaut alors

$$\frac{\lambda_-^{(M)}}{\lambda_+^{(M)}} = \frac{\exp \left[\frac{1}{2} (\gamma_0 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{2m-2}) \right]}{\exp \left[\frac{1}{2} (\gamma_1 + \gamma_3 + \dots + \gamma_{2m-1}) \right]} = e^{(\gamma_0 - \gamma_1)/2} \prod_{j=1}^{m-1} e^{(\gamma_{2j} - \gamma_{2j+1})/2}.$$

En étudiant la distribution des valeurs propres, esquissée à la figure 3.5 pour un cas particulier, et en remarquant les inégalités

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{(\gamma_0 - \gamma_1)} e^{(\gamma_{2m-2} - \gamma_{2m-1})} < 2 \\ e^{(\gamma_2 - \gamma_3)} e^{(\gamma_{2m-4} - \gamma_{2m-3})} < 1 \\ e^{(\gamma_3 - \gamma_4)} e^{(\gamma_{2m-6} - \gamma_{2m-5})} < 1 \\ \dots \\ e^{(\gamma_{m-2} - \gamma_{m-1})} e^{(\gamma_{m+1} - \gamma_m)} < 1 \end{array} \right\},$$

⁶ Chacune des valeurs propres γ_k est uniquement définie et son signe doit être déterminé. Comme nous le verrons, le choix $\gamma_0 = +2(\varepsilon_1 - \nu_2)$ produirait une inversion des comportements souscritique et surcritique, qui sont connus empiriquement et numériquement. Alternativement, on pourrait se convaincre de la nécessité de ce choix en calculant numériquement la valeur propre minimale de la matrice de transfert en fonction de la température.

on peut montrer que ce produit tend vers l'unité même si le nombre de ses termes tend vers l'infini. Cette observation entraîne

$$\frac{\lambda_-^{(M)}}{\lambda_+^{(M)}} \sim \begin{cases} 1 - e^{-cm} & \text{pour } \varepsilon_1 < \nu_2 \\ e^{-2(\varepsilon_1 - \nu_2)} & \text{pour } \varepsilon_1 > \nu_2 \end{cases}$$

dans la limite thermodynamique. Dans les deux cas, l'inégalité

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\lambda_-^{(M)}}{\lambda_+^{(M)}} \leq 1$$

assure $\lambda_-^{(M)} < \lambda_+^{(M)}$ pour toute valeur finie de m . □

Les fonctions γ_k composant le spectre de la matrice de transfert sont tracées à la figure 3.4 en fonction de la température T et du paramètre cyclique $0 \leq k < 2m$. Toutes sont continues. Elles sont aussi positives, à l'exception de γ_0 , qui change de signe à la température critique. Dans la limite $m \rightarrow \infty$, les valeurs propres deviennent denses dans la région du plan délimitée par les bornes γ_1 et γ_m .

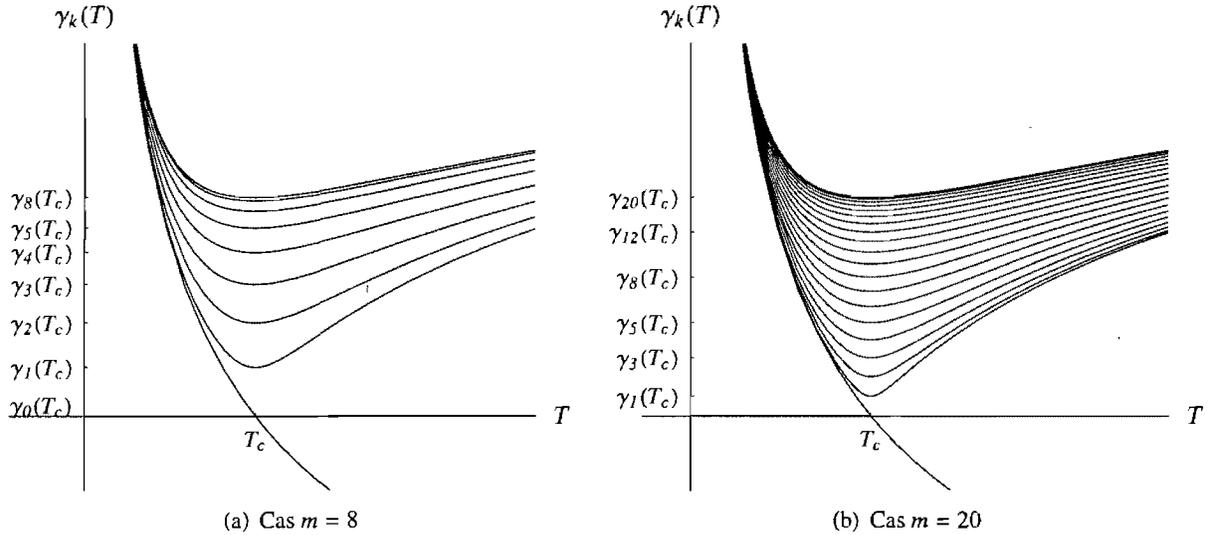


FIG. 3.4 – Le spectre de la matrice de transfert

La figure 3.5 illustre la distribution de ces mêmes fonctions γ_k à une température donnée en fonction du paramètre cyclique k . La fonction γ_0 s'annule à la température critique ; aux températures surcritiques, elle diffère nettement des autres fonctions par sa valeur négative. La distribution souscritique, qui n'est pas représentée, est semblable à la distribution critique, à cette différence que la fonction γ_0 y est strictement positive.

Nous montrerons que le changement de signe du paramètre γ_0 lorsque $\varepsilon_1 = \nu_2$ provoque une transition de phases. La valeur propre maximale de la matrice de transfert est asymptotiquement dégénérée lorsque $\varepsilon_1 \leq \nu_2$ et strictement non dégénérée dans le cas contraire. Ce phénomène est responsable de l'existence d'une interaction à longue portée dans le système.

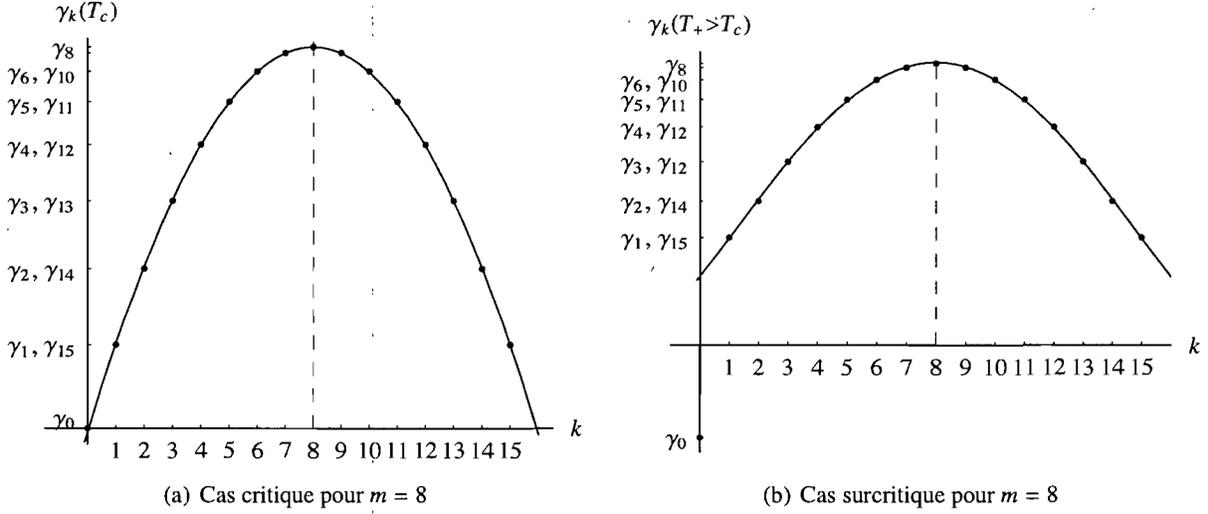


FIG. 3.5 – La distribution des valeurs propres pour une température fixée

3.3 Évaluation de la fonction de partition

3.3.1 La fonction de partition exacte

Nous exprimons la fonction de partition du modèle d'Ising en termes des paramètres fondamentaux du réseau, soit sa taille $m \times n$ et les constantes de couplage des spins v_1 et v_2 .

Théorème 37 (Lars Onsager, 1944)

La fonction de partition du modèle d'Ising bidimensionnel fini en l'absence de champ magnétique externe vaut

$$Z_{m,n} = 2^{m-1} (2 \sinh 2v_1)^{mn/2} \left[\prod_{j=1}^m \cosh \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) + \prod_{j=1}^m \sinh \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) + \prod_{j=1}^m \cosh \left(\frac{n\gamma_{2j}}{2} \right) + \prod_{j=1}^m \sinh \left(\frac{n\gamma_{2j}}{2} \right) \right]$$

avec

$$\gamma_k := + \operatorname{acosh} \left(\cosh 2\varepsilon_1 \cosh 2v_2 - \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2v_2 \cos \frac{k\pi}{m} \right). \quad (3.98)$$

Démonstration

En vertu du lemme 24, la fonction de partition dépend des traces de quatre matrices :

$$Z_{m,n} = \frac{1}{2} (2 \sinh 2v_1)^{mn/2} \left[\operatorname{tr} V_+^n + \operatorname{tr} V_-^n + \operatorname{tr} (\chi V_+^n) - \operatorname{tr} (\chi V_-^n) \right].$$

Le spectre des deux premières est donné par les équations (3.87) et (3.88), ou encore par le sous-ensemble (3.83). Les deux autres se décomposent en produits tensoriels de matrices plus simples, par exemple

$$\chi_+ V_+^n = \left[\bigotimes_{j=1}^{m/2} (-e^{i\pi\omega_{+,3}}) \right] \cdot \left[\bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{+,2j-1}^n \right] = \bigotimes_{j=1}^{m/2} (-e^{i\pi\omega_{+,3}} W_{+,2j-1}^n).$$

En raison de l'action particulière de la matrice diagonale $e^{i\pi\omega_{\pm,3}}$, le spectre des combinaisons de cette forme se réduit à

$$\mathcal{S}(-e^{i\pi\omega_{\pm,3}} W_{\pm,k}^n) = \{-1, -1, e^{+n\gamma_k}, e^{-n\gamma_k}\}.$$

Ces résultats entraînent

$$\begin{aligned} \text{tr } V_+^n &= \prod_{j=1}^{m/2} \text{tr } W_{2j-1}^n = \prod_{j=1}^{m/2} 2 \left[1 + \cosh(n\gamma_{2j-1}) \right] = \prod_{j=1}^{m/2} 4 \cosh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right), \\ \text{tr}(\chi_+ V_+^n) &= \prod_{j=1}^{m/2} \text{tr}(-e^{i\pi\omega_{+,3}} W_{+,2j-1}^n) = \prod_{j=1}^{m/2} 2 \left[-1 + \cosh(n\gamma_{2j-1}) \right] = \prod_{j=1}^{m/2} 4 \sinh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right), \end{aligned}$$

et par un calcul identique,

$$\begin{aligned} \text{tr } V_-^n &= \prod_{j=1}^{m/2} 4 \cosh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j}}{2} \right), \\ \text{tr}(\chi_- V_-^n) &= - \prod_{j=1}^{m/2} 4 \sinh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j}}{2} \right). \end{aligned}$$

La fonction de partition s'écrit donc

$$\begin{aligned} Z_{m,n} &= \frac{2^m}{2} (2 \sinh 2\nu_1)^{mn/2} \left[\prod_{j=1}^{m/2} \cosh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) + \prod_{j=1}^{m/2} \sinh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) \right] \\ &\quad + \left[\prod_{j=1}^{m/2} \cosh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j}}{2} \right) + \prod_{j=1}^{m/2} \sinh^2 \left(\frac{n\gamma_{2j}}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

En retenant la branche positive des fonctions hyperboliques γ_k , décrite par l'équation (3.98), et en invoquant leur périodicité, nous substituons

$$\cosh^2 \left(\frac{n\gamma_k}{2} \right) = \cosh \left(\frac{n\gamma_k}{2} \right) \cosh \left(\frac{n\gamma_{2m-k}}{2} \right) \quad \text{et} \quad \sinh^2 \left(\frac{n\gamma_k}{2} \right) = \sinh \left(\frac{n\gamma_k}{2} \right) \sinh \left(\frac{n\gamma_{2m-k}}{2} \right)$$

dans la précédente équation pour recouvrer le résultat annoncé. La nouvelle fonction γ_k est bien définie, puisque $\cosh \gamma_k \geq 1$ pour tout $k \in \mathbb{N}$. □

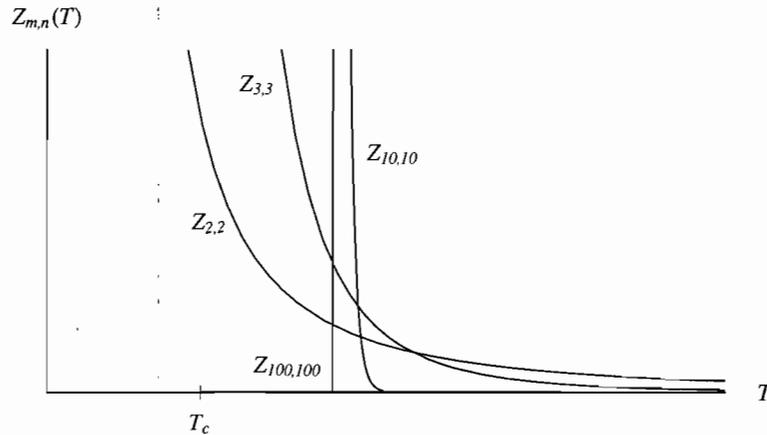


FIG. 3.6 – La fonction de partition exacte

La figure 3.6 représente les fonctions de partition discrètes $Z_{2,2}$, $Z_{3,3}$, $Z_{10,10}$ et $Z_{100,100}$ en fonction de la température. La fonction de partition tend vers un pic dans la limite $m, n \rightarrow \infty$.

3.3.2 La limite thermodynamique de la fonction de partition

Nous exprimons enfin la fonction de partition en termes des paramètres fondamentaux du réseau dans la limite thermodynamique.

Théorème 38 (Lars Onsager, 1944)

Dans la limite thermodynamique et pour un champ magnétique externe nul, la fonction de partition du modèle d'Ising bidimensionnel se comporte selon

$$Z_{m,n} \sim (2 \sinh 2\nu_1)^{mn/2} \exp \left(\frac{n}{2} \sum_{j=1}^m \gamma_{2j-1} \right) \left[1 + \prod_{j=1}^m \tanh \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) \right]. \quad (3.99)$$

Son énergie libre de Helmholtz par spin vaut

$$\psi = -kT \left\{ \frac{1}{2} \log(2 \sinh 2\nu_1) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^m \gamma_{2j-1} \right\}. \quad (3.100)$$

Démonstration

Dans un premier temps, l'application dans la limite $n \rightarrow \infty$ des propriétés $\gamma_{2j} \sim \gamma_{2j-1}$ et $2 \cosh x \sim 2 \sinh x \sim e^x$ à la fonction de partition du théorème 37 engendre

$$\begin{aligned} Z_{n,m} &\sim \frac{1}{2} (2 \sinh 2\nu_1)^{mn/2} \left[2 \prod_{j=1}^m 2 \cosh \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) + 2 \prod_{j=1}^m 2 \sinh \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) \right] \\ &\sim (2 \sinh 2\nu_1)^{mn/2} \exp \left(\sum_{j=1}^m \frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) \left[1 + \prod_{j=1}^m \tanh \left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Dans un deuxième temps, rappelons qu'en vertu du lemme 16, l'énergie libre ne dépend que de la valeur propre maximale de la matrice de transfert :

$$\psi = -kT \lim_{m \rightarrow \infty} m^{-1} \log \lambda_1.$$

Or nous avons précisé dans le lemme 36 cette valeur propre maximale, soit

$$\lambda_1 = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m \gamma_{2j-1} \right].$$

Nous retrouvons ainsi l'équation (3.100). Alternativement, le comportement limite (3.99) combiné à l'identité $|\tanh x| \leq 1$ entraîne aussi ce résultat. \square

Chapitre 4

La transition de phases

Après plus de deux mois de soins et de peines, recourir
à des moyens qui me soient étrangers ! me traîner servi-
lement sur la trace des autres, et triompher sans gloire !
Non, elle n'aura pas les plaisirs du vice et les honneurs
de la vertu. Ce n'est pas assez pour moi de la posséder,
je veux qu'elle se livre.

— Pierre Choderlos de Laclos, *Les liaisons dangereuses*

Ce chapitre décrit la transition de phases subie par le modèle d'Ising bidimensionnel sur un réseau carré et en expose les propriétés. Les calculs, qui reprennent essentiellement la démarche de Colin Thompson [10], seront esquissés brièvement.

4.1 Les propriétés thermodynamiques du système

Nous exprimons d'abord l'énergie libre, l'énergie interne et la chaleur spécifique du système en termes des variables macroscopiques et des paramètres du réseau.

Jusqu'à présent, nous avons traité simultanément les cas ferromagnétique et antiferromagnétique. Nous restreindrons dorénavant notre analyse au premier cas, qui exhibe une transition de phases.¹

Hypothèse 3

Nous supposons que les constantes de couplage horizontale et verticale des spins sont identiques et strictement positives, c'est-à-dire $J_1 = J_2 = J > 0$ ou encore $\nu_1 = \nu_2 = \nu > 0$.

¹ On peut démontrer que les propriétés d'un système antiferromagnétique non frustré, c'est-à-dire qui possède un état d'énergie minimale simple et périodique, sont identiques à celles d'un système ferromagnétique. Il existe de fait un isomorphisme entre les états des deux systèmes.

Selon cette hypothèse, l'élément constitutif des valeurs propres non unitaires des matrices $W_{\pm, k}$ se réduit à

$$\cosh \gamma_k = \cosh 2\nu \cosh 2\varepsilon - \cos \frac{k\pi}{m} = \cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos \frac{k\pi}{m} \quad (4.1)$$

grâce à l'identité (3.33) ou (3.38). En effet, l'équation

$$\cosh^2 2\varepsilon = 1 + \sinh^2 2\varepsilon = 1 + \frac{1}{\sinh^2 2\nu} = \frac{\sinh^2 2\nu + 1}{\sinh^2 2\nu} = \coth^2 2\nu$$

entraîne

$$\cosh 2\varepsilon = \coth 2\nu$$

lorsque $\nu > 0$.

Théorème 39 (Lars Onsager, 1944)

L'énergie libre de Helmholtz par spin du modèle d'Ising est donnée par la formule

$$\psi(T, J) = -kT \log 2 - \frac{kT}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \log \left[\cosh^2 \frac{2J}{kT} - (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \sinh \frac{2J}{kT} \right] d\theta_1 d\theta_2. \quad (4.2)$$

Démonstration

Afin d'alléger la notation, nous introduisons l'énergie libre normalisée $\psi' = -\beta\psi$. Par suite de la définition de l'intégrale,

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\frac{b-a}{n} \sum_{j=1}^n f \left(a + \frac{j(b-a)}{n} \right) \right],$$

du changement de variable $\theta = \frac{j\pi}{m}$ et de la définition de la fonction continue

$$\gamma(x) := + \operatorname{acosh} \left(\cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos \frac{x\pi}{m} \right),$$

l'énergie libre (3.100) devient l'intégrale

$$\begin{aligned} \psi' &= \frac{1}{2} \log(2 \sinh 2\nu) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^m \gamma_{2j-1} \\ &= \frac{1}{2} \log(2 \sinh 2\nu) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \operatorname{acosh}(\cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos \theta) d\theta \end{aligned}$$

dans la limite thermodynamique. Grâce à l'identité

$$\operatorname{acosh} |x| = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \log [2(x - \cos \phi)] d\phi,$$

nous écrivons

$$\begin{aligned} \psi' &= \frac{1}{2} \log(2 \sinh 2\nu) + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \log [2(\cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos \theta - \cos \phi)] d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{2} \log 2 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \log [(2 \sinh 2\nu)(\cosh 2\nu \coth 2\nu - \cos \theta - \cos \phi)] d\theta d\phi \\ &= \log 2 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \log [\cosh^2 2\nu - \sinh 2\nu (\cos \theta + \cos \phi)] d\theta d\phi. \end{aligned}$$

Cette intégrale symétrique est celle annoncée. □

Théorème 40 (Lars Onsager, 1944)

L'énergie interne par spin du modèle d'Ising vaut

$$u(T, J) = -J \left(\coth \frac{2J}{kT} \right) \left[1 + \frac{2}{\pi} \left(2 \tanh^2 \frac{2J}{kT} - 1 \right) K_1(t) \right], \quad (4.3)$$

où

$$K_1(x) := \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1-x^2 \sin^2 \theta}} d\theta \quad (4.4)$$

désigne l'intégrale elliptique complète de première espèce et

$$t(T, J) := 2 \operatorname{sech} \frac{2J}{kT} \tanh \frac{2J}{kT}. \quad (4.5)$$

Démonstration

La formule (4.3) résulte de l'évaluation exacte de l'intégrale dans l'équation (4.2). Rappelons que d'après la définition (1.3) et la relation $v = J/kT$,

$$\begin{aligned} u &= -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\psi}{kT} \right) \\ &= J \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\psi}{kT} \right) \\ &= \frac{-J}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{2 \cosh 2v [2 \sinh 2v - (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)]}{\cosh^2 2v - \sinh 2v \cdot (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} d\theta_1 d\theta_2 \\ &= \frac{-J}{\pi^2} \coth 2v \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{2 \sinh^2 2v - \sinh 2v \cdot (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)}{\cosh^2 2v - \sinh 2v \cdot (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} d\theta_1 d\theta_2. \end{aligned}$$

Par la substitution

$$\varsigma := \sinh 2v (\cos \theta_1 + \cos \theta_2),$$

l'intégrande se réduit à

$$\frac{2 \sinh^2 2v - \varsigma}{\cosh^2 2v - \varsigma} = \frac{\sinh^2 2v + (\cosh^2 2v - 1) - \varsigma}{\cosh^2 2v - \varsigma} = 1 + \frac{\sinh^2 2v - 1}{\cosh^2 2v - \varsigma}$$

et l'énergie interne devient

$$u = -J \coth 2v \left[1 + \frac{\sinh^2 2v - 1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{1}{\cosh^2 2v - \sinh 2v (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} d\theta_1 d\theta_2 \right]. \quad (4.6)$$

Afin de simplifier cette expression, nous examinons l'intégrale symétrique

$$I(v) := \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{1}{\cosh^2 2v - \sinh 2v (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} d\theta_1 d\theta_2. \quad (4.7)$$

Posons d'abord le changement de variables

$$\alpha(v, \theta_1) := \frac{\sinh 2v}{\cosh^2 2v - \sinh 2v \cos \theta_1},$$

qui permet la décomposition de l'intégrale en

$$I = \int_0^\pi \frac{1}{\cosh^2 2\nu - \sinh 2\nu \cos \theta_1} \int_0^\pi \frac{1}{1 - \alpha \cos \theta_2} d\theta_2 d\theta_1.$$

Puisque $\alpha(\nu, \theta_1) \in]0, 1[$ pour tous $\theta_1 \in \mathbb{R} \wedge \nu \neq \nu_c$ et que $\alpha(\nu_c, \theta_1) = \frac{1}{2 - \cos \theta_1} \leq 1$, la seconde intégrale définie se réduit à

$$\int_0^\pi \frac{1}{1 - \alpha \cos \theta} d\theta = \frac{\pi}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \quad (0 < \alpha < 1)$$

lorsque $(\nu, \theta) \neq (\nu_c, 2n\pi)$. Nous pouvons donc écrire

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\pi \frac{\pi}{\sqrt{1 - \alpha(\nu, \theta)^2} (\cosh^2 2\nu - \sinh 2\nu \cos \theta)} d\theta \\ &= \pi \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{(\cosh^2 2\nu - \sinh 2\nu \cos \theta)^2 - \sinh^2 2\nu}} d\theta \\ &= \frac{\pi}{\cosh^2 2\nu} \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2 \sinh 2\nu}{\cosh^2 2\nu} \cos \theta + \frac{\sinh^2 2\nu}{\cosh^4 2\nu} (\cos^2 \theta - 1)}} d\theta \\ &= \frac{\pi}{\cosh^2 2\nu} \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{1 - t \cos \theta + \frac{1}{4} t^2 (\cos^2 \theta - 1)}} d\theta \\ &= \frac{\pi}{\cosh^2 2\nu} \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{t}{2} \cos \theta\right)^2 - \left(\frac{t}{2}\right)^2}} d\theta, \end{aligned}$$

où

$$t = 2 \operatorname{sech} 2\nu \tanh 2\nu = \frac{2 \sinh 2\nu}{\cosh^2 2\nu}.$$

Grâce à l'identité

$$\int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{x}{2} \cos \theta\right)^2 - \left(\frac{x}{2}\right)^2}} d\theta = \int_0^{\pi/2} \frac{2}{\sqrt{1 - x^2 \sin^2 \theta}} d\theta,$$

qui découle des propriétés des fonctions elliptiques de Jacobi, l'intégrale vaut

$$I(\nu) = \frac{2\pi}{\cosh^2 2\nu} K_1(t).$$

En portant ce résultat dans l'équation (4.6), nous trouvons enfin

$$u = -J \coth 2\nu \left[1 + \frac{2}{\pi} \left(2 \tanh^2 2\nu - 1 \right) K_1(t) \right],$$

qui n'est autre que l'équation recherchée. □

Théorème 41 (Lars Onsager, 1944)

La chaleur spécifique par spin du modèle d'Ising vaut

$$c(T, J) = \frac{-4J^2}{\pi kT^2} \coth^2 \frac{2J}{kT} \left\{ \frac{\pi}{2} \operatorname{sech}^2 \frac{2J}{kT} - \left[1 - \left(\operatorname{sech}^2 \frac{2J}{kT} \right) \left(2 \tanh^2 \frac{2J}{kT} - 1 \right) \right] K_1(t) + K_2(t) \right\}, \quad (4.8)$$

où

$$K_2(x) := \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - x^2 \sin^2 \theta} d\theta \quad (4.9)$$

désigne l'intégrale elliptique complète de deuxième espèce.

Démonstration

Ce résultat découle de l'équation (4.3) et des propriétés des intégrales elliptiques. Puisque

$$c = \frac{-J}{kT^2} \frac{\partial u}{\partial \nu}$$

nous dérivons d'abord l'énergie interne,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \nu} &= \frac{2J}{\pi} \left\{ \frac{\pi}{\sinh^2 2\nu} + \left[\frac{2(2 \tanh^2 2\nu - 1)}{\sinh^2 2\nu} - \frac{8 \coth 2\nu \tanh 2\nu}{\cosh^2 2\nu} \right] K_1(t) - \coth 2\nu (2 \tanh^2 2\nu - 1) \frac{\partial K_1(t)}{\partial \nu} \right\} \\ &= \frac{2J}{\pi} \left\{ \pi \operatorname{csch}^2 2\nu - 2(\operatorname{csch}^2 2\nu + 2 \operatorname{sech}^2 2\nu) K_1(t) + (\coth 2\nu - 2 \tanh 2\nu) \frac{\partial K_1}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \nu} \right\}. \end{aligned}$$

En vertu de l'identité

$$x \frac{dK_1(x)}{dx} = \frac{K_2(x)}{1-x^2} - K_1(x),$$

la première dérivée partielle vaut

$$\frac{\partial K_1}{\partial t} = \frac{\cosh^2 2\nu}{2 \sinh 2\nu} \left[\frac{\cosh^2 2\nu}{1 - \sinh^2 2\nu} K_2(t) - K_1(t) \right] = \frac{-\sinh 2\nu \coth^2 2\nu}{2(2 \tanh^2 2\nu - 1)} [K_2(t) - (2 \tanh^2 2\nu - 1) K_1(t)]$$

et la seconde,

$$\frac{\partial t}{\partial \nu} = -4 \operatorname{sech} 2\nu (2 \tanh^2 2\nu - 1).$$

En rassemblant ces résultats, nous obtenons pour la chaleur spécifique l'expression

$$c = \frac{4J^2}{\pi kT^2} \coth^2 2\nu \left\{ K_1(t) - K_2(t) - \operatorname{sech}^2 2\nu \left[\frac{\pi}{2} + (2 \tanh^2 2\nu - 1) K_1(t) \right] \right\}, \quad (4.10)$$

qui est celle annoncée. □

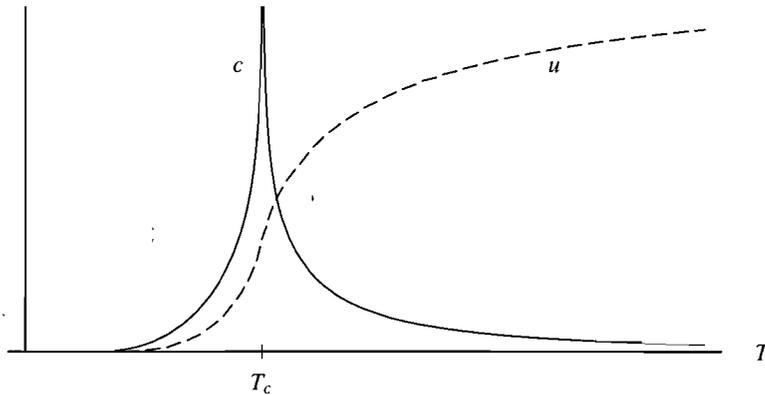


FIG. 4.1 – Le comportement critique de l'énergie interne et de la chaleur spécifique

Les graphes de l'énergie interne et de la chaleur spécifique sont tracés à la figure 4.1 en fonction de la température, selon deux échelles verticales différentes. À la température critique, dont nous devons encore préciser la valeur, l'énergie interne est continue, tandis que la chaleur spécifique diverge.

4.2 Le comportement du modèle au point critique

Nous examinons enfin les quantités thermodynamiques calculées précédemment afin d'exhiber la transition de phases et de caractériser le comportement du modèle au point critique.

Théorème 42 (Lars Onsager, 1944)

Le modèle d'Ising bidimensionnel sur un réseau carré soustrait à l'influence de tout champ magnétique externe subit une transition de phases continue à la température critique T_c pour laquelle la relation

$$\sinh \frac{2J_1}{kT_c} \sinh \frac{2J_2}{kT_c} = 1 \quad (4.11)$$

est vérifiée. Au point critique, l'énergie interne tend vers

$$u(T, J) \sim -J \coth \frac{2J}{kT} \left[1 + \frac{2 \sinh^2(2J/kT) - 1}{\pi \sinh(2J/kT)} \log \left| \cosh^2 \frac{2J}{kT} - 2 \sinh \frac{2J}{kT} \right| \right]. \quad (4.12)$$

Dans ce voisinage, elle se comporte comme la fonction continue

$$u \sim -J \coth 2\nu_c \left[1 + A(\nu - \nu_c) \log |\nu - \nu_c| \right], \quad (4.13)$$

où A désigne une constante, cependant que la chaleur spécifique diverge logarithmiquement selon

$$c \sim B \log |\nu - \nu_c|, \quad (4.14)$$

où B représente une constante.

Démonstration

La présence d'une transition de phases dans un système physique est caractérisée par la discontinuité de l'une de ses variables d'état. Pour déterminer le comportement critique des variables thermodynamiques, il n'est pas nécessaire de connaître les formes exactes (4.3) et (4.8). Il suffit d'examiner l'intégrale (4.7). Elle diverge à l'origine $\theta_1 = \theta_2 = 0$ lorsque

$$\cosh^2 2\nu = 2 \sinh 2\nu, \quad (4.15)$$

qui équivaut à la condition

$$\sinh^2 2\nu = 1. \quad (4.16)$$

Posons donc

$$\delta := \cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu.$$

Dans le voisinage de l'origine, nous avons

$$\cos \theta_1 + \cos \theta_2 \sim 2 - \frac{1}{2}(\theta_1^2 + \theta_2^2),$$

de sorte qu'au point de divergence $\delta = 0$, l'intégrale se comporte selon

$$\begin{aligned} I(\nu) &= \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{1}{\cosh^2 2\nu - \sinh 2\nu (\cos \theta_1 + \cos \theta_2)} d\theta_1 d\theta_2 \\ &\sim \iint_0 \frac{1}{\delta + \frac{1}{2} \sinh 2\nu (\theta_1^2 + \theta_2^2)} d\theta_1 d\theta_2 \\ &= 2\pi \int_0^r \frac{r}{\delta + \frac{1}{2} r^2 \sinh 2\nu} dr \\ &\sim \frac{2\pi}{\sinh 2\nu} \log |\delta| \end{aligned}$$

après le passage aux coordonnées polaires. En portant ce résultat dans l'équation (4.6), il vient

$$u \sim -J \coth 2\nu \left[1 + \frac{2 \sinh^2 2\nu - 1}{\pi \sinh 2\nu} \log |\cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu| \right].$$

Nous montrons maintenant que la chaleur spécifique diverge logarithmiquement au point critique défini par l'une des relations équivalentes (4.11), (4.15) ou (4.16), alors que l'énergie interne y est continue, car le facteur $(\sinh^2 2\nu - 1)$ que multiplie l'intégrale s'annule au point critique. Considérons en effet la fonction

$$h(\nu) := \frac{\sinh^2 2\nu - 1}{\sinh 2\nu} \log |\cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu|,$$

qui détermine le comportement limite de l'énergie interne (4.12). Puisque

$$\lim_{\nu \rightarrow \nu_c} \frac{\sinh^2 2\nu - 1}{\sinh 2\nu} = \lim_{\nu \rightarrow \nu_c} (\cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu) = 0,$$

nous évaluons les limites

$$\lim_{\nu \rightarrow \nu_c} \frac{1}{\nu - \nu_c} \frac{\sinh^2 2\nu - 1}{\sinh 2\nu} = \lim_{\nu \rightarrow \nu_c} \frac{4 \sinh 2\nu \cosh 2\nu}{\sinh 2\nu + 2(\nu - \nu_c) \cosh 2\nu} = 4 \cosh 2\nu_c$$

et

$$\begin{aligned} \lim_{\nu \rightarrow \nu_c} \frac{\cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu}{\nu - \nu_c} &= 4(\cosh 2\nu_c - \cosh 2\nu_c) = 0, \\ \lim_{\nu \rightarrow \nu_c} \frac{(\cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu) - 0}{(\nu - \nu_c)^2} &= \lim_{\nu \rightarrow \nu_c} \frac{4 \cosh 2\nu (\sinh 2\nu - 1)}{2(\nu - \nu_c)} = 4 \cosh^2 2\nu_c \end{aligned}$$

par application de la règle de L'Hospital. Avec

$$\cosh 2\nu_c = + \sqrt{\sinh^2 2\nu_c + 1} = \sqrt{2},$$

nous trouvons ainsi les comportements limites

$$\frac{\sinh^2 2\nu - 1}{\sinh 2\nu} \sim 4\sqrt{2}(\nu - \nu_c)$$

et

$$\cosh^2 2\nu - 2 \sinh 2\nu \sim 8(\nu - \nu_c)^2,$$

qui entraînent

$$h(\nu) \sim 4\sqrt{2}(\nu - \nu_c) \log |16(\nu - \nu_c)|.$$

En portant cette expression dans l'équation (4.12), nous recouvrons le résultat (4.13). Or, cette fonction est continue en $\nu = \nu_c$, car

$$\lim_{\nu \rightarrow \nu_c} (\nu - \nu_c) \log |\nu - \nu_c| = 0,$$

de telle sorte que $u(T_c) = -J \coth 2\nu_c$ au point critique.

Le comportement limite (4.14) de la chaleur spécifique résulte immédiatement de la dérivation de l'équation (4.13) selon

$$c = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\partial \nu}{\partial T} \frac{\partial u}{\partial \nu},$$

où nous nous sommes permis d'invertir la dérivée et le processus limite. Cette quantité diverge manifestement au point critique. \square

La transition de phases résulte de la structure particulière du spectre de la matrice de transfert. La température critique du système correspond en effet au point critique $\varepsilon_1 = \nu_2$ pour lequel le paramètre γ_0 change de signe. Puisque

$$\sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_1 = 1$$

selon l'identité (3.38), l'équation

$$\sinh 2\nu_{1,c} \sinh 2\nu_{2,c} = \sinh \frac{2J_1}{kT_c} \sinh \frac{2J_2}{kT_c} = 1$$

est vérifiée en ce point. Elle se réduit à

$$\sinh \frac{2J}{kT_c} = +1 \tag{4.17}$$

lorsque $J_1 = J_2 = J > 0$. Le cas $\varepsilon_1 > \nu_2$ implique

$$\frac{\sinh 2\nu_2}{\sinh 2\varepsilon_1} = \sinh 2\nu_1 \sinh 2\nu_2 < 1$$

et correspond donc au cas $T > T_c$, et inversement pour $\varepsilon_1 < \nu_2$. Cette observation justifie la convention (3.97).

La continuité de l'énergie interne et la discontinuité de la chaleur spécifique au point critique sont apparentes à la figure 4.1 de la page 72. Dans le régime surcritique, l'orientation des spins est désordonnée en raison de la grande énergie thermique dont ils disposent et le système ne présente aucune aimantation. En régime souscritique, le système subit une interaction de longue portée : même les spins séparés par une distance infinie sont corrélés. Tous les spins tendent alors à s'aligner selon une même orientation, ce qui produit une aimantation. Cette interaction est responsable de la transition de phases.

Chapitre 5

Synthèse

A conclusion is the place where one got tired thinking. [And perhaps also the reader.]
– Martin Henry Fischer

Pour clore, nous rappelons les motivations du problème, résumons les conclusions de notre démarche et répétons les principales étapes de la démonstration.

Le modèle d'Ising fut proposé au début du XX^e siècle pour décrire les phénomènes du ferromagnétisme et de l'antiferromagnétisme observés dans certains corps solides. Il ne tient compte que des deux principales contributions au magnétisme, soit l'interaction dipolaire entre les électrons d'atomes voisins et l'interaction entre le champ magnétique externe et les électrons. Ces simplifications sont justifiées parce que les phénomènes magnétiques résultent essentiellement de l'alignement des moments dipolaires des électrons sur des plages mésoscopiques d'atomes, ce qui dispense de considérer les effets physiques microscopiques, et parce que la transition de phases surviendra à plus forte raison pour une interaction de longue portée si elle se produit pour une interaction de courte portée.

Nous avons calculé la valeur exacte de la fonction de partition et des variables thermodynamiques du modèle d'Ising bidimensionnel sur un réseau carré en l'absence d'un champ magnétique externe. Grâce à ces résultats, nous avons démontré l'existence d'une transition de phases et calculé la température critique du système. Nous reproduisons les principales étapes de cette démarche.

Considérons un réseau connexe composé de N sites reliés par des liens, où chaque site représente un spin scalaire pouvant admettre l'une des valeurs $\mu_s = \pm 1$. Ce système est soumis à l'action d'un champ magnétique scalaire $H \in \mathbb{R}$. L'énergie totale de ce système est définie selon

$$E(\{\mu\}) := -J \sum_{\langle s,t \rangle} \mu_s \mu_t - H \sum_s \mu_s \quad (1.5)$$

et sa fonction de partition vaut

$$Z = \sum_{\{\mu\}} e^{-\beta E(\{\mu\})} = \sum_{\{\mu\}} \exp\left(\beta J \sum_{\langle s,t \rangle} \mu_s \mu_t + \beta H \sum_s \mu_s\right). \quad (1.6)$$

Pour un réseau carré périodique doté de m lignes et de n colonnes, dont le spin à l'intersection de la ligne i et de la colonne j est noté $\mu_{i,j}$ et dont les constantes de couplage horizontale et verticale valent respectivement J_1 et J_2 , l'énergie totale et la fonction de partition se réduisent respectivement à

$$E_{m,n}(\{\mu\}) = -J_1 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mu_{i,j} \mu_{i,j+1} - J_2 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mu_{i,j} \mu_{i+1,j} - H \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mu_{i,j}, \quad (1.9)$$

$$Z_{m,n} = \sum_{\{\mu\}} \exp\left(\beta \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n [J_1 \mu_{i,j} \mu_{i,j+1} + J_2 \mu_{i,j} \mu_{i+1,j} + H \mu_{i,j}]\right). \quad (1.10)$$

Par l'entremise de la matrice de transfert

$$L(\tau, \tau') = \exp\left[v_1 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu'_i\right] \exp\left[v_2 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu_{i+1} + B \sum_{i=1}^m \mu_i\right], \quad (3.25)$$

avec

$$v_i := \beta J_i, \quad B := \beta H, \quad (3.21)$$

la fonction de partition devient

$$Z_{m,n} = \text{tr}(L^n) = \sum_{k=1}^{2^m} \lambda_k^n(T, H, J_1, J_2, m), \quad (3.24)$$

où $\mathcal{S}(L) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2^m}\}$ désigne le spectre de la matrice L . Dans la limite thermodynamique, l'énergie libre du système et sa chaleur spécifique valent respectivement

$$\psi = -kT \lim_{m \rightarrow \infty} m^{-1} \log \lambda_1(T, H, J_1, J_2, m), \quad (3.27)$$

$$c = \frac{\partial}{\partial T} \left(kT^2 \frac{\partial \psi}{\partial T} \frac{1}{kT} \right), \quad (3.28)$$

Pour évaluer les propriétés thermodynamiques du modèle d'Ising sur un réseau fini, il suffit ainsi de déterminer le spectre de la matrice de transfert $L_{2^m \times 2^m}$ — et sa valeur propre maximale dans la limite d'un réseau infini.

La matrice de transfert du réseau carré se factorise en un produit matriciel

$$L = V_3 V_2 V_1 \quad (3.29)$$

en termes des quantités

$$V_1(\tau, \tau') := \exp\left(v_1 \sum_{k=1}^m \mu_k \mu'_k\right) = \prod_{k=1}^m e^{v_1 \mu_k \mu'_k}, \quad (3.30)$$

$$V_2(\tau, \tau') := \prod_{l=1}^m \delta_{\mu_l, \mu'_l} \prod_{k=1}^m e^{v_2 \mu_k \mu_{k+1}}, \quad (3.31)$$

$$V_3(\tau, \tau') := \prod_{l=1}^m \delta_{\mu_l, \mu'_l} \prod_{k=1}^m e^{B \mu_k}. \quad (3.32)$$

Avec le changement de variable

$$\varepsilon_i := \operatorname{atanh} e^{-2v_i}, \quad (3.33)$$

ces matrices de factorisation deviennent

$$V_1 = (2 \sinh 2v_1)^{m/2} \exp \left(\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \sigma_{1,k,m} \right), \quad (3.34)$$

$$V_2 = \exp \left(v_2 \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k,m} \sigma_{3,k+1,m} \right), \quad (3.35)$$

$$V_3 = \exp \left(B \sum_{k=1}^m \sigma_{3,k,m} \right) \quad (3.36)$$

en fonction des tenseurs de spin de Pauli

$$\sigma_{\alpha,k,m} = \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \overbrace{\sigma_{\alpha}}^k \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_2.$$

Lorsque le champ magnétique externe est nul, la matrice de transfert se réduit à

$$L(\tau, \tau') = \exp \left[v_1 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu'_i \right] \exp \left[v_2 \sum_{i=1}^m \mu_i \mu_{i+1} \right] \quad (3.41)$$

et se factorise en

$$L = V_2 V_1. \quad (3.42)$$

En termes des opérateurs de spin

$$\rho_{k,m} := \left(\prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l,m} \right) \sigma_{3,k,m} = \left(\bigotimes_{l=1}^{k-1} \sigma_1 \right) \otimes \sigma_3 \otimes \left(\bigotimes_{l=k+1}^m \mathbb{I}_2 \right), \quad (3.46)$$

$$\varphi_{k,m} := \left(\prod_{l=1}^{k-1} \sigma_{1,l,m} \right) \sigma_{2,k,m} = \left(\bigotimes_{l=1}^{k-1} \sigma_1 \right) \otimes \sigma_2 \otimes \left(\bigotimes_{l=k+1}^m \mathbb{I}_2 \right), \quad (3.47)$$

$$\chi_m := \prod_{l=1}^m \sigma_{1,l,m} = \bigotimes_{l=1}^m \sigma_1, \quad (3.48)$$

les matrices de factorisation s'écrivent ensuite

$$V_1 = (2 \sinh 2v_1)^{m/2} \exp \left(i \varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_{k,m} \varphi_{k,m} \right),$$

$$V_2 = \exp(iv_2 \rho_1 \varphi_m \chi) \exp\left(-iv_2 \sum_{k=1}^{m-1} \rho_{k+1,m} \varphi_{k,m}\right).$$

La matrice de transfert se décompose alors en

$$L = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \left[\frac{1}{2}(\mathbb{I}_{2^m} + \chi_m)V_+ + \frac{1}{2}(\mathbb{I}_{2^m} - \chi_m)V_- \right], \quad (3.50)$$

où nous avons posé

$$V_{\pm} = \exp\left(-iv_2 \sum_{k=1}^m \rho_{k+1,m} \varphi_{k,m}\right) \exp\left(i\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \rho_{k,m} \varphi_{k,m}\right) \quad (3.51)$$

et adopté pour V_{\pm} la convention

$$\rho_{m+1,m} = \mp \rho_{1,m}.$$

L'introduction des opérateurs fermioniques de création et d'annihilation

$$a_{k,m} := \frac{1}{2}(\varphi_{k,m} + i\rho_{k,m}), \quad (3.53)$$

$$a_{k,m}^{\dagger} := \frac{1}{2}(\varphi_{k,m} - i\rho_{k,m}) \quad (3.54)$$

permet la décomposition supplémentaire

$$V_{\pm} = \exp\left[\nu_2 \sum_{k=1}^m (a_{k+1,m}^{\dagger} - a_{k+1,m})(a_{k,m}^{\dagger} + a_{k,m})\right] \exp\left[-2\varepsilon_1 \sum_{k=1}^m \left(a_{k,m}^{\dagger} a_{k,m} - \frac{1}{2}\mathbb{I}\right)\right] \quad (3.56)$$

avec la condition périodique

$$a_{m+1,m} = \mp a_{1,m}.$$

La fonction de partition devient alors

$$Z_{m,n} = \frac{1}{2}(2 \sinh 2\nu_1)^{mn/2} \left[\text{tr } V_+^n + \text{tr } V_-^n + \text{tr } \chi(V_+^n - V_-^n) \right]. \quad (3.58)$$

La transformée de Fourier

$$\eta_{q,m} = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{k=1}^m e^{-iqk} a_{k,m}, \quad \eta_{q,m}^{\dagger} = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{m}} \sum_{k=1}^m e^{iqk} a_{k,m}^{\dagger}, \quad (3.61)$$

dont les indices valent

$$q \in \mathcal{Q}_m^+ = \left\{ \frac{(2j-1)\pi}{m} \mid j = -\frac{m}{2} + 1, -\frac{m}{2} + 2, \dots, \frac{m}{2} - 1, \frac{m}{2} \right\} \quad (3.62)$$

pour les opérateurs apparaissant dans V_+ et

$$q \in \mathcal{Q}_m^- = \left\{ \frac{2j\pi}{m} \mid j = -\frac{m}{2} + 1, -\frac{m}{2} + 2, \dots, \frac{m}{2} - 1, \frac{m}{2} \right\} \quad (3.63)$$

pour ceux de V_- , lorsque le nombre m de sites est pair, accomplit une transition de l'espace des positions à l'espace des impulsions. Les opérateurs de dénombrement sont ensuite formés d'une combinaison de ces opérateurs de propagation d'onde, nommément

$$\Omega_{1,q,m} := \eta_{-q,m} \eta_{q,m} + \eta_{q,m}^{\dagger} \eta_{-q,m}^{\dagger}, \quad (3.68)$$

$$\Omega_{2,q,m} := i(\eta_{-q,m}\eta_{q,m} - \eta_{q,m}^\dagger\eta_{-q,m}^\dagger), \quad (3.69)$$

$$\Omega_{3,q,m} := \eta_{q,m}^\dagger\eta_{q,m} + \eta_{-q,m}^\dagger\eta_{-q,m} - \mathbb{I}_{2^m}. \quad (3.70)$$

En termes des opérateurs de dénombrement, les matrices de décomposition se factorisent alors en

$$V_\pm = \prod_{q \in \mathcal{Q}_m^+, q > 0} U_{q,m} \quad (3.74)$$

avec

$$U_{q,m} := \exp\left[2\nu_2\left(\Omega_{3,q,m}\cos q - \Omega_{1,q,m}\sin q\right)\right] \exp\left[-2\varepsilon_1\Omega_{3,q,m}\right]. \quad (3.75)$$

Après un changement de base depuis la représentation du nombre d'occupation de l'espace des positions vers la représentation du nombre d'occupation de l'espace des impulsions, les opérateurs de dénombrement revêtent la forme diagonale

$$\Omega_{a,q} = \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \overbrace{\omega_{\pm,a}^j} \otimes \mathbb{I}_4 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_4, \quad (3.77)$$

composée de $\frac{m}{2}$ termes, où les éléments

$$\omega_{+,a} := \begin{pmatrix} \sigma_a & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \omega_{-,a} := \begin{pmatrix} \mathbb{O}_2 & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \sigma_a \end{pmatrix}, \quad (3.78)$$

associés respectivement aux espaces \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- , apparaissent aux positions $j = \frac{1}{2}\left(\frac{mq}{\pi} + 1\right)$ et $j = \frac{mq}{2\pi}$, avec $q > 0$. Grâce à cette simplification, les matrices de décomposition se factorisent en un produit tensoriel

$$V_+ = \bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{+,2j-1} \quad \text{et} \quad V_- = \bigotimes_{j=1}^{m/2} W_{-,2j} \quad (3.81)$$

des matrices

$$W_{\pm,k} := \exp\left[2\nu_2\left(\omega_{\pm,3}\cos\frac{k\pi}{m} - \omega_{\pm,1}\sin\frac{k\pi}{m}\right)\right] \exp\left[-2\varepsilon_1\omega_{\pm,3}\right] \quad (3.82)$$

de taille 4×4 . Il s'ensuit que le spectre de la matrice de transfert vaut

$$S(L) = \Lambda_+ \cup \Lambda_-$$

avec

$$\Lambda_+ = \left\{ \lambda_+ \mid \lambda_+ = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (\pm 1)_j^* \cdot \gamma_{2j-1}\right] \right\}, \quad (3.89)$$

$$\Lambda_- = \left\{ \lambda_- \mid \lambda_- = (2 \sinh 2\nu_1)^{m/2} \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (\pm 1)_j^* \cdot \gamma_{2j}\right] \right\} \quad (3.90)$$

et

$$\gamma_k := + \operatorname{acosh}\left(\cosh 2\varepsilon_1 \cosh 2\nu_2 - \sinh 2\varepsilon_1 \sinh 2\nu_2 \cos\frac{k\pi}{m}\right), \quad (3.98)$$

où chaque somme contient un nombre pair de signes négatifs.

Ces résultats produisent la fonction de partition

$$Z_{m,n} = 2^{m-1} (2 \sinh 2\nu_1)^{mn/2} \left[\prod_{j=1}^m \cosh\left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2}\right) + \prod_{j=1}^m \sinh\left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2}\right) + \prod_{j=1}^m \cosh\left(\frac{n\gamma_{2j}}{2}\right) + \prod_{j=1}^m \sinh\left(\frac{n\gamma_{2j}}{2}\right) \right],$$

qui se comporte selon

$$Z_{m,n} \sim (2 \sinh 2\nu_1)^{mn/2} \exp\left(\frac{n}{2} \sum_{j=1}^m \gamma_{2j-1}\right) \left[1 + \prod_{j=1}^m \tanh\left(\frac{n\gamma_{2j-1}}{2}\right) \right] \quad (3.99)$$

dans la limite thermodynamique, l'énergie interne par spin

$$u(T, J) = -J \left(\coth \frac{2J}{kT} \right) \left[1 + \frac{2}{\pi} \left(2 \tanh^2 \frac{2J}{kT} - 1 \right) K_1(t) \right] \quad (4.3)$$

et la chaleur spécifique par spin

$$c(T, J) = \frac{-4J^2}{\pi kT^2} \left(\coth^2 \frac{2J}{kT} \right) \left\{ \frac{\pi}{2} \operatorname{sech}^2 \frac{2J}{kT} - \left[1 - \left(\operatorname{sech}^2 \frac{2J}{kT} \right) \left(2 \tanh^2 \frac{2J}{kT} - 1 \right) \right] K_1(t) + K_2(t) \right\}. \quad (4.8)$$

Dans ces expressions,

$$K_1(x) := \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1-x^2 \sin^2 \theta}} d\theta \quad (4.4)$$

désigne l'intégrale elliptique complète de première espèce,

$$K_2(x) := \int_0^{\pi/2} \sqrt{1-x^2 \sin^2 \theta} d\theta \quad (4.9)$$

représente l'intégrale elliptique complète de deuxième espèce, et

$$t(T, J) := 2 \operatorname{sech} \frac{2J}{kT} \tanh \frac{2J}{kT}. \quad (4.5)$$

Le modèle subit une transition de phases continue à la température critique T_c définie par

$$\sinh \frac{2J_1}{kT_c} \sinh \frac{2J_2}{kT_c} = 1. \quad (4.11)$$

La chaleur spécifique y diverge logarithmiquement, tandis que l'énergie interne y est continue.

En régime surcritique, l'orientation des spins est désordonnée en raison de l'importante énergie thermique dont ils disposent et le système ne présente aucune aimantation. En régime souscritique, le système subit une interaction de longue portée : même les spins séparés par une distance infinie sont corrélés. Tous les spins tendent alors à s'aligner selon une même orientation, ce qui produit une aimantation. Cette interaction est responsable de la transition de phases.

Malgré sa représentation simpliste de la structure d'un corps ferromagnétique, le modèle d'Ising se révèle singulièrement réfractaire aux calculs. Les tentatives de résolution du problème bidimensionnel

restreint avortèrent maintes fois. À ce jour, aucune solution exacte au problème bidimensionnel général ni au problème tridimensionnel en l'absence de champ externe n'est connue. L'importance historique du modèle d'Ising tient à ce qu'il demeure le seul modèle non trivial décrivant une transition de phases ferromagnétique tout en étant soluble analytiquement. Pour cette raison, il constitue encore la pierre angulaire de la compréhension théorique du ferromagnétisme.

Dans ce mémoire, nous avons restreint la discussion à la méthode algébrique de résolution du problème bidimensionnel. L'approche combinatoire, qui dénombre les combinaisons de graphes orientés sur le réseau, est décrite dans les articles [12] à [21] répertoriés dans la bibliographie.

La présente démarche consacre les efforts consentis par maints auteurs successifs, efforts étalés sur près d'un siècle. Nous espérons qu'à l'égard de ce prodigieux tour de force, le lecteur partagera l'appréciation de Blaise Pascal à une autre époque : « ce ne sont pas des fleurs printanières sujettes au changement des saisons, mais étant cueillies dans les plus beaux parterres de la mathématique, ce sont plutôt des amarantes qui ne flétriront jamais ».

Remerciements

Nous nous tairons plein de paroles
Et le silence apprivoisé
Comme un oiseau sur la corolle
De la nuit, viendra se poser.
– Gilles Vigneault, *Maintenant*

Nous tenons à remercier ceux et celles qui ont soutenu nos efforts durant l'élaboration de ce projet. Yvan Saint-Aubin, d'abord, qui nous a enseigné le sujet et nous en a fait découvrir la richesse. Nous lui témoignons notre sincère gratitude pour son encadrement irréprochable, ses judicieux conseils et son indéfectible soutien. Sans sa sagacité et son inépuisable patience, ce mémoire n'eût jamais vu le jour. Richard MacKenzie et Véronique Hussin pour leur diligence. André Montpetit pour sa précieuse expertise de L^AT_EX. Nos collègues et amis, enfin, pour leurs encouragements et leur curiosité, en particulier Edinah Koffi Gnanang et Frédérick Tremblay pour le concours qu'ils ont apporté à certains calculs rébarbatifs, Irina Gaponova pour les erreurs qu'elle nous a signalées et Éric Landry pour ses suggestions.

Ce projet de recherche et la rédaction de ce mémoire furent subventionnés par une bourse de maîtrise du Fonds québécois de la recherche sur la nature et les technologies (FQRNT). Nous sommes reconnaissant de ce soutien.

Bibliographie

Articles fondateurs

- [1] LENZ, Wilhelm. « Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern », *Physikalische Zeitschrift*, 21, 1920, 613–615.
- [2] ISING, Ernst. « Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus », *Zeitschrift für Physik*, 31, 1925, 253–258.

Méthode de résolution algébrique

- [3] KRAMERS, Hendrik A. ; WANNIER, Gregory H. « Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet : Part I », *Physical Review*, 60, 1941, 252–262.
- [4] KRAMERS, Hendrik A. ; WANNIER, Gregory H. « Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet : Part II », *Physical Review*, 60, 1941, 263–276.
- [5] ONSAGER, Lars. « Crystal Statistics I : A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition », *Physical Review*, 65, 1944, 117–149.
- [6] KAUFMAN, Bruria. « Crystal Statistics II : Partition Function Evaluated by Spinor Analysis », *Physical Review*, 76, 1949, 1232–1243.
- [7] KAUFMAN, Bruria ; ONSAGER, Lars. « Crystal Statistics III : Short-Range Order in Binary Ising Lattice », *Physical Review*, 76, 1949, 1244–1252.
- [8] SCHULTZ, Theodore D. ; MARTIS, Daniel C. ; LIEB, Elliott H. « Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions », *Reviews of Modern Physics*, 36, 1964, 856–871.
- [9] THOMPSON, Colin J. « Algebraic Derivation of the Partition Function of a Two-Dimensional Ising Model », *Journal of Mathematical Physics*, 6, 1965, 1392–1395.
- [10] THOMPSON, Colin J. *Mathematical Statistical Mechanics*, Macmillan, New York, 1972, chapitre 5 & annexe D.
- [11] YANG, C. N. « The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model », *Physical Review*, 85, 1952, 808–816.

Méthode de résolution combinatoire

- [12] KAC, Mark ; WARD, John C. « A Combinatorial Solution to the Two-Dimensional Ising Model », *Physical Review*, 88, 1952, 1332–1337.
- [13] POTTS, Renfrey B. ; WARD, John C. « The Combinatorial Method and the Two-Dimensional Ising Model », *Progress of Theoretical Physics*, 13, 1955, 38–46.

- [14] SHERMAN, S. « Combinatorial Aspects of the Ising Model for Ferromagnetism I : A Conjecture of Feynman on Paths and Graphs », *Journal of Mathematical Physics*, 1, 1960, 202–217.
- [15] SHERMAN, S. « Addendum – Combinatorial Aspects of the Ising Model for Ferromagnetism I : A Conjecture of Feynman on Paths and Graphs », *Journal of Mathematical Physics*, 4, 1963, 1213–1214.
- [16] SHERMAN, S. « Combinatorial Aspects of the Ising Model for Ferromagnetism II : An Analogue to the Witt Identity », *Bulletin of the American Mathematical Society*, 68, 1962, 225–229.
- [17] BURGOYNE, P. N. « Remarks on the Combinatorial Approach to the Ising Problem », *Journal of Mathematical Physics*, 4, 1963, 1320–1326.
- [18] HURST, Charles A. ; GREEN, Herbert S. « New Solution of the Ising Problem for a Rectangular Lattice », *Journal of Chemical Physics*, 33, 1960, 1059–1062.
- [19] KASTELEYN, P. W. « Dimer Statistics and Phase Transitions », *Journal of Mathematical Physics*, 4, 1963, 287–293.
- [20] THOMPSON, Colin J. *Mathematical Statistical Mechanics*, Macmillan, New York, 1972, chapitre 6.
- [21] DA COSTA, G. A. T. F. ; MACIEL, A. L. « Combinatorial Formulation of Ising Model Revisited », *Revista brasileira de ensino de física*, 25, 2003, 49–61.

Revues historiques

- [22] NEWELL, Gordon F. ; MONTROLL, Elliott W. « On the Theory of the Ising Model of Ferromagnetism », *Reviews of Modern Physics*, 25, 1953, 353–389.
- [23] BRUSH, Stephen G. « History of the Lenz–Ising Model », *Reviews of Modern Physics*, 39, 1967, 883–893.
- [24] NISS, Martin. « History of the Lenz–Ising Model 1920–1950 : From Ferromagnetic to Cooperative Phenomena », *Archive for History of Exact Sciences*, 59, 2005, 267–318.

Ouvrages de référence

- [25] THOMPSON, Colin J. *Mathematical Statistical Mechanics*, Macmillan, New York, 1972, 278 pages.
- [26] MCCOY, Barry M. ; WU, Tai Tsun. *The Two-Dimensional Ising Model*, Harvard University Press, Cambridge, 1973, 418 pages.
- [27] BAXTER, Rodney J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, London, 1982, 486 pages.
- [28] STANLEY, Harry Eugene. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press, New York, 1971, 308 pages.
- [29] BINNEY, James J. ; DOWRICK, N. J. ; FISHER, J. ; NEWMAN, M. E. J. *The Theory of Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1992, 464 pages.
- [30] REICHL, Linda E. *A Modern Course in Statistical Physics*, John Wiley & Sons, New York, 2e édition, 1998, 822 pages.
- [31] HUANG, Kerson. *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 2e édition, 1987, 493 pages.
- [32] REIF, Frederick. *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill, San Francisco, 1965, 651 pages.

- [33] COHEN-TANNOUJII, Claude ; DIU, Bernard ; LALOË, Franck. *Mécanique quantique*, Hermann, Paris, 1973, 1494 pages.
- [34] BACRY, Henri. *Leçons sur la théorie des groupes et les symétries des particules élémentaires*, Gordon & Breach, Paris, 1967, 449 pages.
- [35] HULIN, Michel ; BETBEDER, Odile. *Théorie des groupes appliquée à la physique*, Éditions de physique, Les Ulis, 1991, 389 pages.
- [36] TUNG, Wu-Ki. *Group Theory in Physics*, World Scientific, Singapour, 1985, 344 pages.
- [37] ZWILLINGER, Daniel (éditeur). *Standard Mathematical Tables and Formulae*, CRC Press, Boca Raton, 31^e édition, 2003, 910 pages.