

Physique Statistique, Amphi 5

J.P. Bouchaud

Plan du cours

- I. Interactions et Gaz Réels
 - Potentiel d'interaction
 - Corrélation de paires
 - Corrections du viriel
- II. Transitions de phases et champ moyen
 - Approximation de Van der Waals
 - Transition Para-Ferro et champ moyen
 - Universalité

I. Gaz réels – Introduction

- N particules dans un volume V

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

- Différents états possibles: gaz, liquides, solides (...) – mais sans rien changer au potentiel d'interaction (??)
- Gaz parfait: $u(r) \equiv 0 \rightarrow$ particules indépendantes

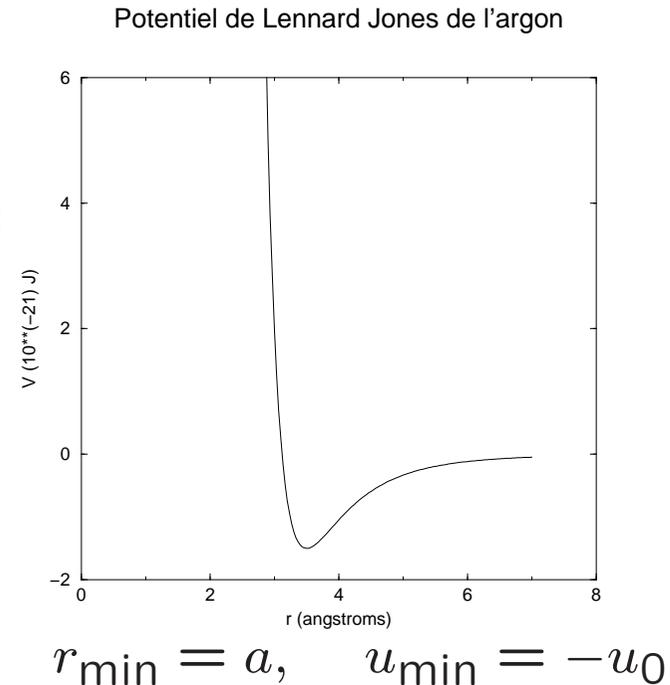
$$p(\vec{r})d^3\vec{r} = \frac{N}{V}d^3\vec{r} = \rho d^3\vec{r}; \quad p(\vec{r}_2|\vec{r}_1 = \vec{r})d^3\vec{r}_2 = \rho d^3\vec{r}_2$$

Probabilité non conditionnelle = probabilité conditionnelle

I. Gaz en interaction – Potentiel d'interaction

- Gaz monoatomique, potentiel isotrope $v(r)$
- Courtes distance: recouvrement des orbitales électroniques, forte repulsion (coeur dur)
- Distance intermédiaire: attraction entre dipôles fluctuants en r^{-6}
- Modèle simple: Lennard Jones

$$u(r) \approx u_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right]$$



I. Gaz réels – Ordres de grandeur

- Ar: $u_0/k \approx 120\text{K}$ et $a \approx 0.35\text{nm}$ (Xe: 225K et 0.41nm)
- Pour \mathcal{N} particules dans 22,4 litres: $d = \rho^{-1/3} \approx 3\text{nm}$
- $\rho a^3 \sim 10^{-3}$ et $u(d) \sim 10^{-6}kT \rightarrow$ interactions *perturbatives*
- Temps entre collision: $\rho \times \pi a^2 \times v^* \tau \sim 1 \rightarrow \tau \sim 10^{-9}\text{sec}$
- Effets quantiques: $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi mkT} \approx 0.01\text{nm} \ll d$

I. Gaz réels – Corrélations

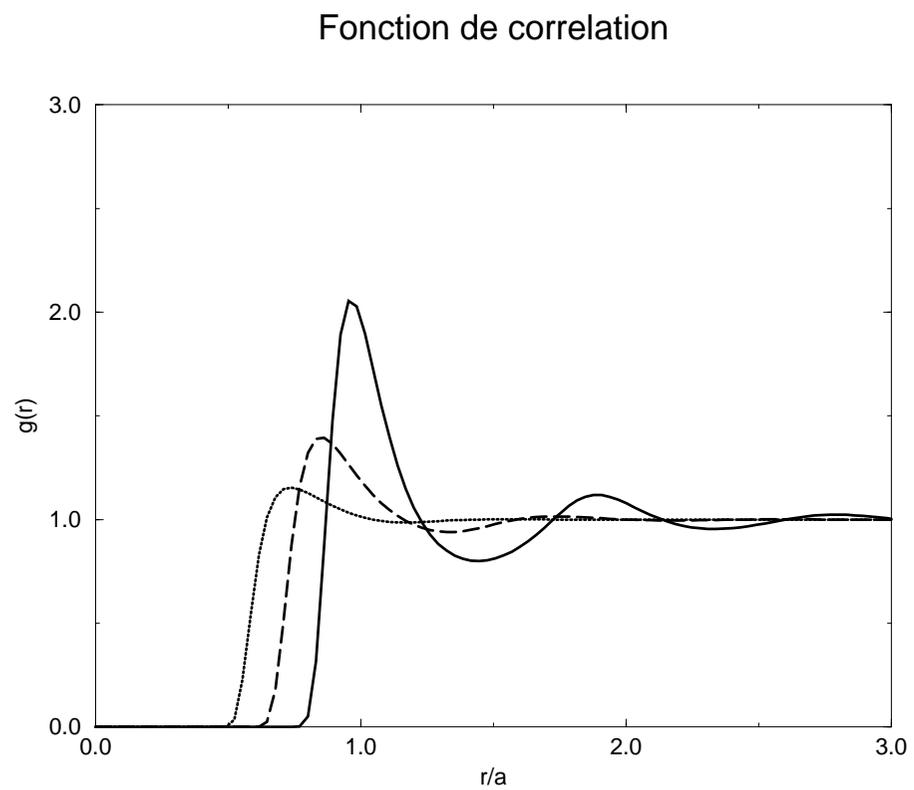
- Probabilité conditionnelle de trouver une particule a distance r d'une autre:

$$p(\vec{r}|\vec{r}_1 = \vec{0})d^3\vec{r} = \rho g(r)d^3\vec{r}$$

$g(r)$: Fonction de corrélation de paires

- $g(r \gg a) \rightarrow 1$ – décorrélation à grande distance
- $g(r)$ est accessible expérimentalement (diffusion de la lumière, rayons X, neutrons...), qui mesure sa transformée de Fourier $S(k)$ – facteur de structure

Corrélation de paires



I. Gaz réels – Corrélations

- Définition formelle:

$$p(\vec{r} | \vec{r}_1 = \vec{0}) = V \times (N-1) \times \int_{\vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N} \left[\prod_{k \geq 3} d\vec{r}_k \right] P_{eq.}(\vec{r}_1 = \vec{0}, \vec{r}_2 = \vec{r}, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)$$

- ou, en utilisant le poids de Boltzmann:

$$p(\vec{r} | \vec{r}_1 = \vec{0}) \approx \frac{VN}{Z} \int_{\vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N} \left[\prod_{k \geq 3} d\vec{r}_k \right] \exp \left[-\frac{\beta}{2} \sum_{ij} u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \right] \Big|_{\vec{r}_1 = \vec{0}; \vec{r}_2 = \vec{r}}$$

I. Gaz réels – Pression

- On peut exprimer l'énergie totale grâce à $g(r)$:

$$U = N \left\langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \right\rangle + \frac{N}{2} \left\langle \sum_{j \neq 1} u(|\vec{r}_1 - \vec{r}_j|) \right\rangle$$

$$U = \frac{3}{2} NkT + \frac{N}{2} \int d^3\vec{r} \rho g(r) u(r)$$

- En travaillant un peu plus, on peut aussi obtenir la pression connaissant $g(r)$:

$$p = \rho kT - \frac{1}{6} \rho^2 \int d^3\vec{r} g(r) r u'(r)$$

Résultats généraux pour des interactions à deux corps

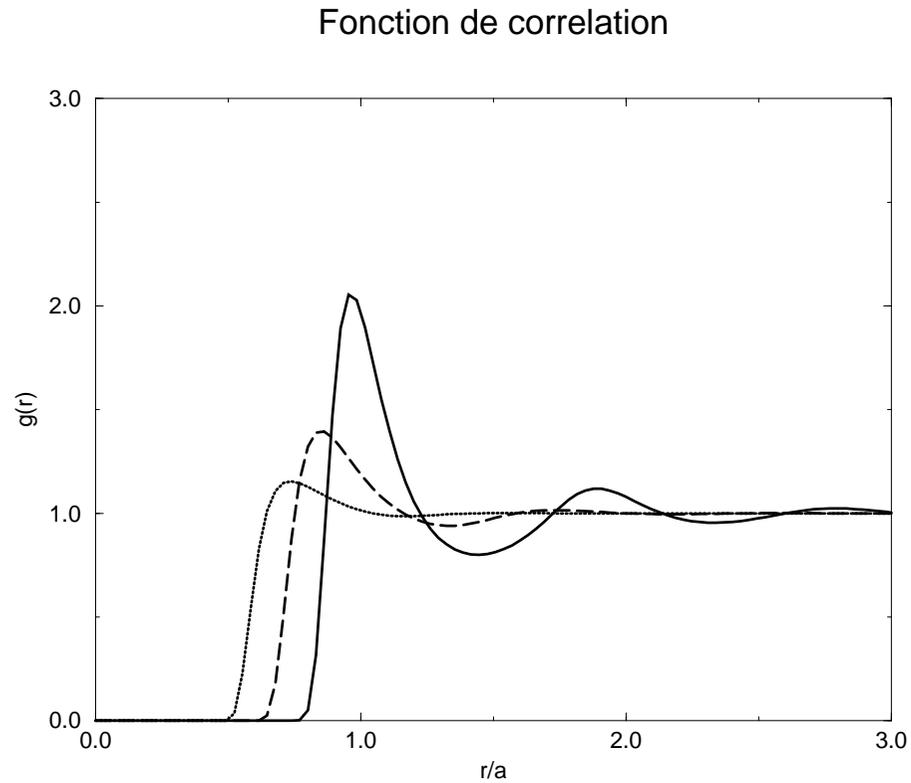
I. Gaz réels – Basse densité

- A basse densité, la probabilité d'une interaction "triple" $\sim (\rho a^3)^2$ est petite par rapport à la probabilité d'une interaction de paire ($\sim (\rho a^3)$)
- La corrélation de paires est alors déterminée par l'interaction directe entre particules

$$p(\vec{r}|\vec{r}_1 = \vec{0}) = \rho g(r) \approx \rho e^{-\beta u(r)} \longrightarrow g(r) \approx e^{-\beta u(r)}$$

- $u(r < a) \gg kT \rightarrow$ probabilité quasiment nulle de recouvrement des coeurs, et pic de probabilité autour du minimum de $u(r)$

Corrélation de paires



$g(r)$ du gaz dilué au liquide : apparition de structures locales

I. Gaz réels – Basse densité

- $p = \rho kT - \frac{1}{6}\rho^2 \int d^3\vec{r} g(r) r u'(r)$

- En utilisant $g(r) \approx e^{-\beta u(r)}$ on trouve:

$$p = \rho kT + \frac{\rho^2}{6} \int d\vec{r} r \beta^{-1} \frac{\partial}{\partial r} \exp[-\beta u(r)]$$

- Après intégration par partie:

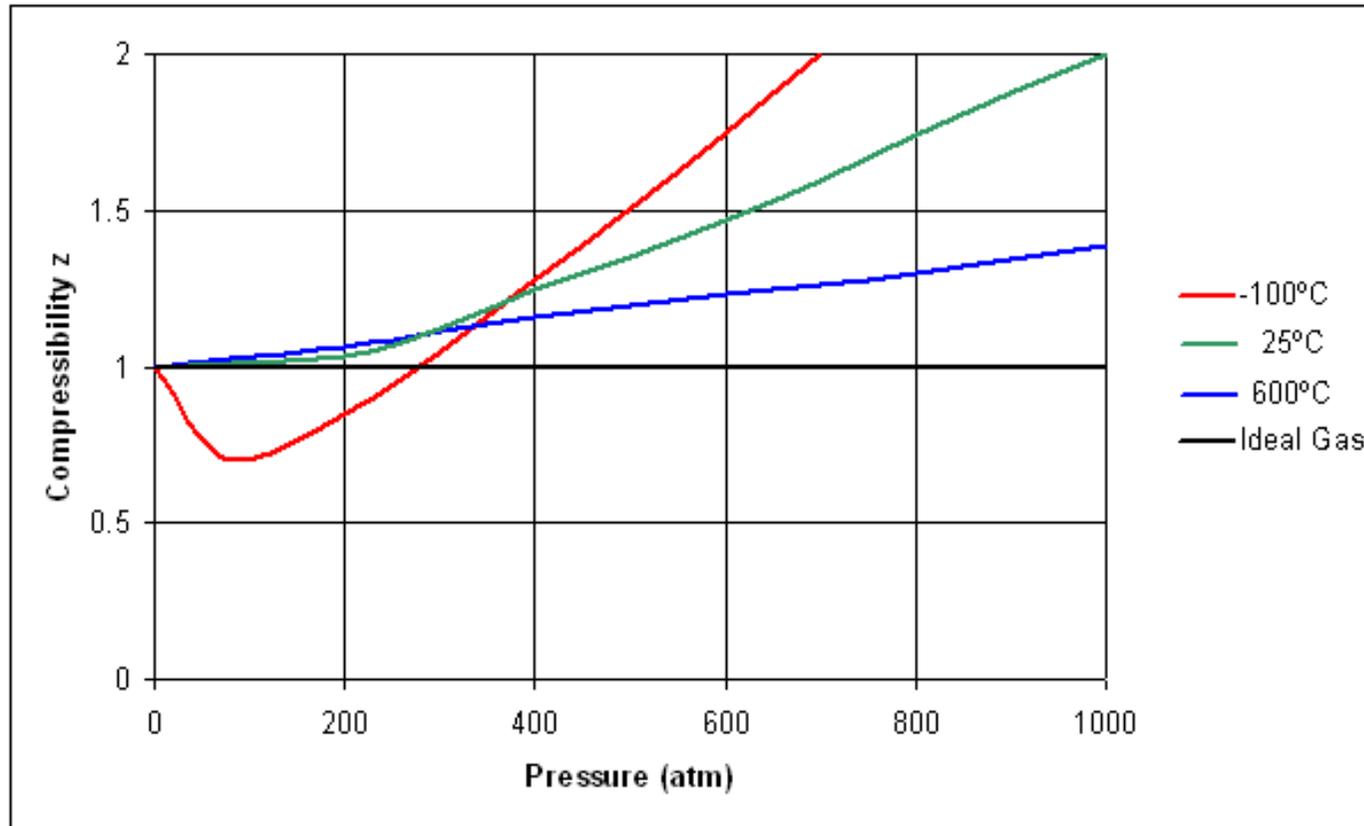
$$\frac{p}{kT} = \rho [1 + B_2(T)\rho] \quad B_2(T) = 2\pi \int dr r^2 [1 - \exp[-\beta u(r)]]$$

- $B_2(T)$: “second coefficient du viriel” et première correction à la loi des gaz parfaits

I. Gaz réels – Basse densité

- $B_2(T) = 2\pi \int dr r^2 [1 - \exp[-\beta u(r)]]$
- Analyse dim. : $u(r) = u_0 f(r/a) \longrightarrow B_2(T) = a^3 F(kT/u_0)$
- A très haute température, seul le coeur dur compte: $B_2(T) \approx a^3 > 0$, la pression est augmentée
- A plus basse température, la partie négative de u commence à contribuer, et B_2 peut devenir négatif
- Note: $p/\rho kT = 1 + \varepsilon F(kT/u_0) + \dots$ avec $\varepsilon = \rho a^3$

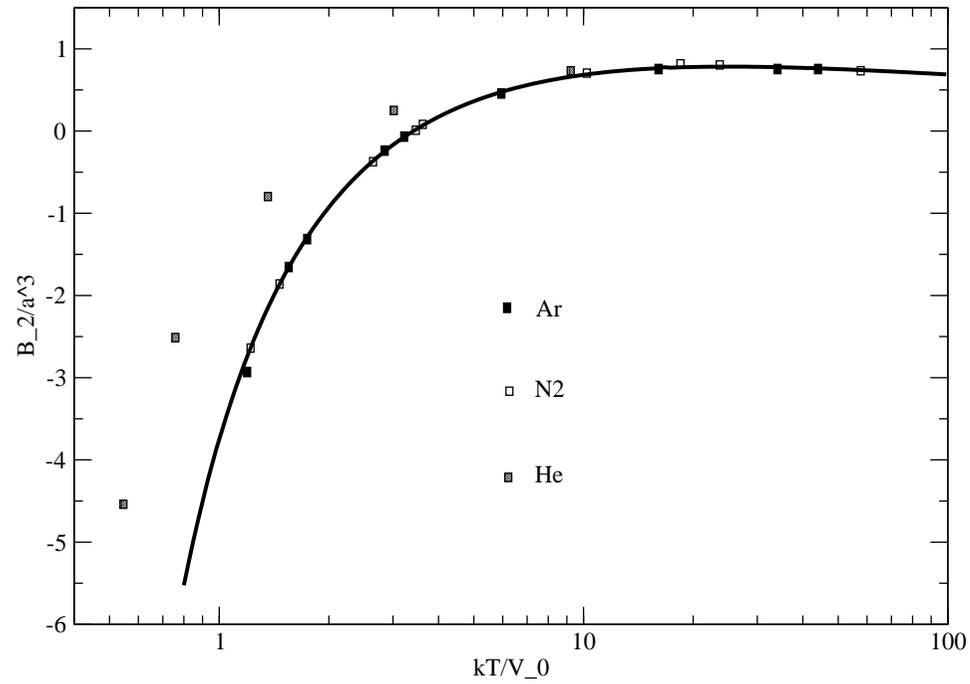
Correction du viriel



pV/kT fonction de p

Correction du viriel

$B_2(T)$



$B_2(T^*) = 0$: température de Boyle

I. Gaz réels – Compressibilité

- Une autre identité remarquable: fluctuations du nombre de particules dans un petit volume V :

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \langle N \rangle \left[1 + \rho \int d^3\vec{r} (g(r) - 1) \right]$$

- Or, dans l'ensemble Grand-Canonique (Amphi 4):

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \langle N \rangle kT \rho \kappa_T$$

- Et donc, de manière générale:

$$kT \left. \frac{\partial \rho}{\partial p} \right|_T = 1 + \rho \int d^3\vec{r} (g(r) - 1)$$

I. Gaz réels – Compressibilité

$$kT \left. \frac{\partial \rho}{\partial p} \right|_T = 1 + \rho \int d^3\vec{r} (g(r) - 1)$$

- Sans interactions: $g(r) \equiv 1 \rightarrow kT \frac{\partial \rho}{\partial p} = 1$ (gaz parfait)
- Interaction de volume exclu: $g(r < a) = 0 \rightarrow$ compressibilité diminuée
- Au contraire, l'attraction conduit à $g(r) > 1$ et donc une augmentation de la compressibilité

I. Gaz réels – Développement du viriel

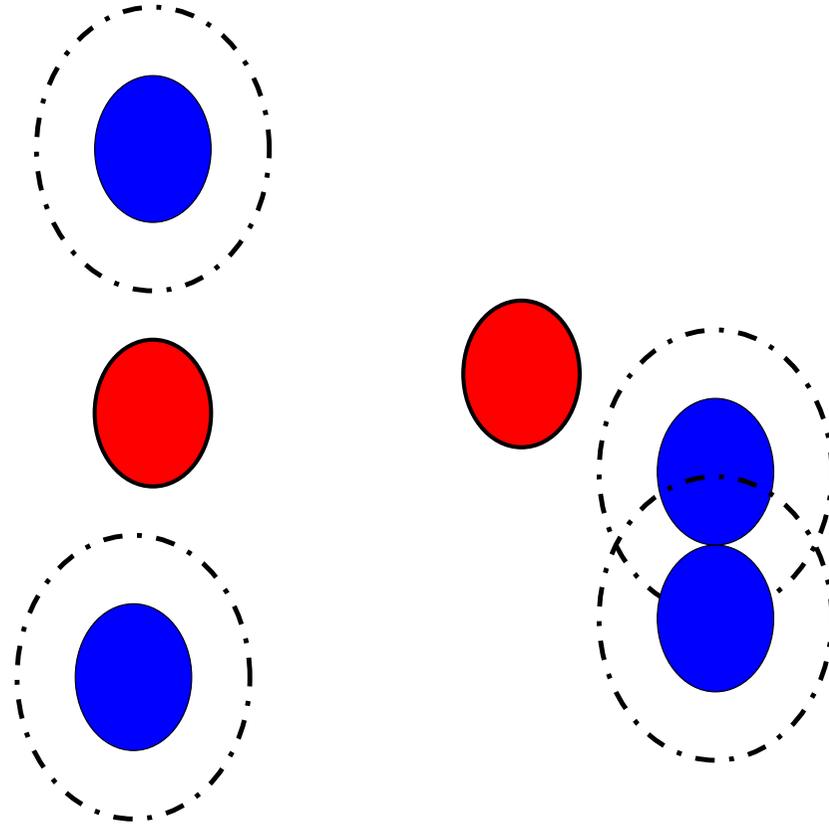
- Plus généralement, on peut écrire:

$$\frac{p}{kT} = \rho + \sum_{n=2}^{\infty} B_n(T)\rho^n$$

où les $B_n(T)$ décrivent les effets à n -particules:

- Interactions directes à n -corps (eventuellement)
 - Interactions induites
-
- Par exemple, pour un potentiel à deux corps, $B_3(T)$ décrit la modification du potentiel due à la présence d'une troisième particule à proximité: $g(r) \neq e^{-\beta u(r)}$
-
- Exemple: interactions de déplétion entre sphères dures

Forces de déplétion: sphères dures



Attraction entropique ! $V_{ex}(1 \cup 2) = V_{ex}(1) + V_{ex}(2) - V_{ex}(1 \cap 2)$

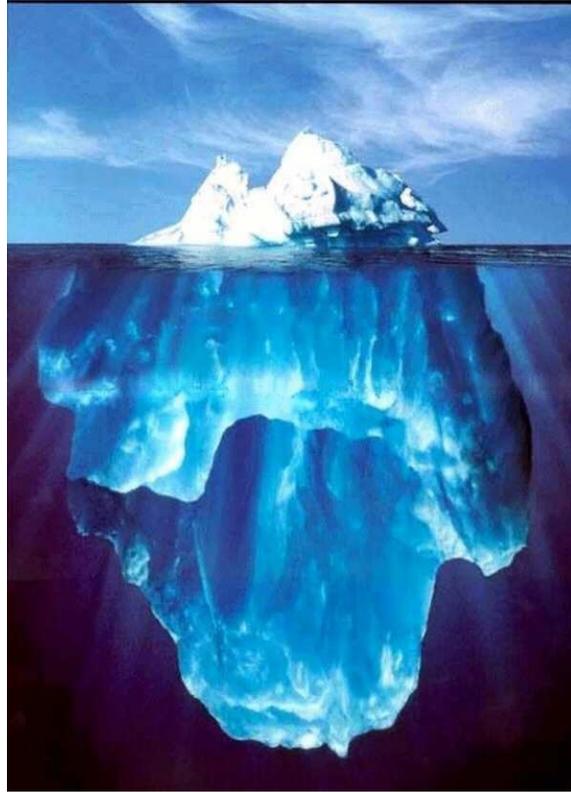
I. Gaz réels – Développement du viriel

- Calcul systématique des B_n , décrivant des effets d'ordre $(\rho a^3)^{n-1}$: possible mais pénible
- → Développement de p en ρa^3 , utile pour comprendre les faibles déviations à la loi du gaz parfait, mais inopérant pour décrire une transition de phase quand le système devient dense ($\rho a^3 \sim 1$)
- Qualitativement: l'attraction conduit à la formation de paires, qui favorisent la formation de triplets, etc. → condensation et formation du liquide ou même du solide !

II. Transitions de phases

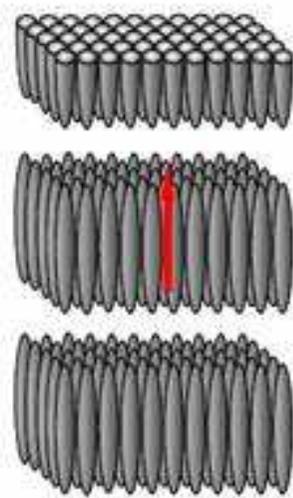
- Grand nombre d'exemples
 - Solide – Liquide – Gaz
 - Ferromagnétique - Paramagnétique
 - Cristaux liquides : nématiques, smectiques, cholestériques
 - Phases cristallographiques dans les solides
 - Suprafluide – liquide visqueux, etc.

Transition solide-liquide

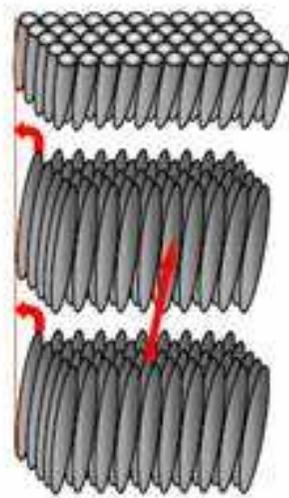


H_2O à 272K et à 274K!

Critaux liquides



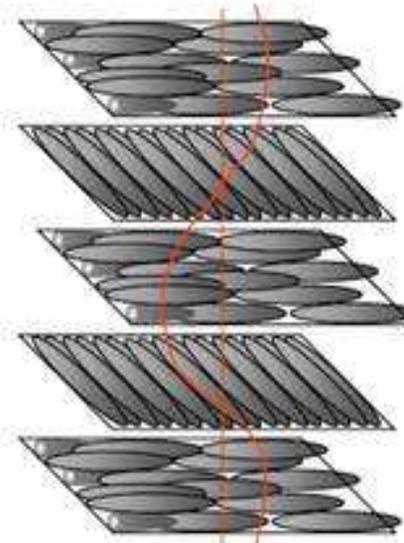
Smectic A (a)



Smectic C (b)

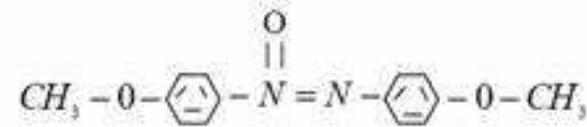


Nematic (c)



Cholesteric (d)

Example of a Nematic:
P-Azoxyanisole (PAA)

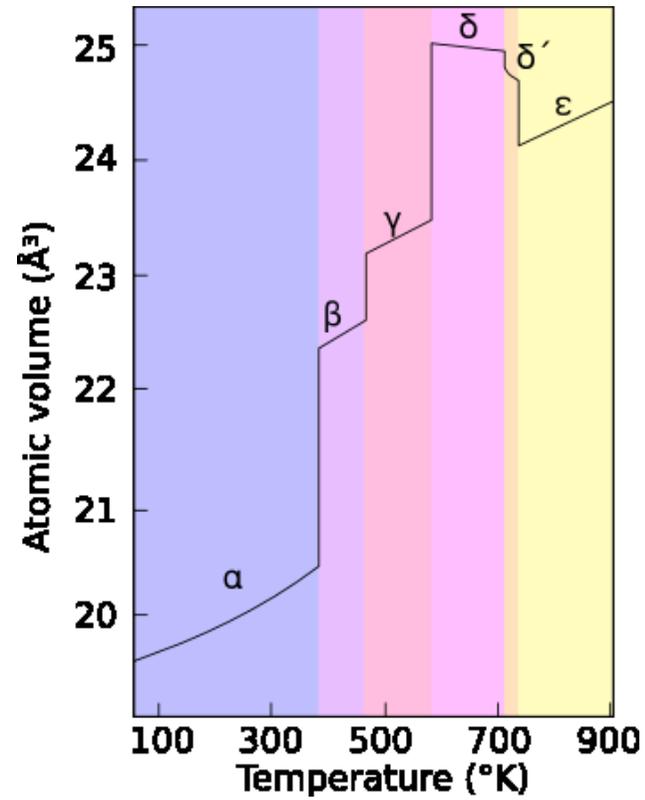


Terminal
Group

Core

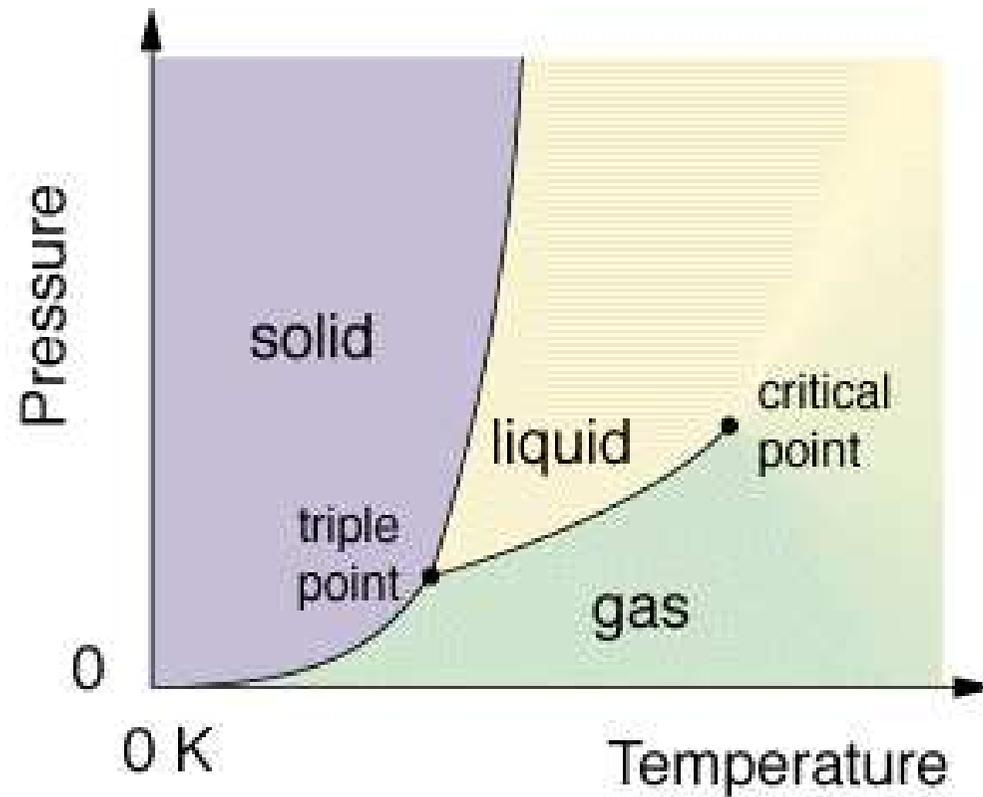
Terminal
Group

Phases cristallographiques



Volume atomique du Plutonium solide

Diagramme des phases



Transitions discontinues/continues, avec/sans changement de symétrie

II. Transitions de phases

- Brisure de symétrie et effets collectifs
- Effets non perturbatifs: discontinuités et singularités – l'interaction change profondément la nature du problème

II. Transitions de phases

- Graal: (1) calcul du diagramme des phases, (2) description du point critique et des singularités
- Méthodes théoriques:
 - approximatives (ex: champ moyen), perturbations resumées
 - modèles exactement solubles (rares)
 - simulations numériques, etc.

II. Transitions de phases: Van der Waals

- Premier exemple historique d'un argument approximatif qui prédit une singularité (Prix Nobel 1910)
- Potentiel d'interaction: coeur dur + partie attractive
- Le coeur dur diminue le volume accessible et donc l'entropie de répartition spatiale
- La partie attractive modifie la répartition de l'énergie entre degrés de liberté de translation et de position

II. Transitions de phases: Van der Waals

- Calcul microcanonique (Amphi 4)
- Rappel: gaz parfait, nb de configurations Ω
 - Répartition spatiale : V^N
 - Répartition énergétique: surface d'une sphère de rayon $P = \sqrt{2mE}$ à $3N$ dimensions: $S_{3N}P^{3N-1}$
 - Indiscernabilité des particules : $\Omega \rightarrow \Omega/N!$

II. Transitions de phases: Van der Waals

- Calcul microcanonique approximatif
- Répartition spatiale : volume exclu = $(N - 1)a^3 \rightarrow$ [Apprx 1]
 $[V - Na^3]^N$
- Répartition énergétique : $E = E_c + \mathcal{U}$, surface d'une sphère de rayon $P = \sqrt{2mE_c}$ à $3N$ dim. avec [Apprx 2]:

$$\mathcal{U} \approx -\alpha N \rho a^3 u_0$$

Chaque particule a une prob. d'interaction ρa^3 , qui contribue $\sim -u_0$ à \mathcal{U}

- Indiscernabilité des particules : $\Omega \rightarrow \Omega/N!$

II. Transitions de phases: Van der Waals

- Calcul microcanonique approximatif: ($b = a^3$)

$$S(E, V, N)/k = \ln \Omega(E, V, N) \approx N \ln \frac{V - Nb}{N} + \frac{3N}{2} \ln \frac{2[E - \mathcal{U}]}{3N} + N \ln C$$

- Température statistique

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{V, N} = \frac{3Nk}{2[E - \mathcal{U}]} \quad E_c = E - \mathcal{U} = \frac{3}{2}NkT$$

- Pression statistique

$$\frac{p}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_{E, N} = \frac{Nk}{V - Nb} - \frac{3Nk}{2[E - \mathcal{U}]} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial V}$$

II. Transitions de phases: Van der Waals

- Equation de Van der Waals



$$p = \frac{NkT}{V-Nb} + \alpha bu_0 \frac{N^2}{V^2}$$

- Rq: Expression du coefficient du viriel dans l'approx. de VdW:

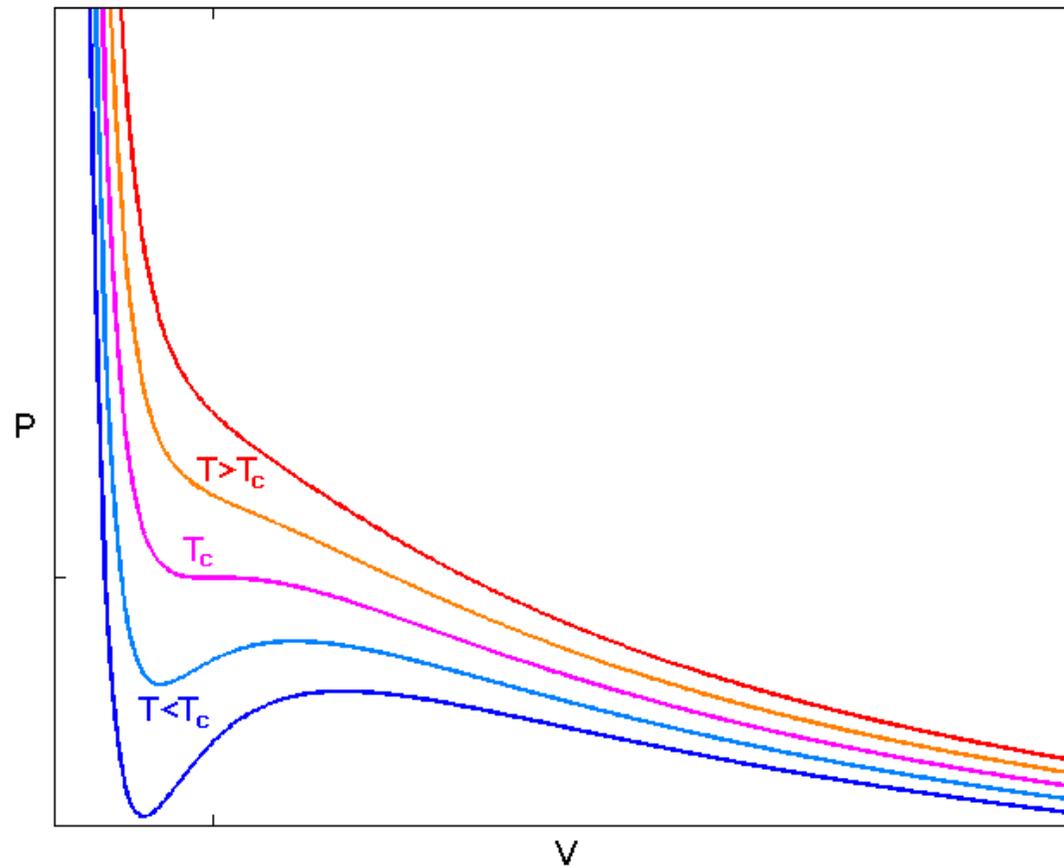
$$B_2(T) = b - \frac{\alpha bu_0}{kT},$$

en accord avec les résultats généraux. En particulier, la température de Boyle vaut $kT^* = \alpha u_0$.

II. Transitions de phases: Van der Waals

- Conséquences de l'équation de Van der Waals: transition liquide-gaz
- $T > T_c$: isothermes régulières, une seule phase
- $T < T_c$: séparation de phases: à pression donnée, 3 intersections:
 - l'une dense (liquide),
 - l'autre diluée (gaz),
 - la troisième instable (compressibilité négative).
- Compétition énergie d'attraction/entropie spatiale

Isothermes de Van der Waals



II. Transitions de phases: Van der Waals

- Conséquences de l'équation de Van der Waals: transition liquide-gaz
- La température critique T_c est telle que la courbe $p(\rho)$ possède un point d'inflexion:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right) = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2}\right) = 0$$

- Deux conditions + équation d'état $\rightarrow T_c, p_c, \rho_c$

$$kT_c = \frac{8}{27}\alpha u_0 = \frac{8}{27}kT^*$$

II. Transitions de phases: Point critique

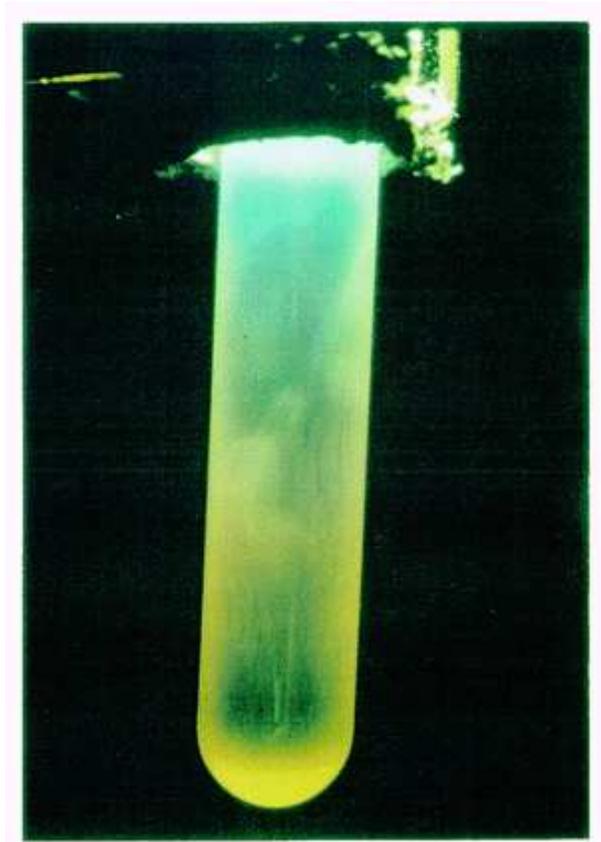
- En ce point *critique*, les deux phases ont la même densité et la compressibilité isotherme $\rho\kappa_T = \partial\rho/\partial p$ est infinie !

- Donc les fluctuations du nombre de particules N dans un petit volume V divergent !

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \langle N \rangle kT \rho \kappa_T \rightarrow \infty$$

- Densité $\rho = N/V \leftrightarrow$ indice optique: Opalescence critique
- Les fluctuations ne sont plus négligeables et les ensembles non équivalents !! ($\infty \times \sqrt{n}$)

Opalescence critique



II. Transitions de phases: Point critique

- Le point *critique* est très particulier: les fluctuations deviennent macroscopiques
- Les corrélations (induites par l'attraction à courte portée) deviennent à longue portée

$$kT_c \left. \frac{\partial \rho}{\partial p} \right|_T = 1 + \rho \int d^3\vec{r} (g(r) - 1) \rightarrow \infty$$

- Supposons $g(r) - 1 = A \exp -(r/\xi)$, alors:

$$\int d^3\vec{r} (g(r) - 1) = 8\pi A\xi^3 \rightarrow \infty$$

La longueur de corrélation ξ diverge !

II. Transitions de phases: Point critique

- Derrière l'approximation de VdW, la réalité physique est nécessairement *collective* !
- Condensation: formation par fluctuations de gouttes de liquide de plus en plus grandes, qui divergent à T_c (cf. la Ola)

II. Transitions de phases: Universalités

- Universalité (1) : Lois des états correspondants (VdW) – dans les variables réduites $\hat{p} = \frac{p}{p_c}$, $\hat{T} = \frac{T}{T_c}$, $\hat{\rho} = \frac{\rho}{\rho_c}$, l'équation d'état est universelle

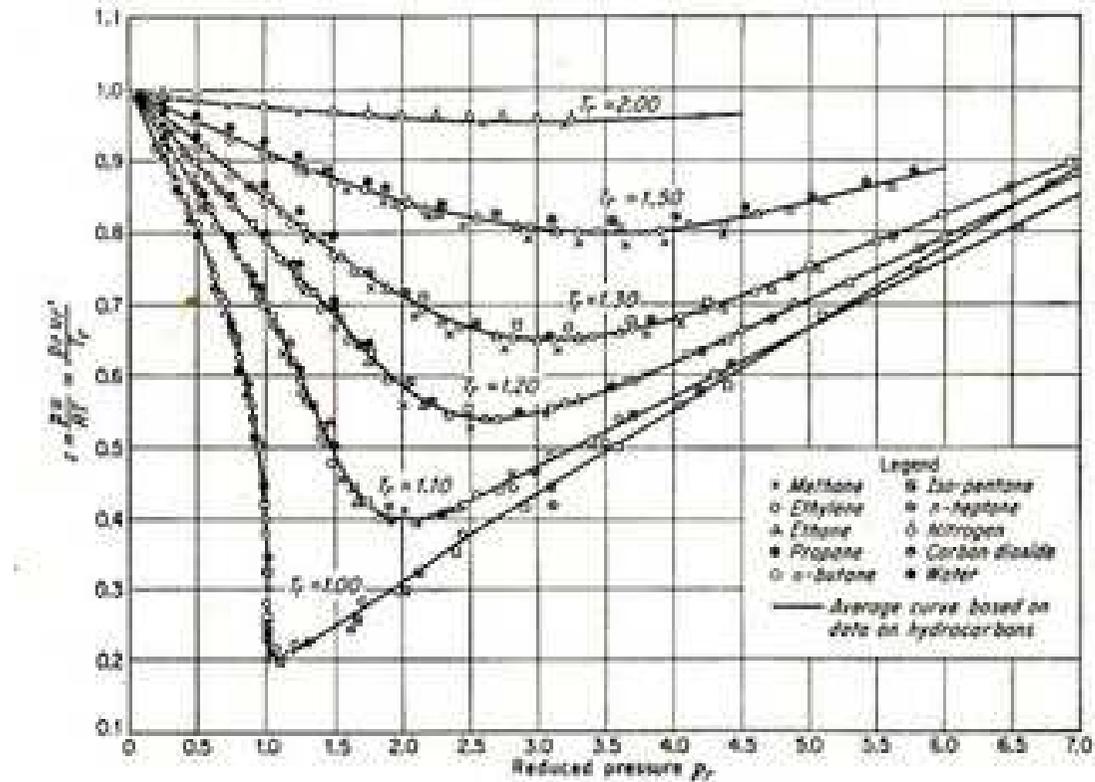
$$(\hat{p} + 3\hat{\rho}^2)(3 - \hat{\rho}) = 8\hat{T}\hat{\rho}$$

- Universalité (2) : forme parabolique de la “cloche” de coexistence

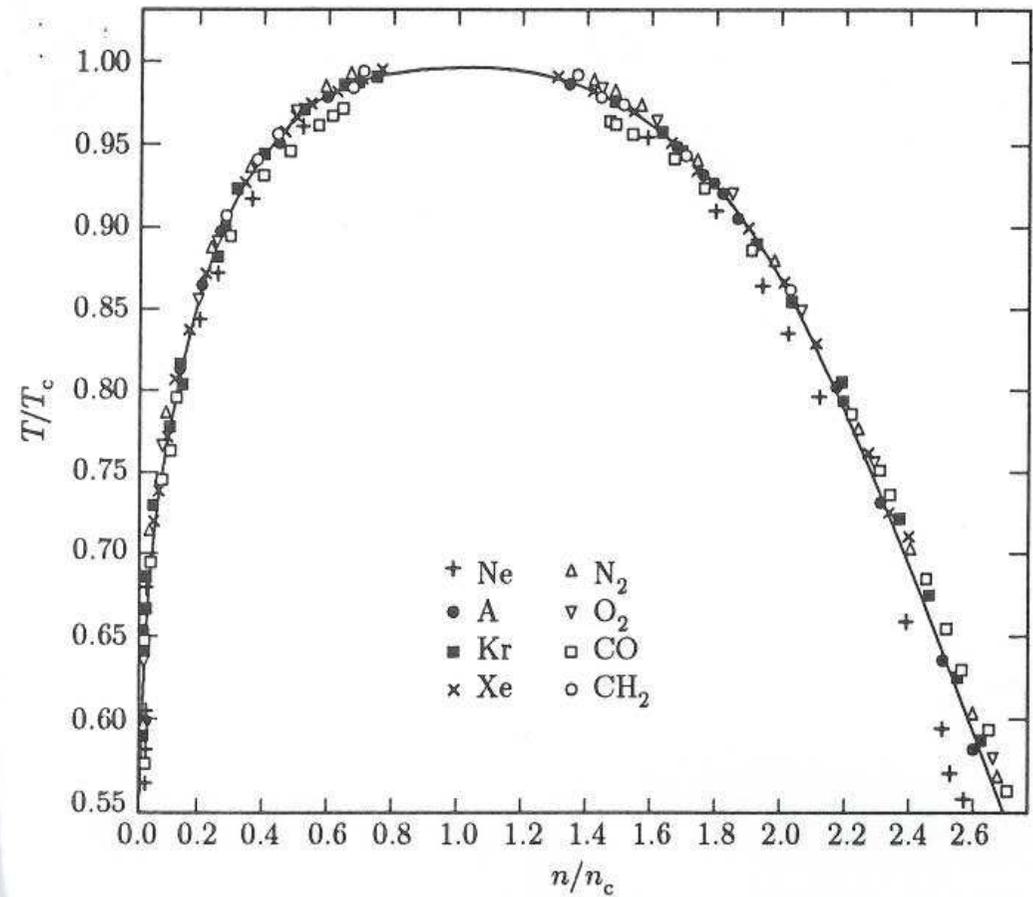
$$\hat{\rho}_+ - \hat{\rho}_- \propto \sqrt{1 - \hat{T}}$$

Loi des états correspondants

$\hat{p}/\hat{\rho}\hat{T}$ en fonction de \hat{p}



Cloche critique: $\Delta\rho \propto \sqrt[3]{1 - \hat{T}}$!?!

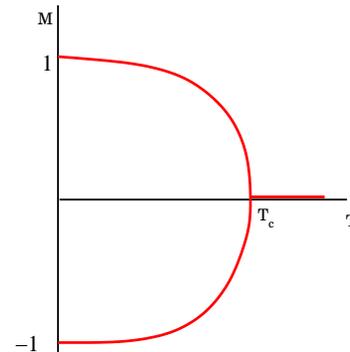


Cloche critique: $\Delta\rho \propto \sqrt[3]{1 - \hat{T}}$!?!

II. La transition para-ferro

- Fer à haute température : pas d'aimantation moyenne m
- Réponse linéaire à un champ extérieur B : $m = \chi(T)B$
- $\chi(T)$ augmente lorsque T baisse et *diverge* à la température de Curie T_c
- Pour $T < T_c$, une aimantation non nulle apparait continûment;

$T_c = 1044\text{K}$ (Fe), 853K (Py)



II. La transition para-ferro

- Comme la divergence de κ_T , la divergence de $\chi(T)$ signale l'apparition de corrélation à *longue portée* entre les moments locaux $\vec{S}(\vec{r})$:

$$\chi(T) = \frac{1}{3kT} \left\langle \int d^3\vec{r} \vec{S}(\vec{0}) \cdot \vec{S}(\vec{r}) \right\rangle$$

- Si la fonction de corrélation spatiale de l'aimantation décroît sur une échelle de longueur ξ , on a: * $\chi(T) \propto \frac{\xi^3}{3kT} \rightarrow \xi \rightarrow \infty$
- Expérimentalement:

$$\chi(T) \propto (T - T_c)^{-\gamma}, \quad \gamma \approx 1.25; \quad m(T) \propto (T_c - T)^\beta, \quad \beta \approx \frac{1}{3}$$

*En fait, $\chi(T) \propto \xi^{d_f}$ avec $d_f < 3$

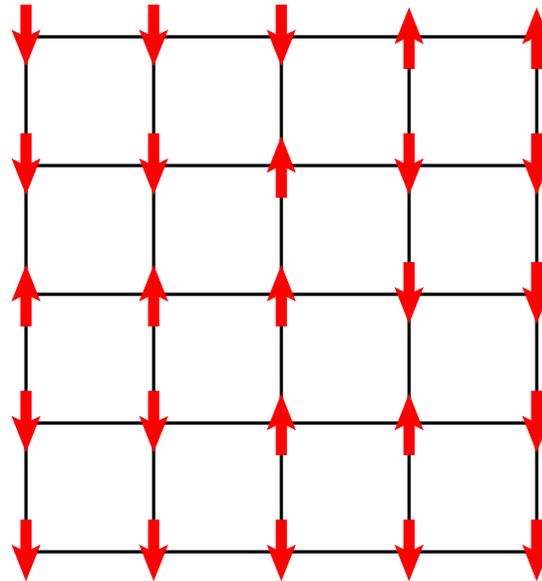
II. La transition para-ferro

- Comment construire une théorie qui prédit
 - Le diagramme des phases
 - La valeur de T_c
 - La valeur des exposants γ, β
 - La valeur de la longueur $\xi(T) \propto (T - T_c)^{-\nu}$

II. Transition para-ferro: modèle d'Ising

- Moments magnétiques binaires: $\vec{S} \rightarrow \pm\mu$, magnéton de Bohr.
- au noeud d'un réseau régulier
- dans un champ magnétique B
- Interactions avec les z plus proches voisins ($J > 0$)

$$\mathcal{H} = -B \sum_i S_i - \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J S_i S_j$$



II. Transition para-ferro: spin indépendants

- Cas $J = 0$ (rappel): aimantation par spin $m(B)$

$$m(B) = \langle S_i \rangle = \mu \tanh\left(\frac{\mu B}{kT}\right)$$

- Susceptibilité (loi de Curie):

$$\chi(T) = \frac{\mu^2}{kT}$$

- Diverge à $T = 0$, pas de corrélations

II. Transition para-ferro: champ moyen

- Cas $J > 0$ – quel est le champ effectif agissant sur S_i ?

$$\mathcal{H}(S_i = -\mu) - \mathcal{H}(S_i = \mu) = 2\mu B + 2\mu J \sum_{j \in V_i} S_j := 2\mu B_{eff}$$

- Champ moyen (Weiss): on remplace $\sum_{j \in V_i} S_j$ par sa valeur moyenne zm [Justifié si $z \gg 1$ (loi des grands nombres)]

- $B_{eff} = B + Jzm$

- Equation auto-consistante:

$$m(B) = \mu \tanh\left(\frac{\mu B + \mu J z m}{kT}\right)$$

II. Transition para-ferro: champ moyen

- Supposons que $B = 0$ qu'une petite fluctuation d'aimantation apparaisse: $m_t \ll 1$

- Par effet de rétroaction, on a alors:

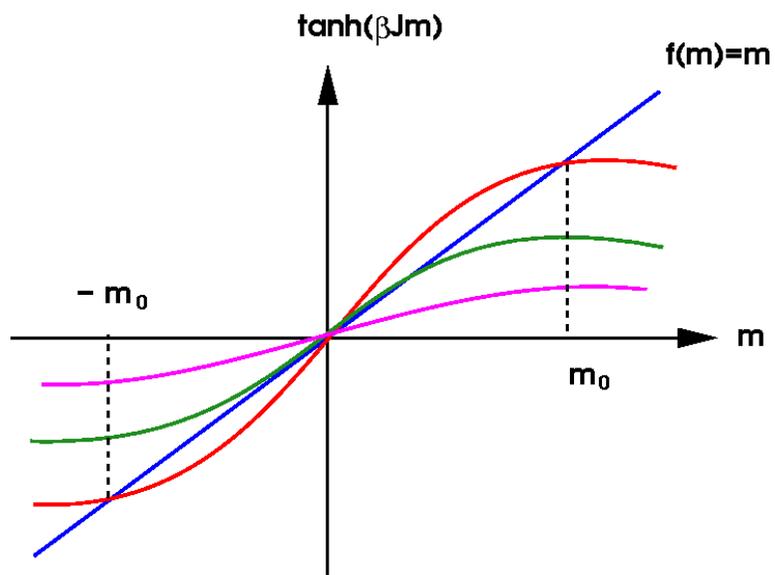
$$m_{t+1} = \mu \tanh\left(\frac{\mu J z m_t}{kT}\right) \approx \frac{\mu^2 J z}{kT} m_t$$

- $kT > \mu^2 J z$: $m_{t+1} < m_t$, les fluctuations s'éteignent
- $kT < \mu^2 J z$: $m_{t+1} > m_t$, les fluctuations explosent
- Propagation de l'ordre proche en proche: un spin aimanté aimante ses voisins, qui aimantent les leurs, etc. – avalanche et corrélations à longue portée pour $T \rightarrow T_c = \mu^2 J z / k$

II. Transition para-ferro: champ moyen

- $T > T_c = \mu^2 z J / k$: une solution $m_0 = 0$
- $T < T_c$: trois solutions, deux stables $\pm m_0(T)$
- $m_0(T) \propto \sqrt{T_c - T}$, ($\beta = 1/2$)

Analyse à champ nul $B = 0$



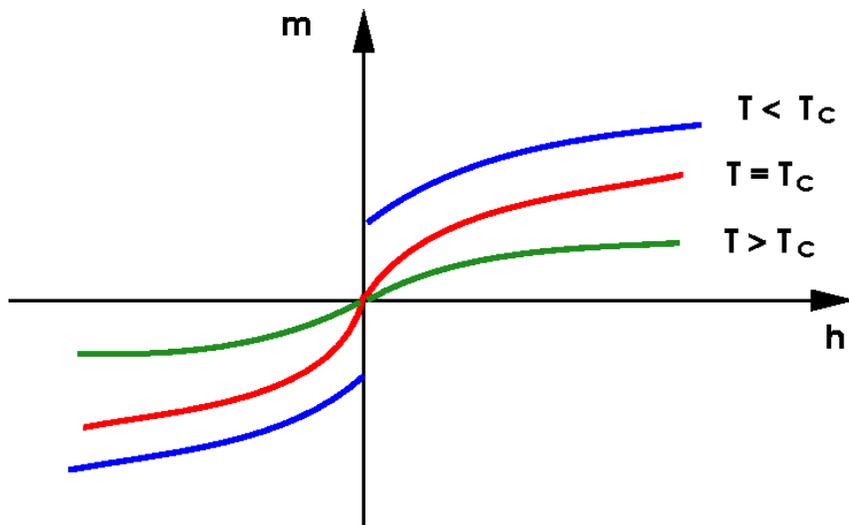
Brisure spontanée de symétrie

$$m \rightarrow -m$$

II. Transition para-ferro: champ moyen

- Analyse de m à $B \rightarrow 0$:

$$\chi(T) \propto \frac{1}{T - T_c}, \quad (\gamma = 1); \quad m(T_c) \propto B^{1/3} (\gg B)$$

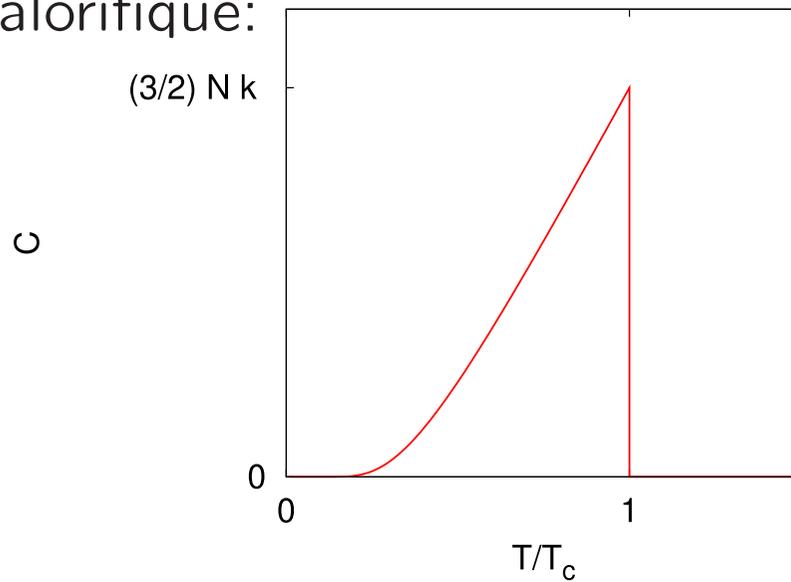


II. Champ moyen: méthode variationnelle

- Argument de Weiss: pas très systématique – comment le généraliser à des cas plus compliqués ?
- Méthode universelle: remplacer \mathcal{H} (compliqué) par le “meilleur” Hamiltonien sans interaction \mathcal{H}_0
- Le “meilleur” ? : Principe variationnel $F \leq \mathcal{F}_0$
- Pour le modèle d’Ising, $\mathcal{H}_0 = -B_{eff} \sum_i S_i$
- Permet de retrouver l’équation auto-consistante de champ moyen

II. Champ moyen: énergie libre

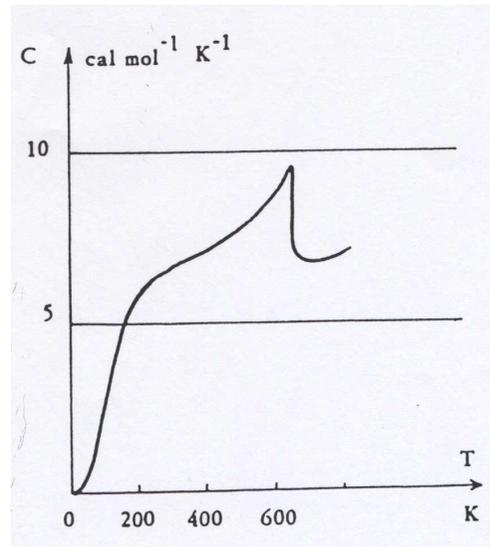
- On obtient de plus l'énergie libre et la singularité de la capacité calorifique:



II. Champ moyen: énergie libre

658090030760

1.01



http://www.chem.berkeley.edu/~chem111/chem111.html

Scan 11 page (11/11) (11/11) (11/11)

$$\Delta C = \frac{3}{2}Nk \approx 3\text{cal/K/mol}$$

II. Champ moyen: forces et faiblesses

- Méthode simple, intuitive, qui permet de modéliser un comportement collectif et souvent d'obtenir un diagramme des phases qualitativement correct, $kT_c = z (J\mu^2 = 1)$
- Les fluctuations sont négligées, les prédictions sont donc quantitativement fausses, surtout en basse dimension. Par exemple:
 - Pas de transition à temp. finie pour Ising sur une ligne ($d = 1$)
 - Pour un réseau carré, $kT_c(d = 2) = 2.27$ (Onsager) < 4



II. Champ moyen: forces et faiblesses

- Pour un réseau cubique, $kT_c(d = 3) = 4.515$ (num.) < 6
- Il existe des méthodes plus sophistiquées pour obtenir de meilleures approximations pour T_c . Ex: Bethe-Peierls:

$$(z - 1) \tanh \frac{J}{kT_c} = 1 \quad kT_c(d = 3) = 4.93 \approx 4.515$$

....MAIS...

II. Au delà du champ moyen...

- Mais comme le champ moyen TOUTES ces méthodes prédisent des exposants critiques triviaux:

$$m_0(T) \propto (T_c - T)^\beta, \quad \beta = \frac{1}{2}; \quad \chi(T) \propto (T - T_c)^{-\gamma}, \quad \gamma = 1$$

- Onsager (1944): solution exacte en $d = 2 \rightarrow \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}$
- Groupe de renormalisation (Wilson 71): champ moyen exact pour $d > 4$ et méthode de calcul perturbatif en $d = 4 - \varepsilon$!!
- Extrapolation pour $\varepsilon = 1$: $\beta \approx 0.32, \gamma \approx 1.25$, en très bon accord avec l'expérience

II. Au delà du champ moyen... Universalité

- Une notion cruciale qui émerge du groupe de renormalisation: l'universalité
- A grande distance $\xi \rightarrow \infty$, les détails microscopiques disparaissent, et les exposants critiques sont universels. Par exemple: Para-Ferro $(m, \chi) \sim$ Liquide-Gaz $(\Delta\rho, \kappa)$!?

- Présence ou Absence de matière = variable d'Ising $(n_i = \frac{1}{2}(1 + S_i))$
- Attraction entre molécules proches = $-JS_iS_j$

