HAL
open science

Etude numérique des corrections d'échelle au comportement dominant à l'équilibre et hors de l'équilibre

Jean-Charles Walter

To cite this version:

Jean-Charles Walter. Etude numérique des corrections d'échelle au comportement dominant à l'équilibre et hors de l'équilibre. Autre [cond-mat.other]. Université Henri Poincaré - Nancy 1, 2009. Français. NNT : 2009NAN10090 . tel-01748337

HAL Id: tel-01748337

https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01748337v1

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

UFR Sciences & Techniques de la Matière et des Procédés (STMP)
École Doctorale Energie Mécanique et MAtériaux (EMMA)
Formation Doctorale Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux (PCMM)

Thèse

présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy I

en Physique

par **Jean-Charles WALTER**

Étude Numérique des Corrections d'Échelle au Comportement Dominant à l'Équilibre et Hors de l'Équilibre

Soutenance publique effectuée le 15 Octobre 2009

Membres du Jury :

Président :	Ian CAMPBELL	Directeur de Recherche CNRS, Université Montpellier II
Rapporteurs :	Ludovic BERTHIER	Chargé de Recherche CNRS, Université Montpellier II
	Damien FOSTER	Maître de Conférence, Université de Cergy-Pontoise
Examinateurs :	Ralph KENNA	*Professor*, Université de Coventry, Angleterre
	Bertrand BERCHE	Professeur, UHP, Nancy I (Directeur)
	Christophe CHATELAIN	Maître de Conférence, UHP, Nancy I (Codirecteur)
Invité :	Bertrand DELAMOTTE	Chargé de Recherche CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Paris

Institut Jean Lamour
Faculté des Sciences & Techniques - 54500 Vandœuvre-lès-Nancy

Remerciements

Cette thèse s'est déroulée entre Octobre 2006 et Octobre 2009 au Laboratoire de Physique des Matériaux à Vandœuvre-lès-Nancy qui s'est fondu entre temps dans l'Institut Jean Lamour. Je remercie les membres de l'Institut. Certains furent mes enseignants lorsque j'étais étudiant. Lorsque j'ai eu moi-même à enseigner, ils ont partagé leur temps et leur expérience avec moi. Et beaucoup m'ont soutenu à un moment ou un autre par un conseil, un sourire ou simplement leur présence.

Je remercie les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont manifesté à l'égard de notre travail. J'ai beaucoup apprécié de voir Ian Campbell tenir la place de président. Sa contribution dans les sujets abordés dans cette thèse est considérable. Ludovic Berthier et Damien Foster ont assumé la tâche difficile de rapporteur, et Bertrand Delamotte a aimablement accepté le rôle d'invité. Ralph Kenna m'a fait le plaisir de participer au jury. Nous avons collaboré ensemble et nos travaux constituent une part importante de cette thèse. Je le remercie chaleureusement pour ses déplacements réguliers depuis Coventry et pour avoir partagé de bons moments durant ces trois années à Nancy, Coventry et aussi lors des conférences annuelles à Leipzig.

J'ai eu le privilège de réaliser cette thèse dans l'environnement stimulant procuré par le Groupe de Physique Statistique autant sur le plan scientifique que humain. J'ai une pensée pour les étudiants et thésards qui ont croisé mon chemin dans le groupe, en particulier Mario Collura et Xavier Durang qui furent un précieux soutien pendant la période exigeante de rédaction et de soutenance. J'ai eu la chance de rencontrer de nombreuses personnes et de faire beaucoup de voyages. Ma thèse fut notamment ponctuée de séjours réguliers dans le groupe de physique théorique de Leipzig dirigé par Wolfhard Janke en particulier lors de séjours financés par l'Université Franco-Allemande.

J'exprime toute ma gratitude envers Bertrand Berche et Christophe Chatelain. Bertrand m'a apporté sa confiance. J'ai pu intégrer le groupe dès le stage de Master 2 et par la suite m'engager dans la thèse. J'ai été très inspiré par sa perspicacité, son enthousiasme et son ouverture d'esprit. Je le remercie d'avoir tenu le rôle de directeur de thèse pour des raisons administratives. Même si j'ai eu à travailler avec lui, mon encadrement a été principalement effectué par Christophe.
Christophe fut mon superviseur à partir de mon stage de Master 2 dont le sujet était les interprétations stochastiques de la mécanique quantique. Je n'avais à l'époque qu'une vague idée des exigeances de la recherche. Durant ces trois ans et demi, il a contribué avec patience à l'essentiel de ma formation scientifique en y intégrant l'humilité, la persévérance, et la joie de la compréhension. Ces aspects furent importants pour moi dans mon orientation. Je suis conscient d'avoir approfondi de belles notions, au-delà de l'aspect scientifique.

En observant cette thèse, je m'aperçois que ses qualités viennent de mes rencontres et de l'attention apportée par Christophe et Bertrand. Les erreurs, approximations et négligences viennent de moi.

Ces remerciements ne seraient pas complets sans un témoignage à ma famille sans laquelle je n'aurais pas réalisé cette thèse.

Table des matières

I Étude des corrections du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure **11**

1 Généralités sur les phénomènes critiques **13**
1.1 Transitions de phase et comportement critique 13
1.1.1 Un point singulier 13
1.1.2 Comportement critique du modèle d'Ising 17
1.2 Les fluctuations critiques et leurs descriptions 24
1.2.1 Théorie de Ginzburg-Landau 24
1.2.2 Critère de Ginzburg 26
1.3 L'esprit du groupe de renormalisation 28
1.3.1 Hypothèse d'homogénéité 28
1.3.2 Variables non pertinentes dangereuses 33

2 Comportement d'échelle étendu pour $d > 4$ **35**
2.1 Corrections d'échelle : le schéma habituel 35
2.1.1 Groupe de renormalisation 35
2.1.2 Développement haute température 38
2.2 Comportement d'échelle étendu 38
2.2.1 Construction de la forme d'échelle 38
2.2.2 Application au modèle d'Ising en dimensions supérieures . . . 40
2.3 Simulations Monte Carlo 41
2.3.1 L'algorithme de ver (*worm algorithm*) 41
2.3.2 Analyse des données 44

3 Effets de taille finie anormaux **55**
3.1 Introduction 55
3.1.1 Effets de taille finie : le schéma classique 55
3.1.2 Effets de taille finie anormaux 56
3.2 Méthodes numériques 58
3.2.1 L'algorithme de Wolff 58
3.2.2 La repondération de l'histogramme 60
3.3 La susceptibilité pour les conditions de bords libres 61
3.3.1 Susceptibilité calculée avec tous les sites 61
3.3.2 Susceptibilité calculée avec les sites de cœur 63

II Vieillissement de systèmes de spins $2d$ complètement frustrés 79

4 Phénomènes critiques hors équilibre 81
4.1 Phénoménologie 81
4.1.1 Brisure de l'invariance par translation temporelle 81
4.1.2 Cinétique de domaines 82
4.2 Théorie d'échelle des fonctions à deux temps 85
4.2.1 Les fonctions de corrélation 88
4.2.2 Les fonctions de réponse 94
4.2.3 Le rapport fluctuation-dissipation 99
4.3 Vieillissement du modèle XY $2d$ 103
4.3.1 Propriétés à l'équilibre 103
4.3.2 La dynamique du modèle XY 105

5 Le vieillissement du FFIM $2d$ 109
5.1 Le modèle d'Ising complètement frustré $2d$ (FFIM) 109
5.1.1 FFIM à l'équilibre 110
5.1.2 Controverse concernant la dynamique du FFIM 115
5.2 Dynamique à l'équilibre 116
5.2.1 Dynamique à température finie 117
5.2.2 Dynamique critique 121
5.3 Vieillissement lors d'une trempe à $T_c = 0$ 125
5.3.1 Les fonctions de corrélation spin-spin 125
5.3.2 Le rapport fluctuation-dissipation 127

6 Le vieillissement du FFXY $2d$ 145
6.1 Comportement critique à l'équilibre 146
6.1.1 L'état fondamental : deux symétries 146
6.1.2 Deux transitions 148
6.2 Vieillissement du FFXY lors d'une trempe 151
6.2.1 Vieillissement des angles 151
6.2.2 Vieillissement de la chiralité 156

Bibliographie 187

Introduction

La Physique Statistique est la discipline dont le rôle est de comprendre le comportement des systèmes qui présentent un nombre de degrés de liberté si grand qu'ils échappent à une description déterministe. La tâche est difficile et donc plus intéressante lorsque ces degrés de liberté sont fortement corrélés comme c'est le cas lors d'une transition de phase. On peut citer les exemples de la transition liquide-vapeur de l'eau ou la transition ferromagnétique d'un aimant. Une approche possible dans la description de tels systèmes est de considérer des modèles définis par des variables sur les nœuds d'un réseau. En dépit de leur simplification presque caricaturale, ces modèles présentent des caractéristiques qui sont partagées par les systèmes expérimentaux. On parle alors d'universalité. Au-delà des méthodes analytiques exactes ou approchées, les capacités informatiques actuelles permettent d'envisager une étude numérique de ces modèles. La technique que nous utiliserons durant cette thèse est la simulation Monte Carlo en référence au célèbre casino où le hasard est également d'usage.
Cette thèse contient deux parties. La première partie s'attache à l'étude de systèmes à l'équilibre. Dans le premier chapitre, nous introduisons l'aspect de la physique statistique qui nous intéresse à savoir les phénomènes critiques dont émergeront des propriétés universelles. On observe en particulier des comportements algébriques de certaines grandeurs thermodynamiques dont les exposants définissent les classes d'universalité. Nous présentons le modèle d'Ising qui est le modèle paradigmatique dans l'étude des phénomènes critiques du fait de sa simplicité et de sa capacité à reproduire le comportement critique de nombreux systèmes expérimentaux. En dimensions supérieures à la dimension critique supérieure, qui vaut quatre dans ce cas, on peut utiliser l'approximation du champ moyen pour obtenir les exposants critiques. Dans le deuxième chapitre, nous présentons une étude des corrections d'échelle au comportement thermique de la susceptibilité en dimensions cinq, six, sept et huit dans le cadre du comportement d'échelle étendu (de l'anglais *extended scaling*) qui permet d'étendre les développements critiques pour toutes températures supérieures à la température critique. Des évidences de cette efficacité ont déjà été fournies pour le modèle d'Ising en dimension un, deux et trois. Nous nous intéressons à la susceptibilité en dimensions supérieures à quatre pour lesquelles les exposants critiques ne dépendent plus de la dimension. On s'attend à un comportement dominant de type champ moyen mais avec des corrections dominantes non analytiques en dimensions cinq et six qui s'accompagnent de logarithmes en dimension six. Au-delà de la dimension six, les corrections dominantes sont analytiques. On peut avoir une intuition de ces corrections en développant perturbativement le propagateur du modèle ϕ^4. Il est possible d'obtenir

avec précision la valeur des paramètres du développement critique avec les corrections dominantes dans le cadre du comportement d'échelle étendu en interpolant les données numériques obtenues par simulations Monte Carlo avec l'algorithme de ver (*worm algorithm* en anglais) programmé en temps continu. Les expressions que nous obtenons sont en accord avec les données numériques depuis la région critique jusqu'à la région haute température confirmant ainsi l'efficacité du comportement d'échelle étendu dans le régime de champ moyen. Dans le troisième chapitre, nous présentons des résultats préliminaires sur l'étude des effets de taille finie du modèle d'Ising à cinq dimensions. Il est établi théoriquement que la longueur de corrélation du modèle d'Ising présente une croissance anormale en fonction de la taille du système. Alors qu'habituellement cette croissance est proportionnelle à la taille du système, elle croît ici algébriquement comme $\xi \sim L^{d/4}$ où d est la dimension. La longueur de corrélation croît donc plus rapidement que la taille du système. Cette caractéristique a été vérifiée extensivement pour les conditions de bords périodiques. En revanche, il existe dans la littérature des arguments analytiques à l'encontre d'un tel scénario pour les conditions de bords libres. Ce type de conditions de bords n'a jamais été étudié auparavant pour des conditions de bords libres du fait des corrections d'échelle considérablement plus importantes que pour les conditions de bords périodiques. Nous avons effectué des simulations Monte Carlo du modèle d'Ising à cinq dimensions avec des conditions de bords libres en utilisant l'algorithme de Wolff combiné à la repondération de l'histogramme. Nous donnons des évidences numériques claires que la susceptibilité des spins de volume se comporte comme $\chi \sim \xi^2 \sim L^{5/2}$, menant à une croissance anormale de la longueur de corrélation en fonction de la taille du système.

La deuxième partie de la thèse s'attache à l'étude des phénomènes critiques hors de l'équilibre et plus particulièrement au phénomène de vieillissement. Dans le premier chapitre, nous définissons ce qui distingue le régime de vieillissement parmi les phénomènes hors équilibre. Nous nous appuyons sur les exemples paradigmatiques du modèle d'Ising et du modèle XY bidimensionnels. Ce dernier exemple présente un intérêt pour les modèles que nous étudierons par la suite car, comme le modèle XY, leurs transitions à l'équilibre est gouvernée par l'appariement de défauts topologiques qui ralentissent la dynamique lors d'une trempe depuis la phase haute température. Dans le deuxième chapitre, nous étudions le vieillissement du modèle d'Ising complètement frustré bidimensionnel par simulation Monte Carlo locale de type Glauber. La frustration complète est un problème de difficulté intermédiaire entre les modèles sans frustration dont le comportement est connu et les modèles frustrés avec du désordre dont le comportement n'est pas encore parfaitement cerné. Nous étudions préalablement la dynamique à l'équilibre *via* la fonction d'autocorrélation. Dans la phase haute température, nos résultats donnent une première évidence de la présence de défauts topologiques libres tandis que la dynamique à la température critique se prête à une estimation précise de l'exposant dynamique. Le vieillissement lors d'une trempe depuis la phase haute température met clairement en évidence la présence de corrections logarithmiques dans les variables d'échelle des fonctions de corrélation et du rapport fluctuation-dissipation, signature de l'influence des défauts topologiques. Nous estimons par ailleurs toutes les grandeurs universelles qui caractérisent le vieillissement de ce système. Dans le troisième chapitre, nous nous intéressons au vieillissement du modèle XY complètement frustré bidimensionnel dont le hamiltonien est le

même qu'un réseau de jonctions Josephson sous champ magnétique transverse. Outre les spins bidimensionnels, la description de l'état fondamental nécessite l'introduction d'une variable additionnelle appelée chiralité qui est définie comme le signe de la circulation des spins autour de chaque plaquette. La frustration permet un état fondamental original qui est invariant sous l'action de deux groupes de symétrie : la rotation globale de tous les spins par un même angle (symétrie $U(1)$) et l'inversion du signe de toutes les chiralités (symétrie Z_2). Il est désormais établi qu'il existe deux transitions associées à la brisure de chaque symétrie à des températures distinctes. Cette conclusion est basée sur le fait que des défauts topologiques de charge demi-entière sont présents sur les parois de domaine de la chiralité. Alors que la transition associée aux spins est clairement de type Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless, la transition de la chiralité a donné lieu à des débats dans la littérature. Les arguments les plus convaincants actuellement concluent à la classe d'universalité du modèle d'Ising bidimensionnel. Nous souhaitons caractériser le vieillissement de ce modèle pour les deux types de variables, cerner l'influence d'un état fondamental avec deux symétries sur des dynamiques extensivement étudiées et obtenir un signal clair sur la classe d'universalité de la chiralité. Puisqu'il est possible de réécrire le hamiltonien comme celui du modèle XY avec une constante de couplage effective, nous trempons dans un premier temps le système depuis l'état fondamental jusque dans la phase basse température. Nous mettons en évidence numériquement un régime de vieillissement pour l'autocorrélation et le rapport fluctuation-dissipation qui est décrit de manière identique au modèle XY dans l'approximation des ondes de spin, ce qui assure notamment que l'exposant dynamique est $z = 2$. Dans un second temps, une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température de Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless met en évidence des corrections logarithmiques des variables d'échelle de la fonction de corrélation spin-spin et du rapport fluctuation-dissipation semblables au modèle XY à cause de la présence de vortex. Les grandeurs universelles telles que la valeur de l'exposant de décroissance de l'autocorrélation et la valeur asymptotique du rapport fluctuation-dissipation sont estimées et se révèlent incompatibles avec le modèle XY. Finalement, nous étudions le vieillissement de la chiralité lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique. Les formes d'échelle de l'autocorrélation et du rapport fluctuation-dissipation sont semblables au modèle d'Ising, mais les variables d'échelle comportent des corrections logarithmiques, manifestation de la présence des défauts topologiques dans le système. Cependant, les estimations des grandeurs universelles sont incompatibles avec le modèle d'Ising.

Cette thèse a donné lieu à trois articles publiés concernant le vieillissement du modèle d'Ising et XY complètement frustrés $2d$ et le comportement d'échelle étendu du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure. Un autre article sur les effets de taille finie du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure est encore en préparation. Voici la liste contenant les références des articles publiés :

Logarithmic Corrections in the Aging of the 2d Fully-Frustrated Ising Model,
J-C. Walter et C. Chatelain, *J. Stat. Mech.* (2008) P07005.
(cond-mat/0707.1959)

Extended Scaling in High Dimensions,
B. Berche, C. Chatelain, C. Dhall, R. Kenna, R. Low et J-C. Walter,
J. Stat. Mech. (2008) P11010.
(cond-mat/0807.2546)

Numerical Investigation of the Aging of the Fully-Frustrated XY Model,
J-C. Walter et C. Chatelain , *J. Stat. Mech.* (2009) P10017.
(cond-mat/0907.1474)

Première partie

Étude des corrections du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure

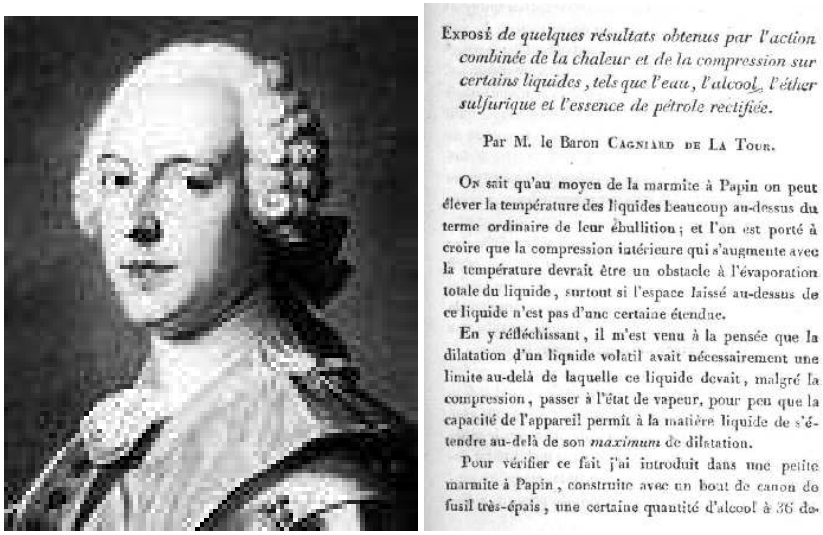
Chapitre 1

Généralités sur les phénomènes critiques

1.1 Transitions de phase et comportement critique

1.1.1 Un point singulier

Un volume macroscopique d'eau (H_2O) présente différentes propriétés en fonction des paramètres extérieurs tels que la température T et la pression P. L'eau peut exister dans les états solide, liquide et gazeux. Le passage d'une phase à l'autre est appelé transition de phase. Le diagramme de phase de l'eau dans le plan $T - P$ est représenté par le schéma $a)$ sur la figure 1.2. On remarque la présence d'un point C appelé point critique. Cette thèse a pour objet la decription des propriétés thermodynamiques de modèles au voisinage de ce point. La dénomination du point critique (de l'anglais *critical point*) est attribuée à Thomas Andrews (voir par exemple l'ouvrage sur l'histoire des phénomènes critiques [Domb]). Andrews étudiait les propriétés du point critique du dioxyde de carbone (CO_2) dans un travail qu'il publia en 1869 [Andr1869]. Un article récent [Berc09] mentionne l'existence d'un travail antérieur de Charles Cagniard de la Tour dont le portrait est représenté sur la figure 1.1. En 1822, il présente dans deux articles [Cagn1822] le protocole qui permet d'amener divers composés dans le régime critique et décrit notamment le phénomène d'opalescence critique. La première page de l'un de ces articles est présentée sur la figure 1.1. Il nomme le point critique comme un état particulier dans un autre article paru en 1823 [Cagn1823]. Il existe beaucoup d'autres exemples de transitions de phase dans la nature. Par exemple, l'isotope 4 de l'hélium $^4\mathrm{He}$ existe aussi sous les phases solide, liquide et gazeuse comme l'eau. Le diagramme de phase est représenté par le schéma $c)$ de la figure 1.2. Mais le domaine des transitions de phase ne se limite pas aux passages entre les phases solide, liquide et gazeuse d'un composé. Il existe dans ce diagramme de phase une frontière qui sépare la phase liquide. Elle est appelée ligne λ à cause de la ressemblance de la chaleur spécifique lors de la transition avec la lettre grecque. La chaleur spécifique est représentée sur la figure 1.5 d'après les données expérimentales de Bu-



Exposé *de quelques résultats obtenus par l'action combinée de la chaleur et de la compression sur certains liquides, tels que l'eau, l'alcool, l'éther sulfurique et l'essence de pétrole rectifiée.*

Par M. le Baron Cagniard de La Tour.

On sait qu'au moyen de la marmite à Papin on peut élever la température des liquides beaucoup au-dessus du terme ordinaire de leur ébullition; et l'on est porté à croire que la compression intérieure qui s'augmente avec la température devrait être un obstacle à l'évaporation totale du liquide, surtout si l'espace laissé au-dessus de ce liquide n'est pas d'une certaine étendue.

En y réfléchissant, il m'est venu à la pensée que la dilatation d'un liquide volatil avait nécessairement une limite au-delà de laquelle ce liquide devait, malgré la compression, passer à l'état de vapeur, pour peu que la capacité de l'appareil permît à la matière liquide de s'étendre au-delà de son *maximum* de dilatation.

Pour vérifier ce fait j'ai introduit dans une petite marmite à Papin, construite avec un bout de canon de fusil très-épais, une certaine quantité d'alcool à 36 de-

FIG. 1.1 – Charles Cagniard de la Tour (1777-1859) est-il le véritable pionnier dans l'étude des phénomènes critiques ? À droite, la première page de l'un de ses article de 1822 [Cagn1822] décrit le protocole qui permet d'obtenir un comportement critique pour différentes substances antérieurement aux travaux de Thomas Andrews [Andr1869] auquel on attribue la dénomination du point critique.

ckingham et Fairbank [Buck61]. La ligne λ définit le lieu de la transition λ ou transition superfluide. À haute température, le liquide est appelé He I et il possède une viscosité normale. À basse température, le liquide est appelé He II et il acquiert une viscosité nulle : c'est la phase superfluide de l'hélium [Klei01, Binn95]. On parle de phases cristallines lorque les composants élémentaires d'un cristal s'arrangent selon différentes symétries [Land67]. Le schéma $b)$ de la figure 1.2 représente les différentes phase cristallines de la glace repérées par un chiffre romain [Wiki]. Les matériaux ferromagnétiques - comme le nickel Ni - ont la propriété d'acquérir spontanément un moment magnétique lorsque la température est suffisamment basse, et ceci même en l'absence de champ extérieur. Ce moment magnétique est aussi appelé aimantation. C'est la transition ferromagnétique qui sépare deux phases : la phase ferromagnétique à basse température et la phase paramagnétique à haute température. Un tel composé sera sensible aux variables extérieures T et H. Le diagramme de phase dans le plan $H-T$ est représenté par le schéma $d)$ de la figure 1.2 [Stan71, Yeom94]. La transition ferromagnétique intervient en un point critique, noté C sur le diagramme de phase, caractérisé par la température critique T_c. Il existe d'autres transitions faisant intervenir une réorganisation de la structure électronique : la transition supraconductrice et la transition métal-isolant [Ashc76].

De quelle manière s'effectuent ces transitions ? Peut-on les décrire en un seul formalisme ? Dans le cadre de la classification de Ehrenfest, on peut définir deux grands types

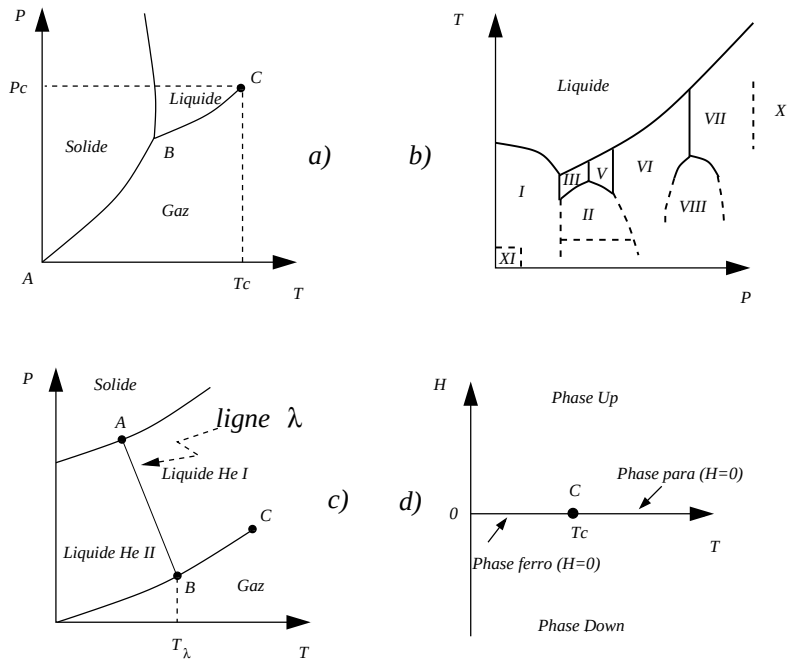


FIG. 1.2 – Diagrammes de phase schématiques : $a)$ H_2O dans le plan $P-T$; $b)$ les phases cristallines de la glace dans le plan $T-P$ où les chiffres romains correspondent aux différentes structures cristallines ; $c)$ ^{4}He dans le plan $P-T$ et $d)$ diagramme de phase de Ni dans le plan $H-T$.

de transitions [Stan71, Binn95]. Lorsqu'une des dérivées premières de l'énergie libre est discontinue, on a à faire à une transition du premier ordre. C'est le cas notamment de la transition entre les phases liquide et gazeuse de l'eau le long de la ligne BC du diagramme $a)$ de la figure 1.2. L'énergie est discontinue, d'où l'existence de chaleur latente. Pour un ferromagnétique en présence d'un champ magnétique extérieur, c'est l'aimantation qui est discontinue lors du passage entre les deux orientations possibles de l'aimantation *i.e.* parallèle ou anti-parallèle au champ (ces deux orientations opposées sont appelées *up* et *down* sur le diagramme $d)$ de la figure 1.2). La deuxième famille est celle des transitions continues. Elles possèdent au moins une dérivée première de l'énergie libre qui est continue. On rencontre des transitions continues notamment au point critique de l'eau et des matériaux ferromagnétiques ainsi que le long de la ligne λ pour la transition superfluide.

Lors d'une transition de phase, on peut définir un paramètre d'ordre Φ. Il permet de distinguer entre chacune des phases. La convention est de choisir une valeur nulle dans la phase de haute symétrie et une valeur non nulle dans la phase où la symétrie est brisée. Pour la transition liquide-vapeur $\Phi = \Delta\rho = |\rho_{gaz} - \rho_{liq.}|$ où ρ_{gaz} et $\rho_{liq.}$ sont respectivement les densités du gaz et du liquide. Le paramètre d'ordre pour différentes

transitions liquide-vapeur est représenté en fonction de la température sur la figure 1.3, en se plaçant sur la ligne de coexistence du liquide et de la vapeur (d'après les travaux de Guggenheim [Gugg45]). Une régression algébrique des données représentées sur la

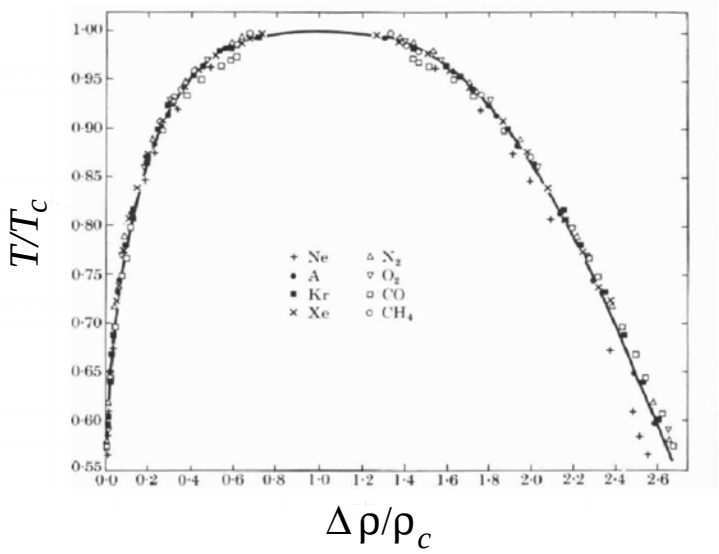


FIG. 1.3 – Le paramètre d'ordre $\Delta\rho = |\rho_{gaz} - \rho_{liq.}|$ pour différents fluides est tracé en fonction de la température en se plaçant sur la ligne de coexistence du liquide et du gaz. L'axe des températures est normé par la température critique T_c et l'axe du paramètre d'ordre est normé par la densité du fluide critique ρ_c (d'après l'article de Guggenheim [Gugg45]). La superposition des courbes suggère un certain degré d'universalité *i.e.* un comportement indépendant des constituants, et donc des interactions microscopiques.

figure 1.3 donne [Gugg45] :

$$\rho - \rho_c \sim (T_c - T)^{1/3} \sim (T_c - T)^{\beta}\,, \tag{1.1}$$

où β est un exposant critique qui prend dans cet exemple la valeur $\beta = 1/3$. Pour la transition λ, le paramètre d'ordre est la fonction d'onde ψ_s des atomes superfluides. Expérimentalement, on a accès à la densité d'atomes superfluides $\rho_s = |\psi_s|^2$. Cette densité est représentée en haut sur la figure 1.4 (d'après l'article de Kadanoff *et al* [Kada67]). Elle se comporte algébriquement avec un exposant $2/3$, donc le paramètre d'ordre se comporte comme :

$$|\psi_s| \sim (T_\lambda - T)^{1/3} \sim (T_\lambda - T)^{\beta}\,. \tag{1.2}$$

Le paramètre d'ordre Φ de la transition ferromagnétique est le moment magnétique total M du système tandis que pour la transition antiferromagnétique, on considère l'ai-

mantation alternée M_a. La fréquence de résonance magnétique nucléaire au cube, directement reliée à l'aimantation alternée au cube pour la transition antiferromagnétique de $\mathrm{MnF_2}$, est tracée en bas sur la figure 1.4 (d'après l'article de Heller et Benedek [Hell62]). Elle est linéaire ce qui indique le comportement :

$$M_a \sim (T_c - T)^{1/3} \sim (T_c - T)^{\beta} \,. \tag{1.3}$$

Pour ces trois transitions, il est possible de définir un paramètre d'ordre qui se comporte algébriquement avec le même exposant $\beta = 1/3$. C'est une caractéristique des transitions continues : à l'approche du point critique certaines grandeurs thermodynamiques suivent une loi de puissance. Les valeurs numériques des exposants critiques définissent des classes d'universalité. Les différentes grandeurs thermodynamiques permettent de définir une famille d'exposants critiques α, β, γ, δ, ν et ν_h. Un autre exemple est donné sur la figure 1.5 par la singularité de la chaleur spécifique de $^4\mathrm{He}$ lors de la transition λ (d'après les travaux de Buckingham et Fairbank [Buck61]). Ce comportement s'observe aussi pour la susceptibilité d'un ferromagnétique. Sur la figure 1.6 nous avons représenté la divergence de la susceptibilité du fer Fe (avec du tungstène dilué) à l'approche de la température critique par valeurs supérieures (d'après les travaux de Noakes *et al* [Noak66]). La divergence est algébrique avec un exposant $\gamma \approx 1.33$.

1.1.2 Comportement critique du modèle d'Ising

Pour des raisons historiques, le langage magnétique s'est imposé dans la description des phénomènes critiques. Cependant, ces approches peuvent s'étendre à d'autres domaines. L'un des modèles les plus simples qui présente une transition continue est le modèle d'Ising [Isin25] défini par le hamiltonien :

$$\mathcal{H}_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^{N} S_i \,, \tag{1.4}$$

où la somme $\sum_{\langle ij \rangle}$ est effectuée sur tous les couples de sites premiers voisins sur un réseau de dimension d. Le système contient N sites sur lesquels sont présents des spins S_i qui peuvent prendre les valeurs ± 1. La constante J est le couplage d'échange et H est le champ magnétique. Ce modèle permet de modéliser les transitions de ferromagnétiques uniaxiaux pour lesquelles il fut introduit, ainsi que la transition liquide-vapeur [Paro95] et la transition ordre-désordre dans les mélanges binaires entre une phase homogène où les deux composés sont miscibles et une phase hétérogène où ils ne sont plus miscibles (un exemple expérimental est donné par l'étain de type beta (*beta-brass* en anglais) [Yeom94, Binn95]. Une liste plus exhaustive de systèmes expérimentaux décrits par le modèle d'Ising est disponible dans [Vica00]. La dimension de l'espace dans lequel sont plongés les spins joue un rôle important. On connaît la fonction de partition exacte et donc toutes les fonctions thermodynamiques à une dimension [Isin25]. À deux dimensions, on connaît la fonction de partition exacte en champ nul [Onsa44] et à la température critique avec un champ magnétique, ce qui

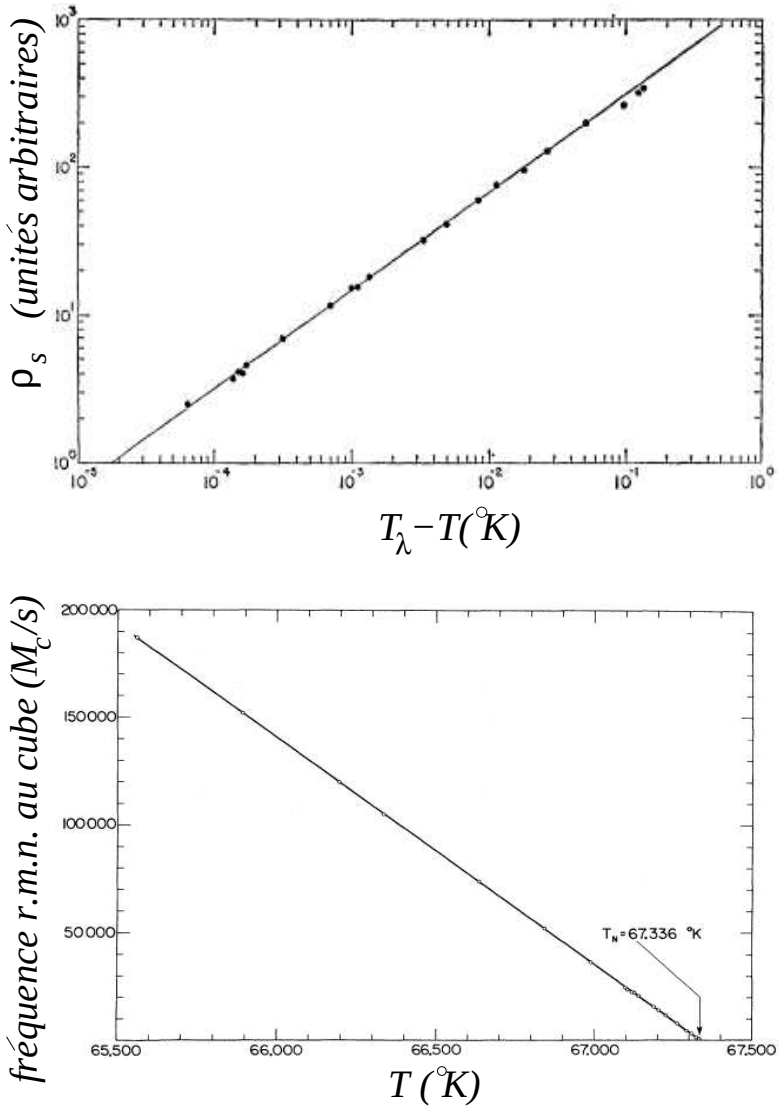


FIG. 1.4 – En haut, la densité d'atomes superfluides ρ_s (le module au carré du paramètre d'ordre ψ_s) est tracée en fonction de l'écart en température $T_\lambda - T$ (d'après l'article de Kadanoff *et al* [Kada67]). En bas, la fréquence de résonnance magnétique nucléaire (fréquence r.m.n.) au cube, directement reliée à l'aimantation alternée au cube de $\mathrm{MnF_2}$, est tracée en fonction de la température (d'après l'article de Heller et Benedek [Hell62]).

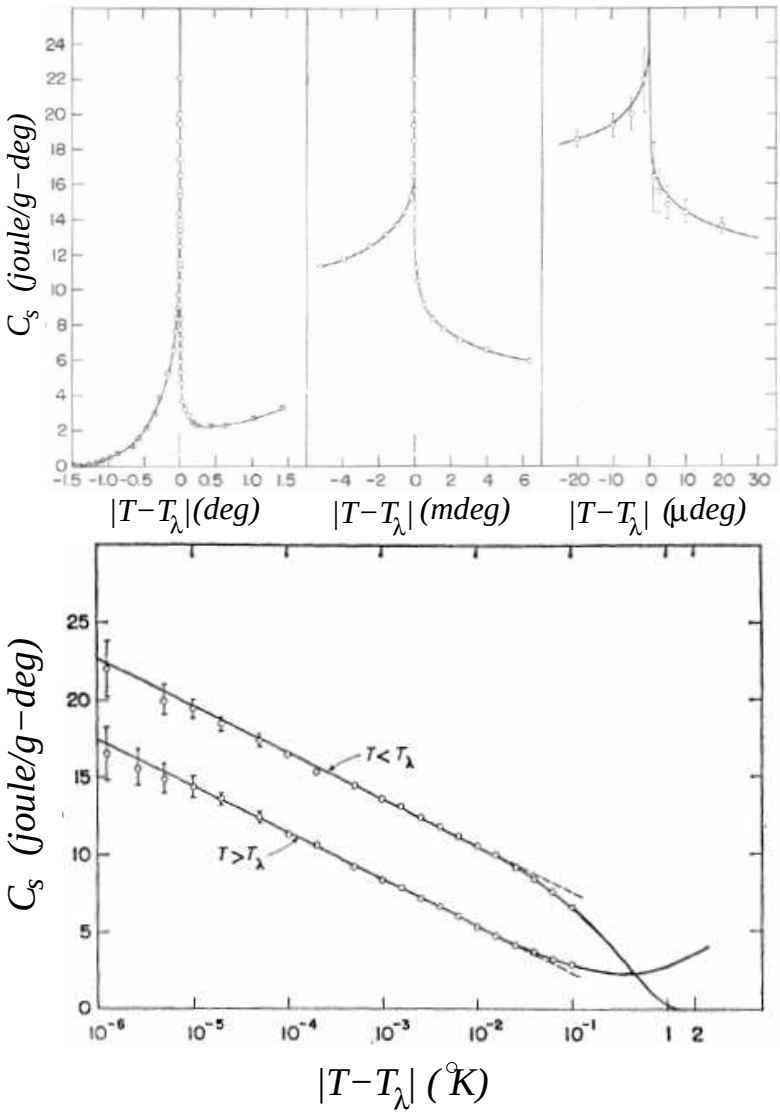


FIG. 1.5 – La chaleur spécifique de ^{4}He lors de la transition λ est tracé en fonction de la température avec des axes linéaires (en haut) et logarithmiques (en bas) (d'après les travaux de Buckingham et Fairbank [Buck61]). Les axes linéaires mettent en évidence la ressemblance entre la forme de la chaleur spécifique et la lettre grecque qui a donné son nom à la transition λ. Les axes logarithmiques permettent de constater le comportement algébrique à proximité de la transition.

est suffisant pour déterminer les exposants critiques. À une dimension, le système ne

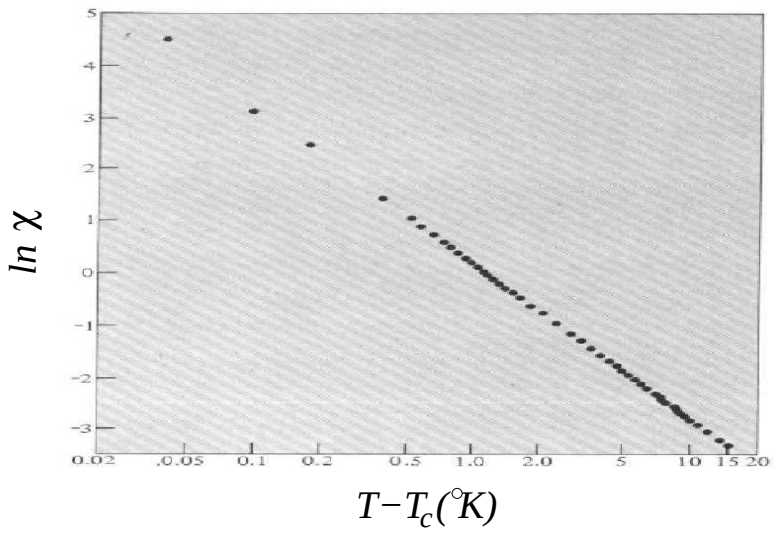


FIG. 1.6 – Comportement de la susceptibilité χ du fer Fe (avec du tungstène dilué) avec un exposant $\gamma \approx 1.33$ (d'après les travaux de Noakes *et al* [Noak66]).

possède pas de phase ordonnée. À partir de $d = 2$, le système présente une transition de phase continue à température finie. En dimension $d = 3$, il n'existe pas de solution exacte et les exposants sont estimés entre autres par simulations Monte Carlo, par développement haute température, par renormalisation du modèle ϕ^4...On peut consulter l'article [Deng03] et ses références pour une revue des propriétés critiques du modèle d'Ising en dimension trois. À partir de $d = 4$, les exposants critiques ne dépendent plus de la dimension. Il sont identiques à la théorie de champ moyen. On appelle dimension critique inférieure d_{inf} la dimension précédent celle où le système commence à présenter une transition de phase à température finie. La dimension critique supérieure d_c est définie comme la dimension à partir de laquelle les exposants sont ceux du champ moyen. Pour le modèle d'Ising, $d_{inf} = 1$ et $d_c = 4$.
L'approximation de champ moyen consiste à remplacer l'interaction entre chaque plus proche voisin par une interaction moyenne ou champ de Weiss [Stan71, LeBe02]. Cette approche est justifiée lorsque le spin possède une coordinence $z = 2d$ (pour un réseau hypercubique) élevée *i.e.* pour les grandes dimensions. L'information dans le réseau est véhiculée par de nombreux chemins et les fluctuations autour de la moyenne se font plus rares. Cette approche est exacte pour $d \to \infty$. Dans l'approximation du champ moyen, tous les spins deviennent équivalents et on peut se contenter d'écrire le hamiltonien pour un seul spin noté S :

$$\mathcal{H}_{CM} = -\left(2dJm + H\right) S\,, \tag{1.5}$$

où la densité d'aimantation $m = \langle S \rangle$ est la valeur moyenne des spins. La fonction de partition s'écrit :

$$Z_{CM} = 2\cosh\left[\beta\left(2dJm + H\right)\right] \ . \tag{1.6}$$

La valeur moyenne $m = \langle S \rangle$ s'exprime sous la forme :

$$m = \tanh\left[\beta\left(2dJm + H\right)\right] \ . \tag{1.7}$$

En champ nul, les solutions sont les intersections des courbes d'équation $y = \beta 2dJm$ et $y = \mathrm{Arctanh}\, m$ [LeBe02]. Pour $\beta 2dJm \leq 1$, il existe une seule solution en $m = 0$. Pour $\beta 2dJm > 1$, il existe trois solutions : $m = 0$ et $m = \pm m_0$. La solution en $m = 0$ est instable car l'application d'un champ magnétique infinitésimal fait basculer le système dans un état ferromagnétique d'aimantation non nulle. Ces états ferromagnétiques présentent une symétrie inférieure à celle du hamiltonien (1.4) qui est invariant sous l'inversion de tous les spins du réseau. Le signe de l'aimantation spontanée privilégie une orientation spatiale. Cette symétrie est présente dans la phase haute température où $m = 0$. Le système donne lieu à une brisure spontanée de la symétrie. La température critique du système est donnée par :

$$\beta_c = \frac{1}{2dJ} \Leftrightarrow T_c = \frac{2dJ}{k_B} \ , \tag{1.8}$$

où k_B est la constante de Boltzmann. On introduit l'écart en température par rapport au point critique ou température réduite $t = (T - T_c)/T_c$. Au voisinage de T_c, la densité d'aimantation m est faible et l'égalité (1.7) devient, après avoir effectué l'opération $\mathrm{Arctanh}$ sur chacun des membres :

$$\beta H \approx tm + \frac{m^3}{3} + \mathcal{O}(m^5, t^2) \ . \tag{1.9}$$

C'est l'équation d'état en champ moyen d'un ferromagnétique qui possède la symétrie d'inversion du modèle d'Ising (1.4). En champ nul $H = 0$, la densité d'aimantation $m(T, H = 0)$ se comporte comme :

$$m(T,0) \approx \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad T > T_c \ , \\ \sqrt{\frac{3}{T_c}}(T_c - T)^{1/2} & \text{pour} \quad T < T_c \ , \end{cases} \tag{1.10}$$

où on peut définir l'exposant $\beta = 1/2$. Au voisinage de T_c et en champ non nul, on dérive les deux membres de l'équation (1.9) par rapport à H de manière à obtenir la susceptibilité $\chi = \partial m / \partial H|_{H=0}$:

$$\chi(T,0) \approx \begin{cases} \frac{1}{k_B}(T - T_c)^{-1} & \text{pour} \quad T > T_c \ , \\ \frac{1}{2k_B}(T_c - T)^{-1} & \text{pour} \quad T < T_c \ , \end{cases} \tag{1.11}$$

ce qui définit l'exposant $\gamma = 1$. Notons que le rapport A_χ^+ / A_χ^- des amplitudes de la susceptibilité A_χ^+ et A_χ^- pour $T > T_c$ et $T < T_c$ respectivement prend la valeur universelle 2. L'énergie e par site en champ nul est simplement $e(T,0) = -dJm^2(T,0)$:

$$e(T,0) \approx \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad T > T_c \ , \\ -\frac{3}{2}k_B(T_c - T) & \text{pour} \quad T < T_c \ . \end{cases} \tag{1.12}$$

La chaleur spécifique s'obtient en dérivant l'énergie (1.12) par rapport à T :

$$C(T,0) \approx \begin{cases} 0 \quad \text{pour} \quad T > T_c\,, \\ \frac{3}{2}k_B \quad \text{pour} \quad T < T_c\,. \end{cases} \tag{1.13}$$

La chaleur spécifique est discontinue au point critique. L'exposant associé est donc $\alpha = 0$. L'isotherme critique caractérise la variation de l'aimantation en fonction du champ H à la température critique. A partir de l'expression (1.9), on obtient :

$$m(T_c, H) \approx \left(\frac{3}{k_B T_c}\right)^{1/3} H^{1/3}\,, \tag{1.14}$$

ce qui définit l'exposant $\delta = 3$. Le modèle d'Ising dans l'approximation du champ moyen permet de reproduire le comportement algébrique des grandeurs thermodynamiques lors d'une transition continue mais les exposants ne sont corrects que pour $d \geq d_c$.
Il est possible d'obtenir les mêmes résultats par l'approche de Landau des transitions de phase. Le paramètre d'ordre prend des valeurs petites au voisinage du point critique d'une transition du second ordre. Landau a émis l'hypothèse que les potentiels thermodynamiques peuvent alors s'écrire comme un développement de Taylor [Land37, Land67]. Considérons le développement de la densité d'énergie libre de Helmholtz au quatrième ordre :

$$f(T,H) \approx f_0 + \mathcal{A}(T)m + \mathcal{B}(T)m^2 + \mathcal{C}(T)m^3 + \mathcal{D}(T)m^4 - Hm + \mathcal{O}(m^5)\,, \tag{1.15}$$

où f_0 est une constante et $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$ et $\mathcal{D}$ sont des fonctions de la température. On a supposé implicitement que $m = m(T,H)$ est une fonction des variables naturelles T et H du potentiel. Pour un matériau magnétique en champ nul, la symétrie d'inversion dans la phase haute température doit se refléter dans l'expression de l'énergie libre par une absence de puissances impaires de m dans le développement, donc $\mathcal{A}(T) = \mathcal{C}(T) = 0$. La stabilité de la solution $m = 0$ dans la phase haute température et de la solution $m = \pm m_0$ dans la phase basse température entraîne un changement de signe du coefficient $\mathcal{B}(T)$ lors de la transition. Pour la même raison, il faut également que le coefficient $\mathcal{D}$ soit positif. Au premier ordre, on pose :

$$\mathcal{B}(T) \approx \frac{r}{2}(T - T_c)\,, \tag{1.16}$$

$$\mathcal{D}(T) \approx \mathcal{D}(T_c) \approx \frac{\lambda}{4!}\,, \tag{1.17}$$

où r et λ sont des constantes. On a supposé que seul $\mathcal{B}(T)$ présente une variation significative au point critique. L'expression (1.15) de l'énergie libre devient :

$$f(T,H) \approx f_0 + \frac{r}{2}(T - T_c)m^2 + \frac{\lambda}{4!}m^4 - Hm\,. \tag{1.18}$$

On a représenté schématiquement le phénomène de brisure de symétrie pour l'énergie libre sur la figure 1.7. On détermine les valeurs de m pour lesquelles f est minimum

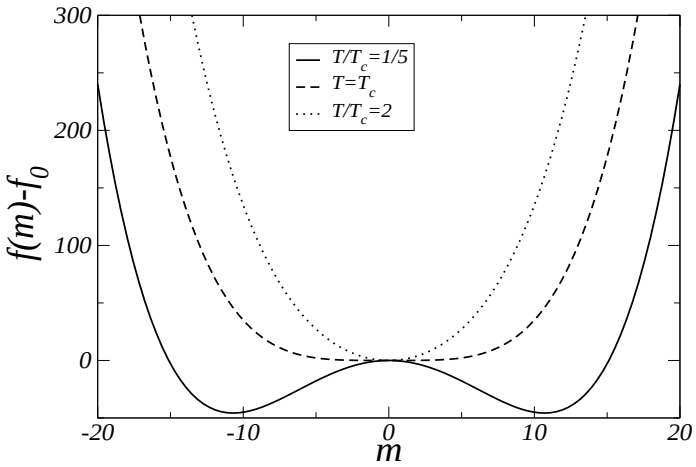


FIG. 1.7 – Illustration de la brisure spontanée de symétrie de l'aimantation en utilisant l'expression (1.18) pour l'énergie libre en champ nul. Pour $T > T_c$, l'aimantation est nulle ; pour $T > T_c$, l'aimantation est nulle en moyenne mais le minimum est plus étalé, ce qui autorise de plus grandes fluctuations ; enfin, pour $T < T_c$, l'aimantation peut prendre deux valeurs non nulles de signes opposés. Dans ce dernier cas, on obtient des états ferromagnétiques de symétrie inférieure à celle de l'énergie libre (1.18) : la symétrie est brisée. Nous avons choisi pour paramètres $\lambda = 0.0035$, $r = 0.2$ et $d = 5$.

en annulant la dérivée partielle $\partial f/\partial m$:

$$H \approx r(T - T_c)m + \frac{\lambda}{6}m^3 \,, \tag{1.19}$$

qui a la même forme que (1.9). En champ nul, on obtient :

$$m(T,0) \approx \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad T > T_c \,, \\ \sqrt{\frac{6r}{\lambda}}(T_c - T)^{1/2} & \text{pour} \quad T < T_c \,. \end{cases} \tag{1.20}$$

Le paramètre d'ordre s'annule avec un exposant $\beta = 1/2$. La susceptibilité s'obtient en dérivant (1.19) par rapport à H :

$$\chi(T,0) \approx \begin{cases} \frac{1}{r}(T - T_c)^{-1} & \text{pour} \quad T > T_c \,, \\ \frac{1}{2r}(T_c - T)^{-1} & \text{pour} \quad T < T_c \,. \end{cases} \tag{1.21}$$

La susceptibilité diverge avec un exposant $\gamma = 1$. L'énergie interne par site est définie par $e(T,0) \approx -k_B T_c \partial f/\partial T$:

$$e(T,0) \approx \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad T > T_c \,, \\ -3\frac{T_c r^2}{\lambda}(T_c - T) & \text{pour} \quad T < T_c \,. \end{cases} \tag{1.22}$$

Il vient la chaleur spécifique $C(T,0) = \partial e/\partial T$:

$$C(T,0) \approx \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad T > T_c\,, \\ 3\frac{T_c r^2}{\lambda} & \text{pour} \quad T < T_c\,. \end{cases} \tag{1.23}$$

La chaleur spécifique est ausi décrite à la transition par un exposant $\alpha = 0$. En utilisant l'expression (1.19), l'isotherme critique s'écrit :

$$m(T_c, H) \approx \left(\frac{6}{\lambda}\right)^{1/3} H^{1/3}\,, \tag{1.24}$$

et l'exposant associé est $\delta = 3$. L'approche de Landau donne les mêmes exposants que la théorie de champ moyen (on retrouve exactement les mêmes expressions en posant $r = k_B$ et $\lambda = 2k_B T_c$).
Ces deux approches ne sont pas valides dans le cas général. La solution exacte en dimension $d = 2$ découverte par Onsager [Onsa44] ne conduit pas aux mêmes exposants. De plus, ces approches prédisent une transition de phase en dimension $d = 1$ alors que la solution exacte n'en prévoit aucune. Les théories de type champ moyen donnent des exposants valides dans l'approximation où les fluctuations critiques sont faibles. Il est possible de déterminer le domaine de validité de ces approximations par le critère de Ginzburg-Landau.

1.2 Les fluctuations critiques et leurs descriptions

1.2.1 Théorie de Ginzburg-Landau

Le modèle de Ginzburg-Landau est obtenu en remplaçant le paramètre d'ordre Φ par un champ $\phi(\vec{r})$. Ce champ est obtenu en sommant les degrés de liberté sur un volume mésoscopique $\delta V(\vec{r})$ centré autour de la position $\vec{r}$. Ce volume est grand devant les distances microscopiques et petit devant la taille du système [Stan71, Binn95]. On parle aussi de *coarse-graining*. L'hamiltonien $\mathcal{H}_\phi$ du modèle ϕ^4 est défini par :

$$\mathcal{H}_\phi[\phi] = \int_{\mathbb{R}^d} d^d\vec{r} \left(\frac{1}{2}\left(\vec{\nabla}\phi(\vec{r})\right)^2 + \frac{\mu^2}{2}\phi^2(\vec{r}) + \frac{g}{4!}\phi^4(\vec{r}) - H(\vec{r})\phi(\vec{r}) \right)\,. \tag{1.25}$$

La fonction de partition s'écrit :

$$Z_\phi = \int_{\mathbb{R}^N} [\mathcal{D}\phi] e^{-\beta\mathcal{H}_\phi[\phi]}\,, \tag{1.26}$$

où le symbole $\int_{\mathbb{R}^N} [\mathcal{D}\phi] = \int_{\mathbb{R}^N} \prod_{\vec{r}} d\phi(\vec{r})$ signifie une intégration sur toutes les valeurs possibles du champ en chaque endroit de l'espace. L'approximation de Landau consiste à conserver dans l'intégrale fonctionnelle les valeurs de $\phi(\vec{r})$ qui apportent la contribution dominante, c'est-à-dire, celles qui minimisent $\mathcal{H}_\phi[\phi]$. On cherche donc les solutions de $\frac{\delta\mathcal{H}_\phi[\phi]}{\delta\phi(\vec{r})} = 0$. À l'ordre le plus bas, il vient :

$$-\vec{\nabla}^2\phi(\vec{r}) + \mu^2\phi(\vec{r}) + \frac{g}{6}\phi^3(\vec{r}) = H(\vec{r})\,, \tag{1.27}$$

qui est l'équation de Ginzburg-Landau. Pour un champ ϕ homogène, que nous notons m afin de conserver la notation de la section précédente, on retrouve l'approximation de champ moyen (1.9) et (1.19) :

$$H \approx \mu^2 m + \frac{g}{6} m^3 \,, \tag{1.28}$$

qui est l'analogue de (1.19) à condition de poser :

$$\mu^2 = r(T - T_c) \,, \tag{1.29}$$

et $g = \lambda$. Cependant, le modèle ϕ^4 permet de dépasser le champ moyen en calculant les premières corrections qui correspondent aux fluctuations du paramètre d'ordre. Les fluctuations spatiales du paramètre d'ordre local autour de sa moyenne s'écrivent :

$$\delta\phi(\vec{x}) = \phi(\vec{x}) - \phi \,, \tag{1.30}$$

où $\phi = \Phi/V$. La fonction de corrélation connectée est définie comme la corrélation des fluctuations autour de la valeur moyenne entre deux points aux positions $\vec{x}$ et $\vec{y}$:

$$G(\vec{x}, \vec{y}) = \langle \delta\phi(\vec{x}) \delta\phi(\vec{y}) \rangle = \langle \phi(\vec{x}) \phi(\vec{y}) \rangle - \phi^2 \,. \tag{1.31}$$

Pour un système homogène et isotrope, la fonction ne peut dépendre que du module $r = |\vec{x} - \vec{y}|$. De manière générale, on constate différents régimes :

$$G(r) \sim \begin{cases} e^{-r/\xi} & \text{pour} \quad T \neq T_c \,, \\ r^{-(d-2+\eta)} & \text{pour} \quad T = T_c \,, \end{cases} \tag{1.32}$$

où η est un exposant critique et ξ est une longueur caractéristique appelée longueur de corrélation. En présence d'un champ inhomogène $H(\vec{y})$:

$$G(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{\beta} \left. \frac{\delta \langle \phi(\vec{x}) \rangle}{\delta H(\vec{y})} \right|_{H=0} \,. \tag{1.33}$$

L'équation de Ginzburg-Landau (1.27) permet de calculer la fonction de corrélation du modèle ϕ^4 dans l'approximation du champ moyen en effectuant la dérivée fonctionnelle des deux membres par rapport à $H(\vec{y})$. Il vient :

$$-\vec{\nabla}^2 G(\vec{x}, \vec{y}) + \mu^2 G(\vec{x}, \vec{y}) + \frac{g}{2} \langle \phi^2(\vec{x}) \rangle G(\vec{x}, \vec{y}) = k_B T \delta(\vec{x} - \vec{y}) \,. \tag{1.34}$$

Puisqu'on pose $H(\vec{y}) = 0$ après la dérivation dans (1.33), on peut élever l'expression (1.20) au carré pour obtenir $\langle \phi^2(\vec{x}) \rangle$. Il vient :

$$G(r) = \begin{cases} -\vec{\nabla}^2 G(r) + (T - T_c) G(r) = k_B T \delta(r) & \text{pour} \quad T > T_c \,, \\ -\vec{\nabla}^2 G(r) + 2(T_c - T) G(r) = k_B T \delta(r) & \text{pour} \quad T < T_c \,. \end{cases} \tag{1.35}$$

La longueur de corrélation est donnée par :

$$\xi \sim \begin{cases} (T - T_c)^{-1/2} & \text{pour} \quad T > T_c \,, \\ 2(T - T_c)^{-1/2} & \text{pour} \quad T < T_c \,. \end{cases} \tag{1.36}$$

Elle diverge donc avec un exposant $\nu = 1/2$. Les solutions de (1.35) ont les formes asymptotiques [Zinn02] :

$$G(r) \sim \begin{cases} e^{-r/\xi} & \text{pour} \quad r \gg \xi \,, \\ r^{-(d-2)} & \text{pour} \quad r \ll \xi \,, \end{cases} \tag{1.37}$$

ce qui permet de déterminer $\eta = 0$ en comparant avec (1.32). On peut également définir une fonction de corrélation sous champ à la température critique par :

$$G_H(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{\beta} \left. \frac{\delta \langle \phi(\vec{x}) \rangle}{\delta H(\vec{y})} \right|_{t=0} . \tag{1.38}$$

En utilisant les équations (1.34) et (1.24), on obtient un système similaire à (1.35) mais avec une longueur caractéristique ξ_H qui se comporte comme :

$$\xi_H \sim |H|^{-1/3} \,, \tag{1.39}$$

ce qui définit l'exposant de champ moyen $\nu_H = 1/3$. Nous avons désormais l'ensemble des exposants qui définissent la classe d'universalité du modèle d'Ising dans l'approximation du champ moyen. Ils sont résumés dans la table 1.1.

$\alpha = 0$	$\beta = 1/2$	$\delta = 3$	$\gamma = 1$	$\nu = 1/2$	$\nu_H = 1/3$	$\eta = 0$

TAB. 1.1 – Valeurs numériques des exposants critiques du modèle d'Ising dans l'approximation du champ moyen.

1.2.2 Critère de Ginzburg

Il est possible de relier la susceptibilité à la fonction de corrélation sous la forme d'un théorème fluctuation-dissipation [LeBe02, Binn95, Zinn02] :

$$\chi = \frac{\beta}{V} \int d^d\vec{x} d^d\vec{y} G(\vec{x} - \vec{y}) = \frac{\beta}{V} \left(\langle \Phi^2 \rangle - \langle \Phi \rangle^2 \right) . \tag{1.40}$$

La divergence de la susceptibilité est directement reliée aux corrélations du paramètre d'ordre à grande distance ainsi qu'aux fluctuations du paramètre d'ordre. Puisque le paramètre d'ordre fluctue autour de la moyenne, dans quelle mesure l'approximation du champ moyen est-elle valable ? Il est possible d'estimer l'ordre de grandeur de ces fluctuations à partir de (1.40) et (1.37) à l'intérieur du volume de corrélation $V = \xi^d$. En divisant cette quantité par la solution de champ moyen (1.10), on obtient :

$$\frac{\langle \Phi^2 \rangle - \langle \Phi \rangle^2}{\langle \Phi \rangle^2} \sim t^{\frac{d-4}{2}} . \tag{1.41}$$

La théorie du champ moyen est cohérente pour $d > 4$ car les fluctuations sont négligeables devant le paramètre d'ordre à l'approche du point critique. Lorsque $d < 4$, les fluctuations divergent à l'approche du point critique, ce qui est incompatible avec l'hypothèse

de départ d'un champ de Weiss uniforme. Les fluctuations sont un élément essentiel dans la description des phénomènes critiques.
Les fluctuations critiques sont reliées au comportement de la longueur de corrélation qui dépend de la température. À l'approche du point critique, elle diverge selon l'expression (1.36). Cette relation est mise en évidence dans des modèles solubles analytiquement. La divergence de la longueur de corrélation implique la disparition de toute échelle de longueur. On dit que le système est autosimilaire ou invariant d'échelle. Des fluctuations hiérarchiques, c'est-à-dire, des fluctuations dans les fluctuations, apparaissent à toutes distances. Ces fluctuations sont visibles dans les fluides binaires [Binn95]. Le phénomène est appelé opalescence critique. La figure 1.8 en donne une illustration [Phys]. Les deux fluides, le méthanol ($\mathrm{CH_3OH}$) et l'hexane (C_6H_{14}), ne sont pas miscibles en dessous de la température $T_c = 42.4°\mathrm{C}$ et on peut observer un ménisque entre les deux composés (photo de gauche). Au-delà de cette température, ils sont miscibles en proportion arbitraire et le ménisque disparaît (figure de droite). À l'approche de la température critique (figure du milieu), lorsqu'on se place dans les conditions d'une transition continue pour un rapport de 0.435 molécules de méthanol pour 0.665 molécules d'hexane, le ménisque ne se forme pas immédiatement. Le mélange devient flou, ce qui signifie que les rayons lumineux sont diffusés à cause des fluctuations de l'indice de réfraction. Ces fluctuations d'indice peuvent elles-mêmes être reliées aux variations de densité dans le fluide. Le même phénomène s'observe pour

FIG. 1.8 – Mélange de méthanol ($\mathrm{CH_3OH}$) et d'hexane (C_6H_{14}) dans les proportions de molécules $0.435 : 0.665$. De gauche à droite, $T < T_c$, $T \approx T_c$ et $T > T_c$. Pour $T < T_c$ un ménisque sépare les composés qui ne sont pas miscibles. Pour $T > T_c$ les composés sont miscibles et forment une seule phase. Pour $T \approx T_c$, le mélange devient flou. Les fluctuations de la densité entraînent une variation de l'indice de réfraction : les rayons lumineux sont déviés [Phys].

le modèle d'Ising. À l'approche du point critique, la longueur de corrélation diverge entraînant des domaines de spins ordonnés sur de grandes distances. On a représenté sur la figure 1.9 le modèle d'Ising bidimensionnel pour trois températures différentes : $T \ll T_c$, $T \approx T_c$ et $T \gg T_c$. À basse température, le système est ordonné et le retournement d'un spin a peu d'influence sur ses voisins. À haute température, les spins sont désordonnés et le retournement d'un spin n'influence pas non plus les voisins. Au contraire, à la température critique, un spin influence les autres spins sur des distances arbitrairement grandes.

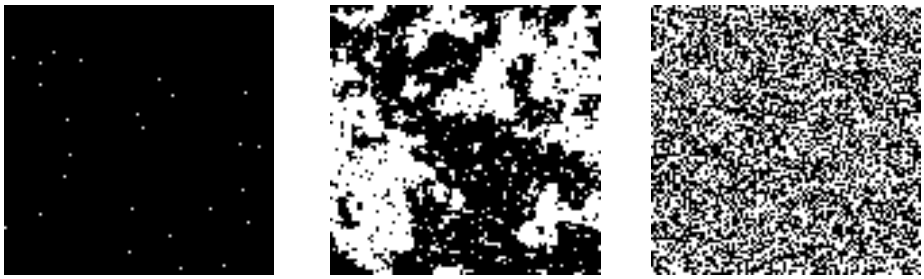


FIG. 1.9 – Les figures représentent le modèle d'Ising $2d$ à trois températures différentes. De gauche à droite : $T \ll T_c$, $T \approx T_c$ et $T \gg T_c$. Sur la figure du milieu, on observe des fluctuations dans les fluctuations. Un agrandissement sur une partie de la figure ressemblerait aussi à un système critique : le système est invariant d'échelle ou autosimilaire.

1.3 L'esprit du groupe de renormalisation

1.3.1 Hypothèse d'homogénéité

Le comportement universel en termes d'exposants critiques est unifié à partir de la propriété d'homogénéité de l'énergie libre au point critique posée comme hypothèse par Widom (1965) [Wido65] et Kadanoff (1966) [Kada66]. Dans les années 1970, Wilson [Wils71] a transposé la méthode du groupe de renormalisation de la physique des particules au domaine des phénomènes critiques et donné une justification de cette hypothèse d'homogénéité. La transformation du groupe de renormalisation consiste à étudier l'évolution des constantes de couplage du hamiltonien sous une réduction du nombre de degrés de liberté. Un point critique est caractérisé par un point fixe de la tranformation. L'hypothèse d'homogénéité de l'énergie libre est déduite de l'invariance de la fonction de partition sous la transformation. Il est alors possible de déduire les exposants critiques et les fonctions d'échelle des observables.
L'autosimilarité du système près du point critique permet de réduire les degrés de liberté tout en laissant la forme de l'hamiltonien inchangée, comme l'a proposé Kadanoff en 1966 [Kada66]. Dans l'espace réel, on forme des blocs de spins qu'on remplace par des spins effectifs. Le volume de ces blocs est b^d où d est la dimension du réseau et b le facteur de réduction. Il existe plusieurs moyens de déterminer le spin effectif à partir des spins appartenant au bloc : on peut faire la moyenne des spins, choisir le spin majoritairement représenté ou garder un seul spin (décimation). Puis les longueurs du système sont divisées par le coefficient b de manière à retrouver le pas de réseau a initial. La transformation est représentée sur la figure 1.10. Un réseau hypercubique comportant N sites et avec une taille L dans chaque dimension se transforme en un réseau hypercubique comportant $N' = N/b^d$ sites et avec une taille L/b dans chaque dimension.
Le hamiltonien (1.4) du modèle d'Ising par exemple possède une constante de cou-

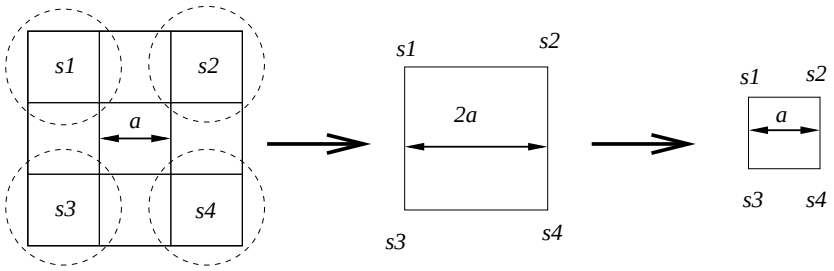


FIG. 1.10 – Transformation des blocs de spin dans l'espace réel. Les spins sont regroupés par blocs de volume 2^2 et chaque bloc est remplacé par un spin effectif s_i. Puis on norme les longueurs du système de façon à retrouver le pas de réseau initial a.

plage d'échange entre premiers voisins $K_1 = \beta J$ et une constante de couplage Zeeman $K_2 = \beta H \sim h$. Dans la limite thermodynamique, il existe une infinité de possibilités de coupler des spins. Quelques exemples sont décrits sur la figure 1.11. Une

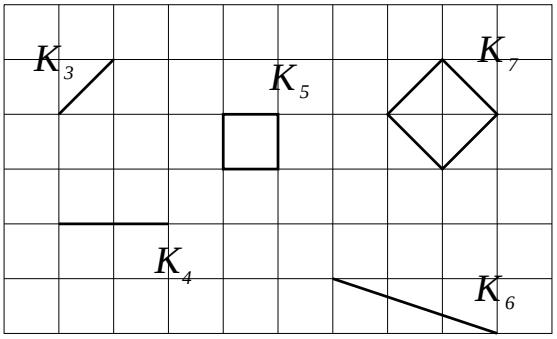


FIG. 1.11 – Différents types de couplages possibles pour le modèle d'Ising $2d$. Les lignes fines représentent le réseau et les lignes épaisses représentent les interactions entre les spins situés sur les nœuds.

transformation peut potentiellement produire n'importe quel type de couplage. Pour décrire l'évolution de ces variables, on définit l'espace des couplages par un vecteur $\vec{K} = (K_1, K_2, \dots, K_i, \dots)$ de dimension infinie. Ce vecteur se transforme en un vecteur $\vec{K}'$ selon la représentation R_b :

$$R_b(\vec{K}) = \vec{K}'. \tag{1.42}$$

La transformation admet des points fixes $\vec{K}^* = (K_1^*, K_2^*, \dots, K_i^*, \dots)$ qui vérifient la relation :

$$R_b(\vec{K}^*) = \vec{K}^*. \tag{1.43}$$

Il existe différents points fixes : les points fixes triviaux pour $T = 0$ et $T = \infty$ et les points fixes non triviaux pour des températures critiques T_c finies. Les transformations du groupe de renormalisation utilisent les hypothèses suivantes pour les couplages K_i [LeBe02]. Premièrement, les composantes K_i restent des couplages locaux sous la transformation. Deuxièmement, les composantes K_i sont des fonctions analytiques de l'écart des variables initiales par rapport au point fixe même à la température critique T_c. Pour un système magnétique, les variables initiales sont la température T et le champ magnétique H. La variable $t \sim T - T_c$ définit l'écart en température par rapport au point fixe à T_c. L'hypothèse d'analycité permet de linéariser la transformation à proximité d'un point fixe :

$$\Delta K_i' = \sum_j T_{ij} \Delta K_j, \tag{1.44}$$

où $\Delta K_i = K_i - K_i^*$ représente l'écart au point critique et $T_{ij} = \frac{\partial K_i'}{\partial K_j}\Big|_{\vec{K}^*}$ sont les éléments de la matrice de transformation $\mathbf{T}$. On appelle $\vec{\phi}^\alpha = (\phi_1^\alpha, \phi_2^\alpha, \dots, \phi_i^\alpha, \dots)$ les vecteurs propres à gauche de la matrice $\mathbf{T}$. Ces vecteurs propres sont associés aux valeurs propres λ_α. L'ensemble de vecteurs $\mathcal{B} = \{\vec{\phi}^1, \vec{\phi}^2, \dots, \vec{\phi}^i, \dots\}$ forme une base adéquate pour décrire le système à proximité du point fixe $\vec{K}^*$. On appelle variables d'échelle les quantités :

$$u_\alpha = \sum_i \phi_i^\alpha \Delta K_i. \tag{1.45}$$

Ce sont des combinaisons linéaires de l'écart au point fixe. Les relations (1.44) et (1.45) impliquent la transformation [Card96] :

$$u_\alpha' = \lambda_\alpha u_\alpha. \tag{1.46}$$

La loi de semi-groupe $R_{b_1} R_{b_2} = R_{b_1 \cdot b_2}$ entraîne [MacC04, LeBe02] :

$$\lambda_\alpha = b^{y_\alpha}, \tag{1.47}$$

où y_α est la valeur propre du groupe de renormalisation ou dimension d'échelle associée à la variable d'échelle u_α. Plusieurs cas peuvent se présenter [Card96, LeBe02]. Lorsque $y_\alpha > 0$, les itérations du TGR éloignent u_α de sa valeur au point fixe. u_α est alors une variable d'échelle pertinente. Lorsque $y_\alpha < 0$, les itérations du TGR approchent u_α de sa valeur au point fixe. u_α est dite non pertinente. Finalement, si $y_\alpha = 0$, une analyse à un ordre plus élevé est nécessaire pour conclure. La variable d'échelle u_α est dite marginale.

Les variables d'échelle sont des combinaisons linéaires des composantes K_i de même parité. La variable d'échelle u_t est associée aux couplages thermiques qui sont invariants par inversion de tous les spins et la variable d'échelle u_h est associée aux couplages magnétiques qui sont antisymétriques par inversion de tous les spins. On s'attend à ce que ces deux quantités soient pertinentes. L'hypothèse d'analycité des composantes K_i s'étend aux variables d'échelle et d'après les arguments de symétrie précédents, on obtient [Card96] :

$$u_t \underset{T \to T_c}{\sim} t + \mathcal{O}(t^2, h^2), \tag{1.48}$$

$$u_h \underset{T \to T_c}{\sim} h + \mathcal{O}(th). \tag{1.49}$$

Afin de préserver les propriétés physiques du système, on doit avoir invariance de la fonction de partition sous la transformation :

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta\mathcal{H}[s]} = \sum_{\{s\}} e^{-\beta\mathcal{H}'[s]}, \tag{1.50}$$

où $\mathcal{H}'$ est le hamiltonien transformé dont les constantes de couplages sont données par le vecteur $\vec{K}'$. Puisque la densité d'énergie libre s'écrit $f(\vec{K}) \sim -N^{-1}\log Z$, l'expression (1.50) devient :

$$e^{-Nf(\vec{K})} = e^{-Na(\vec{K})-N'f(\vec{K}')}, \tag{1.51}$$

$$\Leftrightarrow \qquad f(\vec{K}) = a(\vec{K}) + b^{-d}f(\vec{K}'), \tag{1.52}$$

où $a(\vec{K})$ est une fonction analytique de $\vec{K}$ provenant de l'intégration des blocs de spins [Card96]. À proximité du point fixe $\vec{K}^*$, la partie singulière f_s de la densité d'énergie libre f se comporte comme :

$$f_s(\vec{K}) \sim b^{-d}f_s(\vec{K}'), \tag{1.53}$$

$$\Leftrightarrow f_s(t,h) \sim b^{-d}f_s(b^{y_t}t, b^{y_h}h). \tag{1.54}$$

Entre les expressions (1.53) et (1.54), on a remplacé $\vec{K}$ par $u_t \sim t$ et $u_h \sim h$ et $\vec{K}'$ par $u'_t \sim b^{y_t}t$ et $u'_h \sim b^{y_h}h$ selon la transformation (1.46). La relation (1.54) est l'hypothèse d'homogénéité de l'énergie libre près du point critique.
Les exposants critiques sont obtenus à partir des dérivées de (1.54) :

$$m(t,h=0) \sim \left.\frac{\partial f_s}{\partial h}\right|_{h=0} \sim b^{-d+y_h}m(b^{y_t}t,0) \sim b^{-x_\phi}m(b^{y_t}t,0)\,, \tag{1.55}$$

$$\chi(t,h=0) \sim \left.\frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2}\right|_{h=0} \sim b^{-d+2y_h}\chi(b^{y_t}t,0)\,, \tag{1.56}$$

$$C(t,h=0) \sim \left.\frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2}\right|_{h=0} \sim b^{-d+2y_t}C(b^{y_t}t,0)\,. \tag{1.57}$$

On appelle la quantité $x_\phi = d - y_h$ introduite dans (1.55) la dimension anormale ou dimension d'échelle de l'aimantation [Card96, MacC04, LeBe02]. Cela signifie que le champ ne se transforme pas simplement comme une densité sous l'effet d'une TGR, sauf dans le cas particulier du modèle gaussien [LeBe02]. La valeur du coefficient b est arbitraire. Si on choisit $b = |t|^{-1/y_t}$, l'argument des fonctions des membres de droite est constant [MacC04], ce qui permet d'écrire :

$$m(t,h=0) \sim |t|^{(d-y_h)/y_t} \quad \text{pour } T < T_c \text{ et } 0 \text{ sinon}, \tag{1.58}$$

$$\chi(t,h=0) \sim |t|^{-(2y_h-d)/y_t}, \tag{1.59}$$

$$C(t,h=0) \sim |t|^{-(2-d/y_t)}. \tag{1.60}$$

Par identification, ces relations mènent à $\beta = (d-y_h)/y_t$, $\gamma = (2y_h - d)/y_t$ et $\alpha = 2 - d/y_t$. On peut déterminer le comportement de la densité d'aimantation à la température critique en champ non nul :

$$m(t=0,h) \sim \left.\frac{\partial f}{\partial h}\right|_{t=0} \sim b^{-d+y_h}m(0,b^{y_h}h) \underset{b=|h|^{-1/y_h}}{\sim} |h|^{(d-y_h)/y_h}, \tag{1.61}$$

et donc $\delta = y_h/(d-y_h)$. La fonction de corrélation est homogène au carré de la densité de l'aimantation. Elle se transforme donc suivant :

$$G(r,t,h) \sim b^{-2x_\phi} G(b^{-1}r, b^{y_t}t, b^{y_h}h). \tag{1.62}$$

Posons $b = r$ en champ magnétique nul :

$$G(r,t,0) \sim r^{-2x_\phi} G(1, r^{y_t}t, 0) \sim r^{-2x_\phi} \mathcal{G}_{h=0}(r/|t|^{-1/y_t}), \tag{1.63}$$

où $\mathcal{G}_{h=0}(x)$ est une fonction d'échelle dont le comportement asymptotique est habituellement bien décrit par une exponentielle, ce qui est justifié par la première expression du système (1.37) obtenue à partir du modèle ϕ^4. Toujours à partir de cette expression, on identifie :

$$\xi \underset{h=0}{\sim} |t|^{-1/y_t} \sim |t|^{-\nu}, \tag{1.64}$$

et donc $\nu = 1/y_t$. À la température critique ($t = 0$) :

$$G(r,0,0) \sim r^{-2x_\phi}, \tag{1.65}$$

ce qui conduit à $\eta = 2 + d - 2y_h$. Dans l'expression (1.62), posons $b = r$ et plaçons-nous à la température critique ($t = 0$) et en champ magnétique non nul :

$$G(r,0,h) \sim r^{-2x_\phi} G(1, 0, r^{y_h}h) \sim r^{-2x_\phi} \mathcal{G}_{t=0}(r/|h|^{-1/y_h}), \tag{1.66}$$

où $\mathcal{G}_{t=0}(x)$ est une fonction d'échelle. Dans ces conditions, la longueur caractéristique diverge selon :

$$\xi \underset{t=0}{\sim} |h|^{-1/y_h}, \tag{1.67}$$

ce qui définit l'exposant $\nu_h = 1/y_h$. Un résumé des exposants et des quantités auxquelles ils sont associés est donné dans la table 1.2.

Quantités	Exposants
$c \underset{h=0}{\sim} \lvert t\rvert^{-\alpha}$	$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t}$
$m \underset{h=0}{\sim} \lvert t\rvert^{\beta} \quad (T < T_c)$	$\beta = \frac{d-y_h}{y_t}$
$m \underset{t=0}{\sim} \lvert h\rvert^{-\delta}$	$\delta = \frac{y_h}{d-y_h}$
$\chi \underset{h=0}{\sim} \lvert t\rvert^{-\gamma}$	$\gamma = \frac{2y_h-d}{y_t}$
$G(r) \underset{h=t=0}{\sim} r^{-(d-2+\eta)}$	$\eta = 2 + d - 2y_h$
$\xi \underset{h=0}{\sim} \lvert t\rvert^{-\nu}$	$\nu = 1/y_t$
$\xi \underset{t=0}{\sim} \lvert h\rvert^{-\nu_h}$	$\nu_h = 1/y_h$

TAB. 1.2 – Quantités physiques et exposants associés. Les expressions des exposants critiques sont données en fonction des dimensions d'échelle y_h et y_t.

Les exposants critiques sont obtenus à partir des deux dimensions d'échelle y_h et y_t. Il existe donc des relations indépendantes entre les exposants appelées relations d'échelle :

$$2\beta + \gamma = 2 - \alpha \quad \text{(Rushbrooke)}\,, \tag{1.68}$$

$$2\beta\delta - \gamma = 2 - \alpha \quad \text{(Griffith)}\,, \tag{1.69}$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad \text{(Fisher)}\,, \tag{1.70}$$

$$\nu d = 2 - \alpha \quad \text{(Josephson)}\,. \tag{1.71}$$

La relation de Josephson (1.71) fait intervenir la dimension d du réseau. C'est pourquoi on la distingue des autres relations d'échelle en la nommant relation d'hyper-échelle. Cette relation n'est plus satisfaite pour un système au-dessus de sa dimension critique supérieure puisque par définition, les exposants sont ceux du champ moyen et ne dépendent plus de la dimension d'espace. Il existe des systèmes pour lesquels elle n'est plus vérifiée en-dessous de la dimension critique supérieure d_c comme le modèle d'Ising en champ aléatoire (voir [Youn98] pour une revue) ou les animaux sur réseau [Lube78, Stau94] (aussi appelés *lattice animals* en anglais). Ces relations ont été obtenues antérieurement au groupe de renormalisation, notamment sous forme d'inégalités. Ce sont les noms des auteurs de cette époque qui leur sont associés. Rushbrooke a prouvé l'inégalité $2\beta + \gamma \geq 2 - \alpha$ [Rush63], mais Essam et Fisher ont proposé antérieurement l'égalité (1.68) [Essa63]. Griffith a prouvé l'inégalité $\beta(1 + \delta) \geq 2 - \alpha$ [Grif65]. Fisher a prouvé l'égalité $\gamma = \nu(2 - \eta)$ [Fish64]. Josephson a obtenu l'inégalité $\nu d \geq 2 - \alpha$ [Jose67], mais l'égalité (1.71) a été suggérée antérieurement par Widom [Wido65] et Kadanoff [Kada66].

1.3.2 Variables non pertinentes dangereuses

En dimension $d > d_c$, on montre que les propriétés critiques du modèle d'Ising sont décrites par le point fixe gaussien [LeBe02]. Une analyse dimensionnelle du hamiltonien (1.25) permet d'obtenir les dimensions d'échelle des trois couplages $\mu^2 \sim t$ (en vertu de (1.29)), $H \sim h$ et g [LeBe02] qui s'écrivent respectivement :

$$\begin{cases} y_t = 2\,, \\ y_h = d/2 + 1\,, \\ y_g = 4 - d\,. \end{cases} \tag{1.72}$$

Puisque $y_g < 0$ pour $d > 4$, le couplage g est non pertinent. Il n'intervient pas dans la description du comportement critique. Si on utilise les valeurs de y_t et y_h dans les expressions de la table 1.2 qui donnent les valeurs des exposants en fonction des dimensions d'échelle, on obtient :

$$\begin{cases} \alpha = 2 - d/2\,, \\ \beta = (d-2)/4\,, \\ \gamma = 1\,, \\ \delta = (d+2)/(d-2)\,, \\ \eta = 0\,. \end{cases} \tag{1.73}$$

Or les exposants de champ moyen α, β et δ qui sont donnés dans la table 1.1 sont différents. Cette incohérence est levée en remarquant le rôle de g dans le comportement critique de l'aimantation à partir des expressions (1.20) et (1.24) et dans le comportement de la chaleur spécifique à partir de l'expression (1.23) (notons que $\lambda = g$ dans ces expressions). Puisque g est présent au dénominateur, on ne peut pas l'annuler arbitrairement. On qualifie g de variable non pertinente dangereuse : bien que sa valeur tende vers 0, elle engendre une perturbation au comportement critique. Prenons pour exemple la transformation homogène de l'aimantation qui s'écrit :

$$m(t,h,g) \sim b^{-d+y_h} m(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b^{y_g}g)\,. \tag{1.74}$$

En posant $h = 0$ et $b = |t|^{-1/y_t}$, il vient :

$$m(t,0,g) \sim |t|^{(d-y_h)/y_t} m(1,0,|t|^{-y_g/y_t}g) \quad \text{pour } T < T_c \text{ et } 0 \text{ sinon}\,. \tag{1.75}$$

Lorsque $t \to 0$, la troisième entrée se comporte de façon singulière. On suppose alors un comportement algébrique de la fonction d'échelle de la forme $m(1,0,x) \sim x^{-1/2}$ [Ma00] :

$$m(t,h,0) \sim |t|^{(d-y_h)/y_t}(|t|^{-y_g/y_t}g)^{-1/2} \sim \frac{|t|^{1/2}}{\sqrt{g}}\,, \tag{1.76}$$

qui est en accord avec (1.20). Si on pose $t = 0$ et $b = |h|^{-1/y_h}$ dans (1.74), il vient :

$$m(0,h,g) \sim |h|^{(d-y_h)/y_h} m(0,1,|h|^{-y_g/y_h}g)\,, \tag{1.77}$$

qui devient, après avoir supposé un comportement algébrique de la forme $m(0,1,x) \sim x^{-1/3}$ [Ma00] :

$$m(0,h,g) \sim |h|^{(d-y_h)/y_h}(|h|^{-y_g/y_h}g)^{-1/3} \sim \frac{|h|^{1/3}}{g^{1/3}}\,, \tag{1.78}$$

qui est en accord avec (1.24). La chaleur spécifique se transforme selon :

$$C(t,h,g) \sim b^{-d+2y_t} C(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b^{y_g}g)\,. \tag{1.79}$$

Si on pose $h = 0$ et $b = |t|^{-1/y_t}$, il vient :

$$C(t,h,g) \sim |t|^{d/y_t-2} C(1,0,|t|^{-y_g/y_t}g)\,. \tag{1.80}$$

En supposant un comportement algébrique de la forme $C(1,0,x) \sim x^{-1}$, on obtient :

$$C(t,h,g) \sim |t|^{d/y_t-2}(|t|^{y_g/y_t}g)^{-1} \sim g^{-1}\,, \tag{1.81}$$

ce qui est aussi en accord avec l'expression (1.23). Une façon plus rigoureuse de déterminer le comportement critique est d'utiliser la méthode de renormalisation de Wilson. On peut consulter [Ma00] et [LeBe02] par exemple pour une présentation générale de la méthode et [Luij96] pour une application au modèle d'Ising en dimension $d > d_c$.

Chapitre 2

Comportement d'échelle étendu pour $d > 4$

Le but de ce chapitre est d'étudier les corrections d'échelle au comportement en température de la susceptibilité du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure dans le cadre de la méthode du comportement d'échelle étendu introduite en 2006 par Campbell *et al* [Camp06a]. Cette méthode permet d'obtenir un développement décrivant le comportement des grandeurs thermodynamiques dans toute la phase haute température ($T > T_c$). Dans une première section, nous présentons le comportement critique en température selon le schéma habituel qui n'est plus valable à haute température où il faut avoir recours à un développement haute température. Nous donnons les résultats disponibles dans la littérature à ce sujet. Dans une deuxième section, nous présentons la méthode du comportement d'échelle étendu et nous l'appliquons à la susceptibilité du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure. Nous expliquons en quoi cette méthode se révèle plus efficace que le schéma habituel. Dans une troisième section, nous présentons l'algorithme de ver avec lequel nous avons réalisé les simulations Monte Carlo, combiné avec un algorithme en temps continu. Cet algorithme permet des simulations nettement plus rapides que les algorithmes habituels tel que l'algorithme de Wolff pour la gamme de températures envisagée. À partir de ces simulations, nous obtenons par interpolation les valeurs numériques des amplitudes et des exposants du développement de la susceptibilité pour les dimensions $d = 5$, 6, 7 et 8 dans le cadre du comportement d'échelle étendu.

2.1 Corrections d'échelle : le schéma habituel

2.1.1 Groupe de renormalisation

Lorsque le système est suffisamment proche du point critique, le comportement en température des fonctions thermodynamiques est donné par des fonctions algébriques

de la température réduite ou variable d'échelle t qui est définie par :

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \,. \tag{2.1}$$

Cependant, lorsqu'on s'éloigne de la région critique, il faut ajouter des corrections à ce comportement dominant. La susceptibilité s'écrit par exemple [Wegn72] :

$$\chi \underset{T \approx T_c}{\approx} \Gamma t^{-\gamma} \left(1 + a_1 t^{\theta} + a_2 t^{2\theta} + \cdots + b_1 t + b_2 t^2 + \ldots\right) \,, \tag{2.2}$$

où θ est un exposant non entier universel et les coefficients Γ, a_i et b_i sont des amplitudes non universelles. Les corrections en puissances non entières de t sont appelées corrections non analytiques ou confluentes. Elles proviennent des opérateurs non pertinents. Les corrections en puissances entières de t sont appelées corrections analytiques. Elles proviennent du développement à des ordres supérieurs des opérations analytiques du groupe de renormalisation. Il est possible de retrouver la forme (2.2) dans le cas du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure en considérant le modèle ϕ^4 défini par le hamiltonien (1.25). L'analyse dimensionnelle de ce hamiltonien permet d'obtenir les dimensions d'échelle des différents couplages qui sont données dans le système (1.72) de la sous-section 1.3.2. Pour $d > d_c$, la constante de couplage g tend vers zéro sous l'action répétée des transformations du groupe de renormalisation. Les poids statistiques intervenant dans la fonction de partition (1.26) peuvent s'écrire sous la forme du développement :

$$\exp\left(-\mathcal{H}_{\phi}[\phi]\right) \approx \left(1 - \frac{g}{4!} \int d^d\vec{r}\phi^4(\vec{r}) + \ldots\right) \exp\left(-\mathcal{H}_G[\phi]\right) \,,$$

où $\mathcal{H}_G[\phi]$ est le hamiltonien gaussien. Dans cette approximation, les moyennes du modèle ϕ^4 se calculent comme des moyennes gaussiennes. En particulier, le propagateur $\tilde{C}(\vec{k})$ du modèle ϕ^4 dans l'espace de Fourier s'écrit au premier ordre comme la somme des diagrammes représentés sur la figure 2.1. On obtient l'expression [Itzy89] :

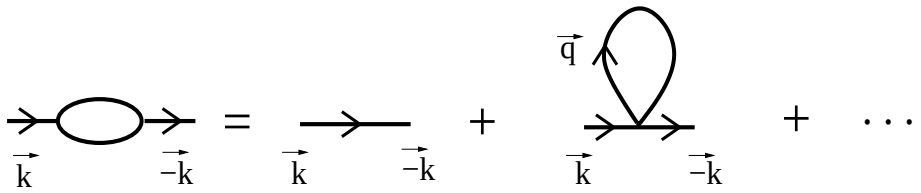


FIG. 2.1 – Le propagateur du modèle ϕ^4 au premier ordre dans l'espace de Fourier est la somme de deux diagrammes : le propagateur gaussien et la correction à une boucle.

$$\tilde{C}(\vec{k}) \approx \tilde{C}_G(\vec{k}) - \frac{g}{2}\tilde{C}_G(\vec{k}) \int \frac{d^d\vec{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \mu^2} \tilde{C}_G(\vec{k}) + \ldots \,, \tag{2.3}$$

où $\tilde{C}_G(\vec{k})$ est le propagateur du modèle gaussien dans l'espace de Fourier. L'intégrale intervenant dans l'expression (2.3) diverge pour $d \geq 2$. Nous effectuons le changement de variable $\vec{u} = \vec{q}/\mu$. Un tel changement de variable n'est pas possible dans une intégrale divergente, mais permet cependant d'obtenir la dimension d'échelle correcte :

$$\int \frac{d^d\vec{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2+\mu^2} = \mu^{-2} \int \frac{d^d\vec{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q/\mu)^2+1} = \mu^{d-2} \int \frac{d^d\vec{u}}{(2\pi)^d} \frac{1}{u^2+1} \,. \tag{2.4}$$

La dimension d'échelle de la correction à une boucle est donc $d-2$. En revenant au théorème fluctuation-dissipation (1.40), on s'aperçoit que la susceptibilité est obtenue en prenant le mode $\vec{k} = \vec{0}$ du propagateur. Puisque $\chi_G/\beta \sim \mu^{-2}$, il vient :

$$\chi/\beta \sim \mu^{-2} \left(1 + c_1 \mu^{d-4} + \dots\right) \,, \tag{2.5}$$

où les coefficients c_i sont des amplitudes réelles. Le comportement thermique du modèle est retrouvé en considérant μ^2 comme une fonction analytique de l'écart au point critique [Ma00] que nous avons exprimée au premier ordre par l'expression (1.29). De façon plus générale, on peut écrire :

$$\mu^2 \sim t + d_2 t^2 + \dots \,, \tag{2.6}$$

où les coefficients d_i sont des amplitudes réelles. En utilisant (2.6) dans (2.5), on obtient l'expression de la susceptibilité (2.2) pour les dimensions impaires avec la valeur du champ moyen $\gamma = 1$ et l'exposant des corrections non analytiques $\theta = (d-4)/2$. Pour les dimensions paires, il est probable que des corrections logarithmiques soient présentes comme cela est démontré pour le modèle sphérique [Joyc72] qui possède les mêmes exposants de champ moyen que le modèle d'Ising. Pour $d > 6$, on s'aperçoit que $\theta > 1$ et donc les corrections non analytiques sont masquées par les corrections analytiques. Ainsi, au-dessus de la dimension critique supérieure, seules les dimensions $d = 5$ et $d = 6$ sont affectées par des corrections dominantes non analytiques. De plus, $d = 6$ est la seule dimension paire à être affectée par des corrections non analytiques dominantes avec d'éventuels logarithmes. Guttmann a déterminé les amplitudes et les exposants en dimensions $d = 5$ et $d = 6$ par technique d'analyse de séries [Gutt81]. Notons que les corrections logarithmiques en dimension $d = 6$ sont citées dans l'article [Gutt81], mais elles n'ont pas été prises en compte dans l'analyse qui permet d'obtenir les valeurs numériques du développement. Remarquons également que Gofman *et al* [Gofm93] ont considéré ce problème en dimensions $d = 6$ et 7. Les exposants sont en accord avec les résultats du modèle sphérique [Joyc72, Gutt81] mais les valeurs numériques des amplitudes ne sont pas données. Leur analyse suggère la présence de corrections logarithmiques pour $d = 6$. L'étude pionnière de Binder du modèle d'Ising à cinq dimensions par simulation Monte Carlo [Bind85a] suggère un premier terme correctif non analytique pour la chaleur spécifique et pour la susceptibilité en accord avec (2.2), tandis que le premier terme correctif de l'aimantation aurait une forme analytique.

2.1.2 Développement haute température

Les développements haute température s'obtiennent en récrivant la fonction de partition du modèle d'Ising sur réseau hypercubique sous la forme [Binn95, Pari98] :

$$Z_I = \cosh(\beta J)^{dN} \sum_{\{S\}} \prod_{(k,l)} (1 + S_k S_l v) \ , \tag{2.7}$$

où $v = \tanh(\beta J)$ et $\prod_{(k,l)}$ est un produit où les sites k et l sont premiers voisins. Après développement du produit, on obtient des termes en puissance de v faisant intervenir des produits de spins. On associe une liaison entre deux sites premiers voisins lorsqu'ils apparaissent dans un terme. La sommation sur les configurations fait disparaître les termes où interviennent un nombre impair de spins (et donc de liaisons) pour un site donné. On peut représenter ces termes par des trajectoires fermées sur le réseau. La fonction de partition (2.7) devient :

$$Z_I = 2^N \cosh(\beta J)^{dN} \sum_{l=0}^{\infty} g(l) v^l \ , \tag{2.8}$$

où $g(l)$ est le nombre de possibilités de tracer une ou plusieurs boucles avec l liaisons. Le calcul de Z_I consiste à obtenir les coefficients $g(l)$ en comptant les possibilités de construire des graphes avec l liaisons. Plus β est grand, plus le nombre de graphes qui contribuent est important. On obtient la susceptibilité par dérivation de l'énergie libre :

$$\chi \underset{T \gg 1}{\approx} \beta \left(1 + h_1 \beta^2 + h_2 \beta^3 + \dots\right) \ , \tag{2.9}$$

où les amplitudes h_i sont des nombres réels. Pour le modèle d'Ising en dimension $d = 2$, il existe des développements de la susceptibilité jusqu'à l'ordre 300 [Orri01]. En dimension $d = 3$, il existe des développements à l'ordre 25 [Bute02]. Il existe également un développement en dimension d arbitraire sur réseau hypercubique. Ce développement a été initié jusqu'au $11^{\text{ème}}$ ordre par Fisher et Gaunt [Fish64] et poursuivi au $15^{\text{ème}}$ ordre par Gofman *et al* [Gofm93] en fonction de $\tanh \beta$. C'est le seul disponible pour les dimensions supérieures à $d_c = 4$.
Afin d'illustrer cette section, le développement critique de Guttmann [Gutt81] obtenu par analyse de séries et le développement haute température de Gofman *et al* [Gofm93] pour la susceptibilité non connectée $\chi/\beta = \langle M^2 \rangle$ en dimensions cinq et six sont comparés à nos simulations Monte Carlo sur la figure 2.2. On constate que les données numériques basculent entre les deux approches : le développement critique est valide pour $t \approx 0$ et le développement haute température est valide pour $t \gg 1$. Le comportement d'échelle étendu a pour but d'unifier la description des variables thermodynamiques en un seul développement.

2.2 Comportement d'échelle étendu

2.2.1 Construction de la forme d'échelle

Considérons une grandeur thermodynamique quelconque $\mathcal{O}$ divergente à l'approche du point critique avec un exposant ρ et qui admet une limite à haute température de la

forme β^{ψ} :

$$\mathcal{O}(t) \underset{T\to T_c}{\approx} A_t t^{-\rho}\,, \tag{2.10}$$

$$\mathcal{O}(T) \underset{T\to\infty}{\to} \beta^{\psi}\,, \tag{2.11}$$

où A_t est une amplitude. L'analyse standard du comportement thermique des observables thermodynamiques consiste à tracer les données en fonction de la variable d'échelle (2.1).
La première étape du comportement d'échelle étendu est de substituer la variable d'échelle (2.1) par la variable τ définie par :

$$\tau = \frac{T - T_c}{T}\,. \tag{2.12}$$

Les variables d'échelle (2.1) et (2.12) ont le même comportement lorsque $T \to T_c$:

$$t \underset{T\to T_c}{\to} 0 \quad \text{et} \quad \tau \underset{T\to T_c}{\to} 0\,, \tag{2.13}$$

et donc le comportement critique (2.10) de $\mathcal{O}$ est similaire avec la variable τ :

$$\mathcal{O}(\tau) \underset{T\to T_c}{\approx} A_\tau \tau^{-\rho}\,, \tag{2.14}$$

où A_τ est une amplitude. En revanche, à haute température, les limites sont différentes :

$$t \underset{T\to\infty}{\to} \infty \quad \text{et} \quad \tau \underset{T\to\infty}{\to} 1\,. \tag{2.15}$$

La variable d'échelle τ permet une limite finie de l'observable $\mathcal{O}$ contrairement à t.
La deuxième étape consiste à choisir une amplitude critique fonction de la température de la forme $A_\tau \sim \beta^{\psi}$ de sorte que la limite haute température s'obtienne à partir du développement critique :

$$\mathcal{O}(\tau) \underset{T\to T_c}{\sim} \beta^{\psi}\tau^{-\rho}\,, \tag{2.16}$$

$$\mathcal{O}(\tau) \underset{T\to\infty}{\sim} \beta^{\psi}\,. \tag{2.17}$$

Il est donc possible de construire une forme pour l'observable $\mathcal{O}$ qui possède les limites critique et haute température exactes. La tâche consiste à tester numériquement la validité du développement entre ces deux limites. On a en particulier pour la susceptibilité :

$$\chi/\beta \sim \tau^{-\gamma}\,. \tag{2.18}$$

Pour la définition de la longueur de corrélation :

$$\xi = \left(\frac{1}{2d\chi}\sum_r r^2 \langle S_0 S_r\rangle\right)^{1/2}\,, \tag{2.19}$$

on a [Camp06a, Bute02] :

$$\xi/\beta^{-1/2} \sim \tau^{-\nu}\,. \tag{2.20}$$

Pour le modèle d'Ising en champ moyen, les expressions de la susceptibilité et la longueur de corrélation données par (2.18) et (2.20) sont exactes dans toute la phase haute température [Camp08]. Pour le modèle d'Ising $2d$, l'ajout d'un terme correctif dans les expressions (2.18) et (2.20) permet d'obtenir les résultats obtenus par la méthode de Padé avec une précision de l'ordre de $1/1000$ [Camp08]. On peut également regarder la figure 1 de la référence [Camp06a] où le développement critique [Gart88] et le développement haute température [Bute02] de la susceptibilité du modèle d'Ising bidimensionnel sont tracés comparativement en fonction des variables d'échelle t et τ. On s'aperçoit que les corrections d'échelle au terme dominant du développement deviennent très faibles dès lors que la variable τ est utilisée au lieu de t. La chaleur spécifique du modèle d'Ising $3d$ donne des résultats satisfaisants lorsque deux termes correctifs sont ajoutés [Camp06b].
Un autre aspect du comportement d'échelle étendu (qui n'est pas considéré dans ce chapitre) est la modification de l'analyse des effets de taille finie. Lorsque le système possède une taille L, le comportement critique est modifié. Il est cependant possible de décrire une observable $\mathcal{O}$ suivant la forme d'échelle [Fish72] :

$$\mathcal{O}(T, L) \sim L^{\rho/\nu} \tilde{\mathcal{O}}(L/\xi(T)) \,, \tag{2.21}$$

où $\tilde{\mathcal{O}}(x)$ est une fonction d'échelle universelle. Dans le cadre du comportement d'échelle étendu, on ajoute une amplitude β^{ψ} donnée par (2.11) et on utilise l'expression (2.20) pour $\xi(T)$ pour obtenir [Camp06a] :

$$\mathcal{O}(L, \beta) \sim \beta^{\psi} \left(\frac{L}{\beta^{1/2}} \right)^{\rho/\nu} \hat{\mathcal{O}}(L/\xi(T)) \,, \tag{2.22}$$

où $\hat{\mathcal{O}}(x)$ est une autre fonction d'échelle. Cette nouvelle forme permet une extension du régime d'échelle des effets de taille finie pour le modèle d'Ising $2d$ et $3d$ [Camp06a, Camp06b] et le modèle d'Edwards-Anderson $3d$. Cette méthode fonctionne également pour les modèles qui présentent une croissance exponentielle de la longueur de corrélation à l'approche du point critique, tels que le modèle d'Ising $1d$ et le modèle d'Ising complètement frustré $2d$ [Katz08]. D'autres analyses ont été effectuées notamment pour le modèle XY $3d$ et le modèle d'Heisenberg $3d$ [Camp06a, Camp06b]. Tous ces résultats mettent en évidence l'extension du comportement d'échelle par la méthode du comportement d'échelle étendu.

2.2.2 Application au modèle d'Ising en dimensions supérieures

Afin d'appliquer la méthode du comportement d'échelle étendu au modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure, on écrit explicitement la susceptibilité pour $d = 5$, 6, 7 et 8 en utilisant (2.2) et en supposant des corrections logarithmiques dans la correction dominante pour la dimension $d = 6$:

$$\chi(T)/\beta \approx \Gamma t^{-1} + B t^{-\frac{1}{2}} + C + \dots \,, \quad \text{pour } d = 5, \tag{2.23}$$

$$\chi(T)/\beta \approx \Gamma t^{-1} + B \ln t + C + \dots \,, \quad \text{pour } d = 6, \tag{2.24}$$

$$\chi(T)/\beta \approx \Gamma t^{-1} + C + \dots \,, \quad \text{pour } d = 7, \tag{2.25}$$

$$\chi(T)/\beta \approx \Gamma t^{-1} + C + \dots \,, \quad \text{pour } d = 8, \tag{2.26}$$

où Γ, B et C sont des amplitudes réelles. Notons que ces expressions ont déjà été citées par Guttmann [Gutt81], y compris le logarithme en dimension $d = 6$. On se place maintenant dans le schéma du comportement d'échelle étendu en remplaçant t par τ suivant les relations :

$$t = \frac{\tau}{1-\tau} = \tau + \tau^2 + \tau^3 + \dots \tag{2.27}$$

La susceptibilité devient :

$$\chi(T)/\beta = \Gamma\tau^{-1} + B\tau^{-1/2} + C(\tau)\,, \quad \text{pour } d = 5, \tag{2.28}$$
$$\chi(T)/\beta = \Gamma\tau^{-1} + B\ln(\tau) + C(\tau)\,, \quad \text{pour } d = 6, \tag{2.29}$$
$$\chi(T)/\beta = \Gamma\tau^{-1} + C(\tau)\,, \quad \text{pour } d = 7 \text{ et } d = 8, \tag{2.30}$$

où $C(\tau)$ est une fonction qui regroupe les corrections d'ordre plus élevé. Étant donné que :

$$\lim_{T\to\infty} \chi(T)/\beta = 1\,, \quad \text{et} \tag{2.31}$$
$$\lim_{\tau\to 1} C(\tau) = C\,, \tag{2.32}$$

il existe des relations entre les différentes amplitudes :

$$C = 1 - \Gamma - B \quad \text{pour } d = 5, \tag{2.33}$$
$$C = 1 - \Gamma \quad \text{pour } d = 6, 7 \text{ et } 8. \tag{2.34}$$

Les analyses précédentes de la susceptibilité [Camp06a, Camp06b] en dimension $d = 2$ ont montré qu'un seul terme correctif était suffisant. Nous avons décidé de stopper le développement dans les expressions (2.28), (2.29) et (2.30) au premier terme analytique, c'est-à-dire, nous conservons deux termes correctifs en dimensions cinq et six (la correction dominante qui est non analytique et la première correction analytique) et un seul terme en dimensions sept et huit correspondant à la correction dominante qui est analytique. La qualité du développement obtenu à partir de l'interpolation des données numériques justifie *a posteriori* la troncation à un ordre aussi bas. L'avantage de l'analyse des données numériques par la méthode du comportement d'échelle étendu est de permettre une interpolation des données Monte Carlo dans toute la zone haute température (hors de la zone des effets de taille finie), au lieu de se restreindre à une fenêtre de température autour de T_c pour laquelle la longueur de corrélation vérifie $1 \ll \xi(T) < L$ *i.e.* une longueur de corrélation suffisamment grande pour être dans le régime critique, mais suffisamment petite pour éviter les effets de taille finie.

2.3 Simulations Monte Carlo

2.3.1 L'algorithme de ver (*worm algorithm*)

Les données numériques ont été obtenues par simulation Monte Carlo en utilisant l'algorithme de ver (de l'anglais *worm algorithm*) introduit par Prokof'ev, Svistunov et Tupitsyn [Prok98, Prok01]. Les données obtenues avec cet algorithme sont

notées dans la suite MCTHSE de l'anglais *Monte Carlo High-Temperature Series Expansion*. A haute température, cet algorithme se révèle nettement plus rapide que les algorithmes habituels tel que l'algorithme de Wolff. De plus, comme il est expliqué plus bas, le formalisme permet d'échantillonner directement sur les graphes de la fonction de corrélation et d'obtenir ainsi une estimation de la susceptibilité à l'aide du théorème fluctuation-dissipation (1.40). Une représentation en terme de spins engendre des fluctuations supplémentaires. Le principe est basé sur une réécriture de la fonction de corrélation $\langle S_i S_j \rangle$ du modèle d'Ising :

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z_I} \sum_{\{S\}} S_i S_j e^{-\beta \sum_{k,l} S_k S_l} , \tag{2.35}$$

$$= \frac{1}{Z_I} \cosh(\beta J)^{dN} \sum_{\{S\}} S_i S_j \prod_{k,l} (1 + S_k S_l \tanh(\beta J)) . \tag{2.36}$$

Il est possible de remplacer la somme sur les configurations de spins par une somme sur les graphes, par analogie avec le développement à haute température de la fonction de partition. Les configurations qui contribuent à la somme dans l'expression (2.36) sont celles qui font intervenir dans le produit un nombre pair de spins pour un site donné. Ces contributions peuvent être aussi représentées par des graphes. Le schéma en haut de la figure 2.3 donne un exemple de graphe qui contribue à la fonction de corrélation : des boucles ou des trajectoires ouvertes joignant les sites i et j qui sont appelés sites sources. Comme toute simulation Monte Carlo, le principe est basé sur un échantillonnage des graphes qui contribuent le plus à la moyenne (en anglais *importance sampling*). Nous construisons une chaîne de Markov à partir de l'équation maitresse :

$$\frac{\partial P_\nu(t)}{\partial t} = \sum_{\mu \neq \nu} (P_\mu(t) W_{\mu \to \nu} - P_\nu(t) W_{\nu \to \mu}) , \tag{2.37}$$

où $P_\nu(t)$ est la probabilité de trouver le système dans un état n au temps t et $W_{\mu \to \nu}$ est le taux de transition entre l'état μ et l'état ν. On peut définir les taux de transition de façon à obtenir une probabilité d'équilibre P_ν^{eq}. On utilise pour cela la condition du bilan détaillé en annulant terme à terme la somme dans le membre de droite de l'équation maitresse (2.37) :

$$P_\mu^{eq} W_{\mu \to \nu} = P_\nu^{eq} W_{\nu \to \mu} , \tag{2.38}$$

$$\Leftrightarrow W_{\nu \to \mu} / W_{\mu \to \nu} = P_\mu^{eq} / P_\nu^{eq} . \tag{2.39}$$

Il est possible de distinguer deux contributions dans le taux de transition $W_{\nu \to \mu}$ sous la forme [New01] :

$$W_{\nu \to \mu} = g_{\nu \to \mu} A_{\nu \to \mu} , \tag{2.40}$$

où $g_{\nu \to \mu}$ est appelée probabilité de sélection qui est la probabilité de générer un nouvel état μ à partir d'un état ν. $A_{\nu \to \mu}$ est le taux d'acceptation qui détermine la probabilité d'accepter le changement $\nu \to \mu$. Un moyen de satisfaire l'équation du bilan détaillé est d'utiliser une procédure locale de type Metropolis [Metr53] qui s'écrit sous forme compacte :

$$W_{\nu \to \mu} = g_{\nu \to \mu} \min(1, P_\mu^{eq} / P_\nu^{eq}) . \tag{2.41}$$

Revenons à la procédure explicite pour l'algorithme de ver. L'une des deux sources, disons i, est mobile. À chaque étape, elle se déplace sur un site voisin choisi aléatoirement, sans distinguer si une liaison est déjà présente ou pas. Chaque site premier voisin de la source i a donc une probabilité $g_{\nu\to\mu} = 1/2d$ d'être choisi, ce qui défini la probabilité de sélection pour chaque mouvement. Lorsqu'aucune liaison n'est présente entre ces deux sites, le mouvement est accepté avec un taux de transition :

$$W_{\emptyset\to|} = \frac{1}{2d}\min(1, \tanh\beta J)\,. \tag{2.42}$$

Si le mouvement est accepté, une liaison est créée. Lorsqu'une liaison est déjà présente entre ces deux sites, le mouvement est accepté avec un taux de transition :

$$W_{|\to\emptyset} = \frac{1}{2d}\min(1, 1/\tanh\beta J)\,. \tag{2.43}$$

Puisqu'on a la relation $0 \leq \tanh x < 1\ \forall x > 0$, la probabilité $W_{|\to\emptyset}$ est toujours égale à l'unité et la liaison est toujours effacée. Ces probabilités de transition sont obtenues en considérant la procédure de Metropolis [Metr53] (2.41) ainsi que la forme (2.36) de la fonction de corrélation. Afin de l'illustrer considérons le taux de transition reliant les deux graphes qui diffèrent seulement d'une liaison sur le schéma du bas de la figure 2.3. Le graphe de gauche et de droite représentent des vers de longueurs respectives cinq et six pas de réseau. En accord avec la relation (2.36), le graphe de gauche a une probabilité d'équilibre $P_\nu^{eq} = A\tanh^5(\beta J)$ tandis que le graphe de droite a une probabilité d'équilibre $P_\mu^{eq} = A\tanh^6(\beta J)$, où A est une constante. Les taux de transition de type Metropolis (2.41) s'écrit donc $W_{\nu\to\mu} = 1/2d\min(1, \tanh\beta J)$ et $W_{\mu\to\nu} = 1/2d\min(1, 1/\tanh\beta J)$, en accord avec les formules (2.42) et (2.43). Si les deux sources se rencontrent, elles ont la possibilité de se déplacer ensemble sur un autre site du réseau choisi aléatoirement. Cette éventualité possède une probabilité qui peut être déterminée librement. Nous l'avons fixée à $1/2$. Lorsque les deux sources bougent ensemble, elles laissent une boucle, ce qui justifie la présence simultanée de trajectoires ouvertes et de boucles dans l'exemple de la figure 2.3. Ces boucles peuvent disparaître si la tête du ver les rencontre. Par rapport à l'algorithme de Swendsen-Wang, l'algorithme de ver possède un exposant dynamique légèrement plus élevé à deux dimensions mais significativement plus faible à trois dimensions [Deng07]. De plus, la dynamique est accélérée dans nos simulations en utilisant un programme en temps continu [Bort75]. À chaque étape Monte Carlo, on calcule les probabilités ω_α de toutes les éventualités α. Puis le temps passé par le système dans le même état est estimé par :

$$\mathcal{T} = 1 + \mathrm{Int}\left(\frac{\ln\eta}{\ln(1-\sum_\alpha\omega_\alpha)}\right)\,, \tag{2.44}$$

où η est une variable aléatoire distribuée uniformément sur l'intervalle $]0;1]$. Le temps est augmenté d'une quantité $\mathcal{T}$ puis l'une des éventualités α est choisie avec la probabilité ω_α et appliquée au système.

Le formalisme de l'algorithme est bien adapté pour les simulations à haute température. En revanche, à proximité de la température critique, le nombre de graphes qui contribuent à la fonction de corrélation croît exponentiellement. De manière à vérifier la

convergence de l'algorithme à proximité de la température critique, nous avons réalisé des simulations avec l'algorithme de Wolff [Wolf89] dont le ralentissement critique est mieux compris. On a choisi pour les simulations avec l'algorithme de Wolff une température proche de T_c. La méthode de repondération de l'histogramme [Ferr88] nous a permis d'obtenir les valeurs pour les températures adjacentes. Ces méthodes ont dans ce chapitre un rôle secondaire. Elles sont présentées plus en détail dans le chapitre suivant. La comparaison en dimension $d = 5$ est présentée sur la figure 2.4. On constate que les deux algorithmes donnent des résultats en bon accord pour toutes les tailles étudiées excepté pour les plus grandes tailles dans le régime des effets de taille finie. Cela n'a pas d'incidence sur les résultats puisque le régime d'effets de taille finie n'est pas utilisé dans l'analyse des données. En dimension $d = 5$, nous pouvons donc avoir confiance dans les données obtenues avec l'algorithme de ver. Les mêmes tests ont été réalisés en dimension 6. L'algorithme de ver permet d'obtenir des données depuis la fin de la région des effets de taille finie jusqu'à la région haute température avec une efficacité optimale et sans présenter de problèmes de convergence.

2.3.2 Analyse des données

Explicitons la méthode utilisée à cinq dimensions pour obtenir l'expression du développement de la susceptibilité à partir des données numériques. En supposant la relation (2.33) suffisante à toute température, on peut réécrire (2.28) sous la forme :

$$\chi(T)/\beta \approx \Gamma\tau^{-\gamma} + B\tau^{\vartheta} + C\,, \tag{2.45}$$

où

$$\vartheta = -\gamma + \theta\,. \tag{2.46}$$

Les données sont obtenues, pour toutes les dimensions et à chaque température, après thermalisation du système pendant 30.10^6 itérations élémentaires qui sont définies lorsque la tête du ver choisit un site premier voisin. La mesure est réalisée sur 300.10^6 itérations élémentaires. Ces nombres d'itérations doivent être multipliés par un facteur d'accélération puisque nous utilisons un algorithme en temps continu. Par exemple, en dimension $d = 5$, le facteur d'accélération est 79 pour la température $T = 25$ et 54 pour $T = 8.76$ qui est la température la plus proche du point critique. Les mesures sont séparées par intervalles de $2\mathfrak{T}$ où le temps d'autocorrélation $\mathfrak{T}$ est déterminé selon l'ordre du développement. En dimension $d = 5$ par exemple, pour les deux températures $T = 25$ et 54, on estime $\mathfrak{T} = 124$ et 184 respectivement. Pour chaque dimension et taille, nous effectuons les simulations à 64 températures réparties logarithmiquement. La simulation pour une température donnée est réalisée avec le graphe final de la température voisine supérieure de manière à optimiser la thermalisation. Nous avons testé les effets de taille finie avec des systèmes de différentes tailles. Par exemple, nous avons simulé en dimension $d = 5$ les tailles $L = 6$ à 24 par pas de deux et en dimension $d = 6$ les tailles $L = 6$ à 20 par pas de deux. Le temps de simulation pour une taille et une température est de 8min30 environ sur des processeurs *Xeon quad-core* de fréquence 2GHz. Une itération élémentaire prend un temps de 1.5μs. Le temps de simulation ne dépend pas de la taille mais uniquement de la longueur de corrélation qui est faible à haute température. De manière à se placer suffisamment loin

de la région des effets de taille finie, on réalise des simulations pour plusieurs tailles.
En dimension $d = 5$, pour un réseau de taille $L = 14$, la zone entre $T = 8.9$ et $T = 25$ constitue un intervalle sûr. Une première interpolation est réalisée avec six paramètres libres : Γ, B, C, T_c (intervenant dans τ selon (2.12)), ϑ et γ. On s'aperçoit alors que $\gamma = 1.0(2)$ est compatible avec la valeur attendue de champ moyen $\gamma = 1$. On accepte la valeur du champ moyen et une interpolation à cinq paramètres donne $T_c = 8.7743(95)$ qui est compatible avec la meilleure estimation de la littérature $T_c = 8.77844(2)$ [Luij99]. On accepte cette estimation de la littérature et une interpolation à quatre paramètres donne $\Gamma = 1.28(2)$, $B = -0.44(19)$ de telle sorte que $1-\Gamma-B = 0.16(2)$ est compatible avec $C = 0.17(2)$. On admet alors la relation (2.33) et une interpolation à trois paramètres donne $\vartheta = -0.47(8)$ soit $\theta = 0.53(8)$ d'après (2.46) qui est compatible avec la valeur $1/2$ attendue d'après le développement perturbatif (2.28). Cette valeur est acceptée et une interpolation à deux paramètres donne accès aux amplitudes $\Gamma = 1.291(3)$ et $B = -0.310(8)$. La précision de l'interpolation est déterminée par un test χ^2 par degré de liberté. La même analyse pour une taille $L = 16$ donne des résultats compatibles. Le résultat est tracé en haut sur la figure (2.5). On s'aperçoit que l'expression issue de notre analyse décrit de façon satisfaisante les données numériques depuis le début des effets de taille finie jusqu'à la zone haute température. Pour comparaison, le précédent développement critique de Guttmann [Gutt81] donne des valeurs incompatibles $\Gamma = 1.311(9)$ et $B = -0.48(3)$. Nous avons vérifié qu'il ne décrit pas les données numériques, même dans le schéma du comportement d'échelle étendu où t est remplacé par τ.
À six dimensions, on s'attend à la présence d'un logarithme dans les corrections dominantes d'après la relation (2.29). Pour ne pas biaiser l'analyse en faveur d'un logarithme, on réalise une première analyse en utilisant la forme (2.45). Les données numériques sont obtenues pour un réseau de taille $L = 14$. L'interpolation est réalisée entre les températures $T = 10.88$ et $T = 30$ où les effets de taille finie sont absents. En suivant la même procédure que pour la dimension $d = 5$, on obtient successivement $T_c = 10.8318(24)$, proche de la valeur $T_c = 10.8348(4)$ obtenue dans la littérature [Gofm93]), $\gamma = 0.95(25)$ et $\vartheta = -0.01(40)$. Puisque cette dernière valeur est proche de zéro et instable en réduisant le nombre de paramètres, on en conclut qu'un logarithme peut être présent. Puisqu'on arrête le développement au premier terme analytique dans l'expression (2.29), on remplace la fonction $C(\tau)$ par une constante C et il vient :

$$\chi(T)/\beta \sim \Gamma\tau^{-\gamma} + B\ln\tau + C\,, \tag{2.47}$$

où $C = 1 - \Gamma$ d'après (2.34). Puis, on accepte l'estimation de la littérature pour T_c. Une interpolation à quatre paramètres mène à $\gamma = 0.994(3)$ qui est compatible avec la valeur de champ moyen $\gamma = 1$. Cette valeur est acceptée. Une interpolation à trois paramètres conduit à $1 - \Gamma = -0.1607(24)$ et $C = -0.1605(18)$, ce qui est compatible avec la relation (2.34) qui est acceptée. Une interpolation à deux paramètres permet d'obtenir $\Gamma = 1.1606(17)$ et $B = 0.0571(27)$. Le résultat du développement est tracé en bas sur la figure 2.5. Le résultat de l'interpolation de la relation (2.47) permet de décrire la susceptibilité sur toute la gamme de températures considérée. Pour comparaison, nous avons vérifié que le développement critique de Guttmann dévie des données numériques même tracé en fonction de τ. Cette déviation s'explique par une

estimation erronée des amplitudes comme pour $d = 5$ et également par le fait que le logarithme n'est pas inclus dans l'analyse des séries bien que sa présence soit explicitement citée dans l'article.
En dimensions 7 et 8, on interpole les données d'après (2.30) sous la forme :

$$\chi(T)/\beta \sim \Gamma\tau^{-\gamma} + C\,, \tag{2.48}$$

où $C = 1 - \Gamma$ d'après (2.34). Les corrections dominantes sont analytiques. Pour $d = 7$, on utilise une taille $L = 12$ qui est suffisante pour s'affranchir des effets de taille finie sur la gamme de températures de l'interpolation (des simulations pour $L = 10$, 12 et 14 ont permis de le vérifier). Une interpolation à quatre paramètres mène à $T_c = 12.8665(5)$, proche de la valeur $12.8690(4)$ obtenue dans la littérature par développement à haute température [Gofm93]. On accepte cette valeur et une interpolation à trois paramètres mène à $\gamma = 1.000(2)$, compatible avec la valeur de champ moyen. On accepte cette valeur. Une interpolation à deux paramètres permet d'obtenir $\Gamma = 1.1086(9)$ et $C = -0.1215(20)$. On accepte alors la relation (2.34) et une interpolation à un paramètre donne $\Gamma = 1.1008(5)$.
En dimension $d = 8$, on obtient successivement $T_c = 14.8893(20)$ compatible avec la valeur $T_c = 14.893(3)$ obtenue dans la littérature par effets de taille finie [Merd06]), $\gamma = 0.998(2)$ compatible avec la valeur de champ moyen, $\Gamma = 1.0935(45)$ et $C = -0.0950(26)$. La relation (2.34) est valide et on obtient finalement $\Gamma = 1.0836(5)$. Les résultats sont tracés sur la figure 2.6 pour les dimensions 7 (en haut) et 8 (en bas). Aucun développement critique n'a été déterminé précédemment pour les dimensions $d = 7$ et $d = 8$. L'expression (2.48) permet de décrire correctement les données numériques depuis le régime critique, hors effets de taille finie, jusqu'à la zone haute température.
Pour chaque dimension, nous avons obtenu des valeurs après avoir admis un certain nombre de paramètres. Il est possible de revenir à l'estimation indépendante de chacun de ces paramètres. Nous obtenons les valeurs résumées dans la table 2.1. Cette table

d	T_c	γ	ϑ	Amplitudes
5	$8.7777(9)$	$1.0(2)$	$-0.47(8)$	$\Gamma = 1.291(3)$, $B = -0.310(8)$
				$C = 0.019(11)$
6	$10.8353(4)$	$0.994(3)$	0 [log.]	$\Gamma = 1.1606(17)$, $B = 0.0571(27)$
				$C = -0.1606(17)$
7	$12.8690(3)$	$1.000(2)$		$\Gamma = 1.1008(5)$, $C = -0.1008(5)$
8	$14.8933(8)$	$0.998(2)$		$\Gamma = 1.0836(5)$, $C = -0.0836(5)$

TAB. 2.1 – Résumé des résultats numériques obtenus pour $d = 5, 6, 7$ et 8. L'exposant γ est compatible dans tous les cas avec la valeur du champ moyen $\gamma = 1$. En dimension $d = 6$, la correction logarithmique correspond à un exposant $\vartheta = 0$. Au-delà, pour $d = 7$ et 8, les corrections dominantes sont analytiques.

nous permet de constater l'approche de l'amplitude Γ vers la valeur du champ moyen $\Gamma = 1$ (d'après (1.11) en posant $k_B = 1$) lorsque la dimension augmente.

Nous avons également tracé l'évolution de la température inverse en fonction de la dimension en haut sur la figure 2.7. Pour $d = 2$, il existe une valeur exacte [Kram41]. Pour $d = 3$ et $d = 4$, nous avons choisi les valeurs de la littérature [Deng03] et [Kenn91] respectivement. Les valeurs pour $d = 5$, 6, 7 et 8 proviennent de nos résultats. Les données se rapprochent de la droite en pointillés qui correspond au comportement de champ moyen d'après la relation (1.8). La ligne continue correspond à l'interpolation polynomiale réalisée à partir des valeurs de β_c :

$$\beta_c(d) = b_1/d + b_2/d^2 + b_3/d^3 + b_4/d^4 \,, \tag{2.49}$$

où $b_1 = 0.5044(3)$, $b_2 = 0.1935(30)$, $b_3 = 0.35(1)$ et $b_4 = 1.53(1)$. De façon à inclure dans la figure la dimension $d = 1$ pour laquelle la solution exacte permet d'estimer $T_c = 0$ soit $\beta_c = \infty$, on a également tracé l'évolution de $\tanh \beta_c$ en bas sur la figure 2.7. La ligne en pointillés correspond au comportement de champ moyen donné par la relation (1.8). La ligne continue correspond à l'interpolation polynomiale réalisée à partir des valeurs de $\tanh \beta_c$:

$$\tanh \beta_c(d) = c_1/d + c_2/d^2 + c_3/d^3 + c_4/d^4 \,, \tag{2.50}$$

où $c_1 = 0.5834(6)$, $c_2 = 0.748(6)$, $c_3 = 3.78(2)$ et $c_4 = 2.62(2)$.

Nous avons étudié les corrections d'échelle de la suceptibilité en dimensions cinq à huit dans le cadre du comportement d'échelle étendu. Le comportement dominant est donné par l'approximation du champ moyen. Un développement perturbatif du modèle ϕ^4 permet d'avoir une idée de la forme des corrections dominantes qui sont non analytiques en dimensions cinq et six et analytiques au-delà. La solution du modèle sphérique suggère des logarithmes dans les corrections dominantes en dimension six. Nous avons obtenu des données numériques avec l'algorithme de ver en temps continu qui se révèle performant dans la gamme de températures envisagée. Le cadre du comportement d'échelle étendu permet une détermination précise les paramètres du développement incluant le comportement dominant et les corrections dominantes. Ce développement décrit la susceptibilité dans toute la phase haute température contrairement aux méthodes utilisées habituellement. De plus, nous mettons en évidence des corrections logarithmiques en dimension six.

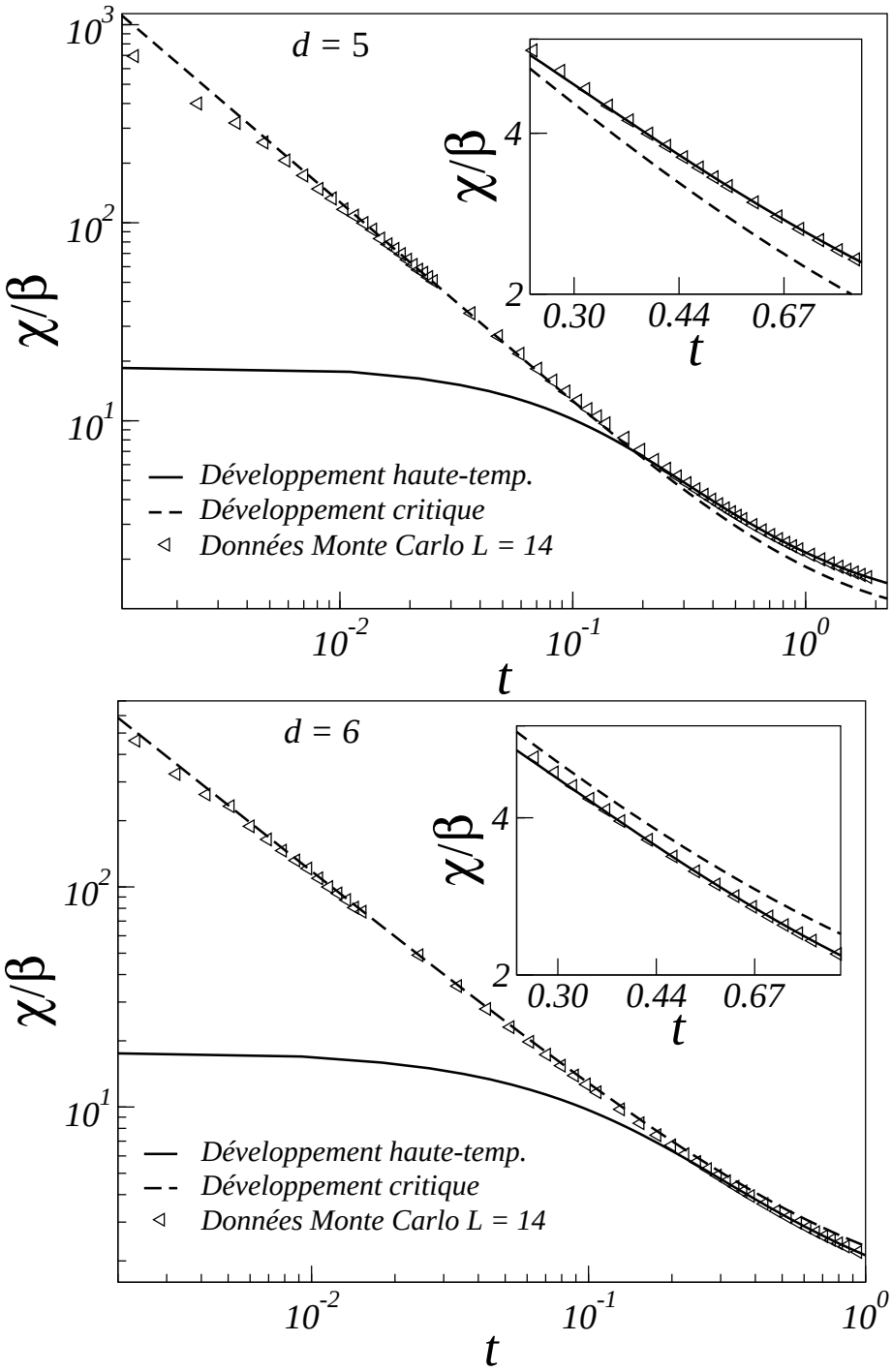


FIG. 2.2 – Afin d'illustrer la description de la susceptibilité par la méthode habituelle, des données numériques obtenues par simulations Monte Carlo en dimensions $d = 5$ (en haut) et $d = 6$ (en bas) sont comparées au développement critique de Guttmann [Gutt81] obtenu par analyse de séries et le développement haute température de Gofman *et al* [Gofm93]. On constate que les données numériques basculent entre les deux développements. Dans l'insert se trouve un agrandissement de la région où le développement critique sort de son régime de validité. Notons que lorsque $t \to 0$, les données numériques ressentent les effets de taille finie du réseau qui ne sont pas décrits par le développement critique.

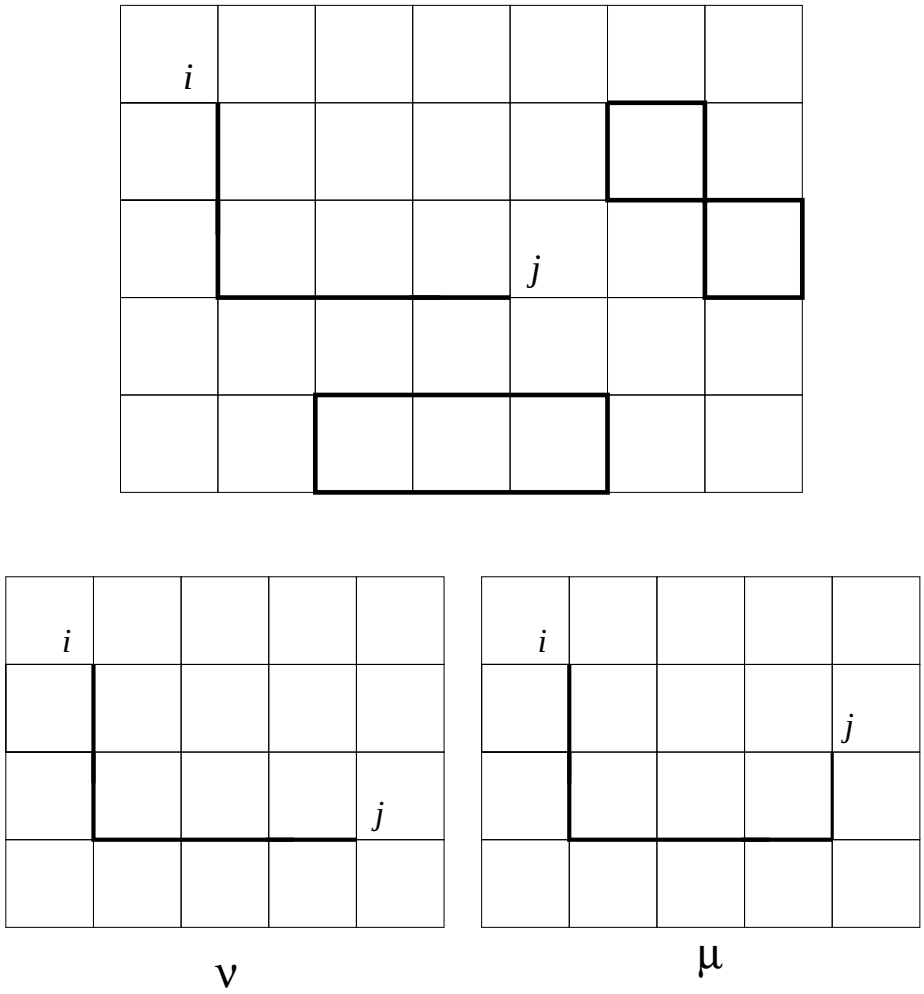


FIG. 2.3 – Sur ces deux schémas, les lignes épaisses représentent les graphes qu'on peut assimiler à un ver (d'où la dénomination algorithme de ver). Les points i et j sont appelés sources. En haut, nous avons représenté un exemple de graphe qui contribue à la fonction de corrélation (2.36) : une trajectoire ouverte joignant les sites i et j et éventuellement des boucles fermées. En bas, nous avons représenté deux exemples de graphes qui diffèrent d'une seule liaison. D'après la relation (2.36), le graphe de gauche a une probabilité d'équilibre $P_\nu^{eq} = A \tanh^5 \beta J$ tandis que le graphe de droite a une probabilité d'équilibre $P_\mu^{eq} = A \tanh^6 \beta J$, où A est une constante. Les taux de transition de type Metropolis (2.41) s'écrivent donc $W_{\nu\to\mu} = 1/2d\min(1, \tanh \beta J)$ et $W_{\mu\to\nu} = 1/2d\min(1, 1/\tanh \beta J)$, où le terme $1/2d$ est la probabilié de sélection de la liaison concernée par le mouvement parmi les $2d$ choix équiprobables pour un réseau à d dimensions.

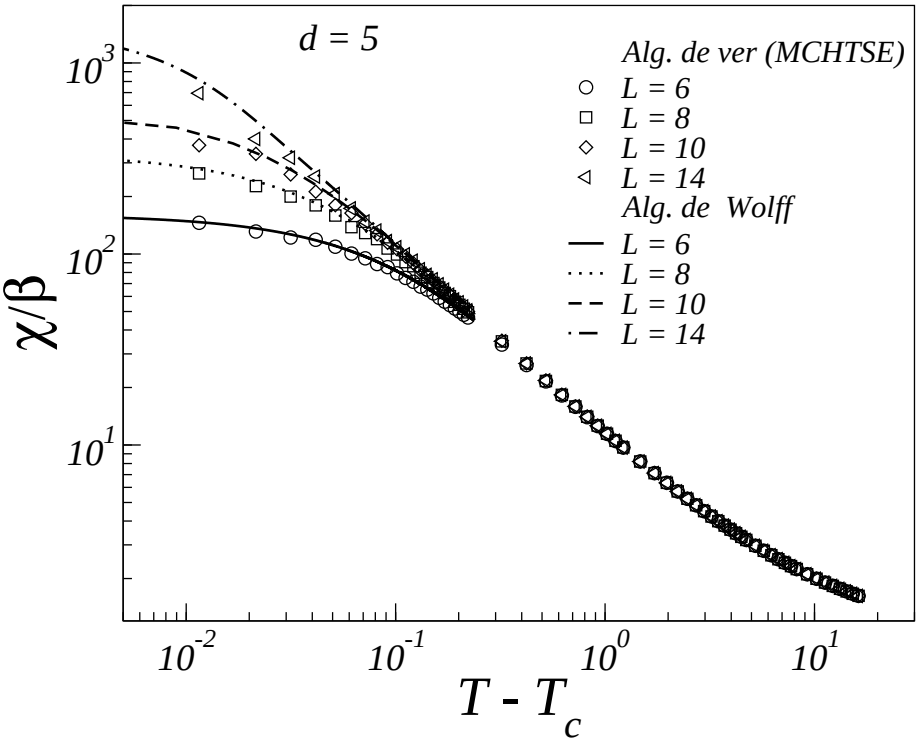


FIG. 2.4 – Comparaison des données obtenues avec l'algorithme de ver et l'algorithme de Wolff combiné à la méthode de repondération de l'histogramme en dimension $d = 5$ pour différentes tailles L. Les résultats sont en bon accord, sauf pour les plus grandes tailles dans le régime des effets de taille finie. Mais ce régime est exclu lors de l'analyse des données. La convergence de l'algorithme de ver est donc satisfaisante pour la détermination du développement critique.

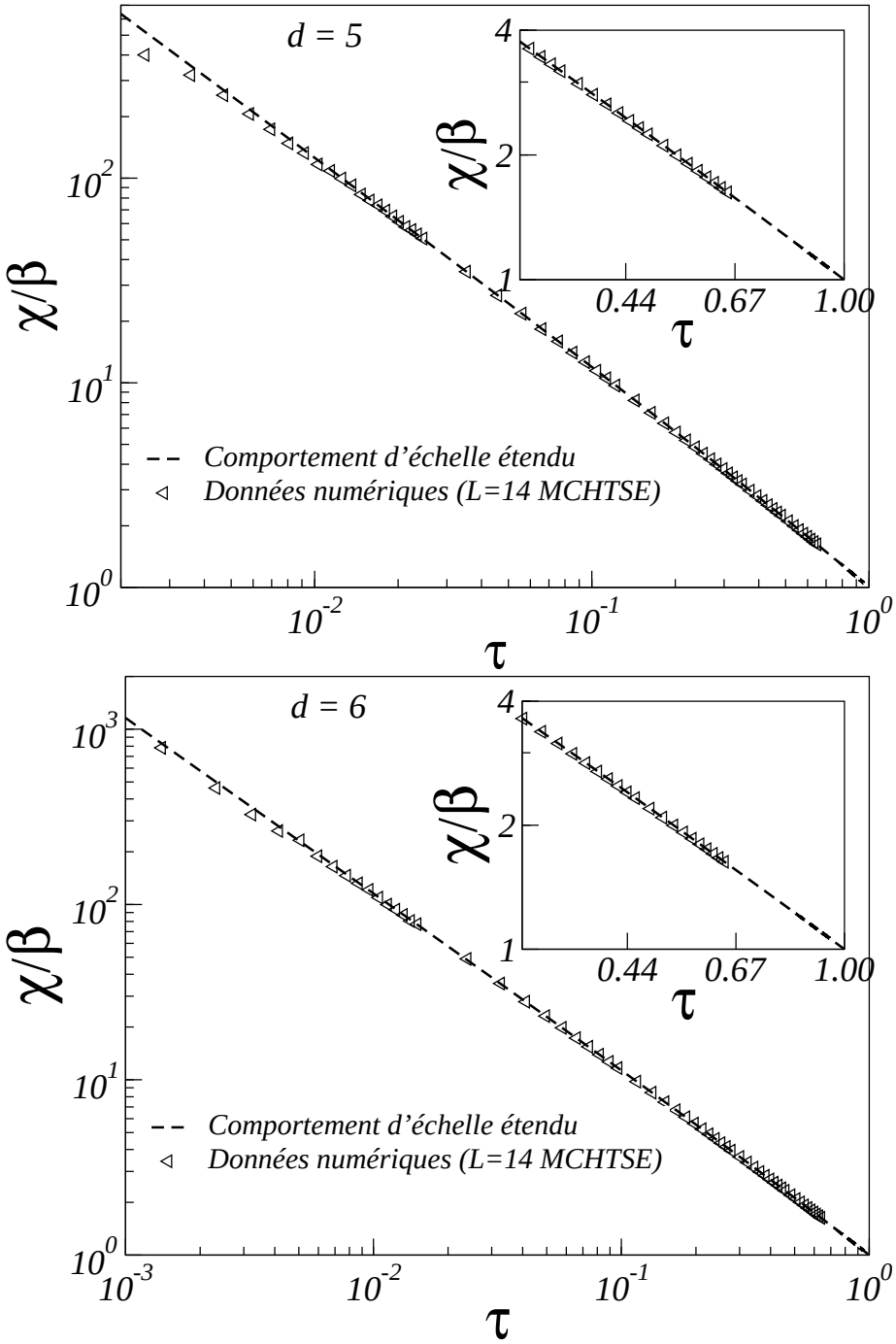


FIG. 2.5 – Comparaison des données numériques avec l'expression (2.45) pour la dimension $d = 5$ (en haut) et avec l'expression (2.47) pour la dimension $d = 6$ (en bas), obtenues en utilisant la méthode du comportement d'échelle étendu. L'accord est bon depuis le régime critique (après la zone des effets de taille finie) jusqu'à haute température. Dans l'insert, un agrandissement permet de constater que le développement est valide même à haute température. Cette étude constitue la première évidence numérique de corrections dominantes incluant un logarithme en dimension $d = 6$ (la présence de ces corrections est déjà citée dans [Gutt81] mais ne sont pas prises en compte dans l'analyse des séries).

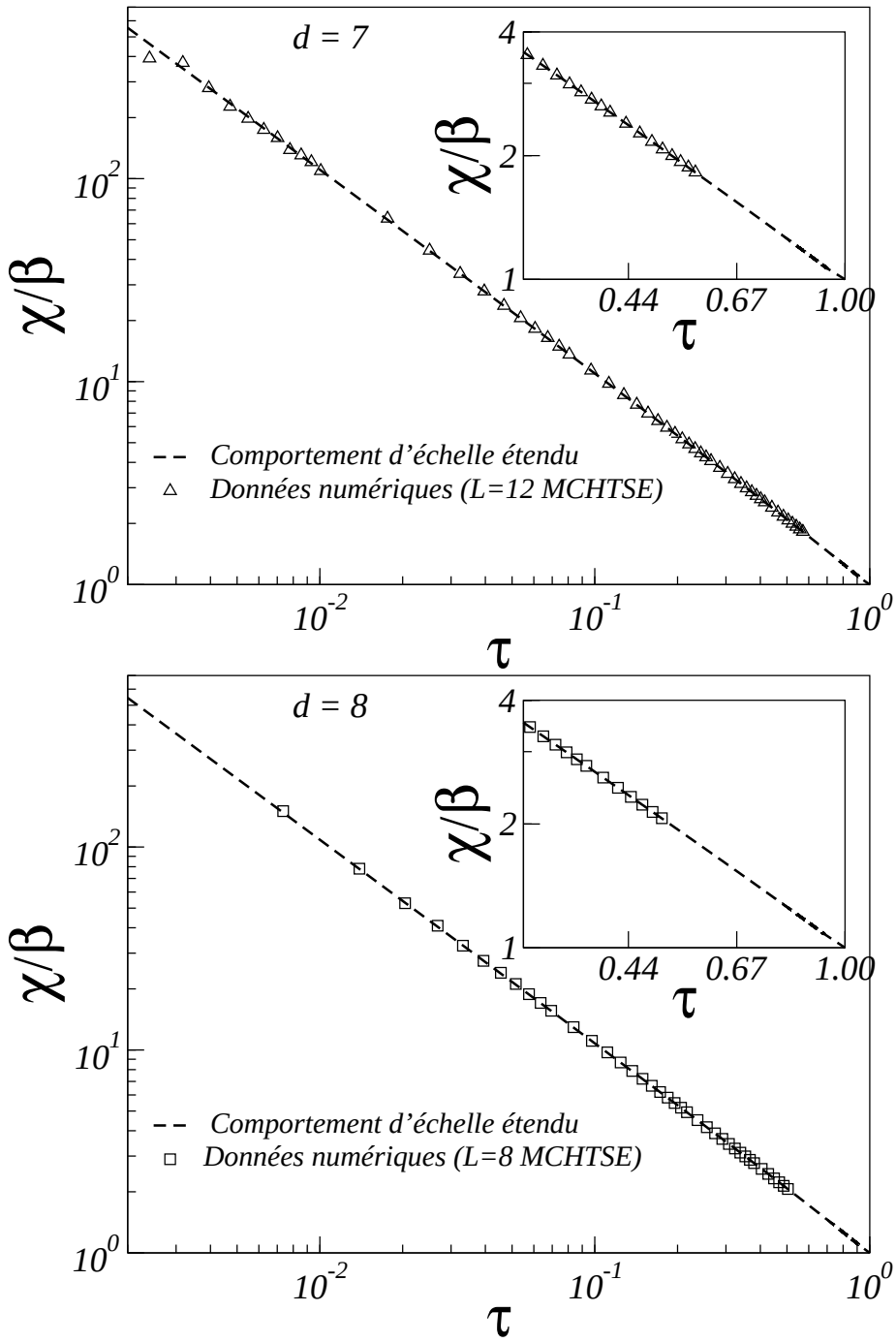


FIG. 2.6 – En dimension $d = 7$ (en haut) et $d = 8$ (en bas), les corrections dominantes de la susceptibilité sont analytiques. L'interpolation des données numériques selon l'expression (2.48) obtenue dans le schéma du comportement d'échelle étendu est tracée en pointillés. Les données numériques sont décrites par le développement pour toute la gamme de températures.

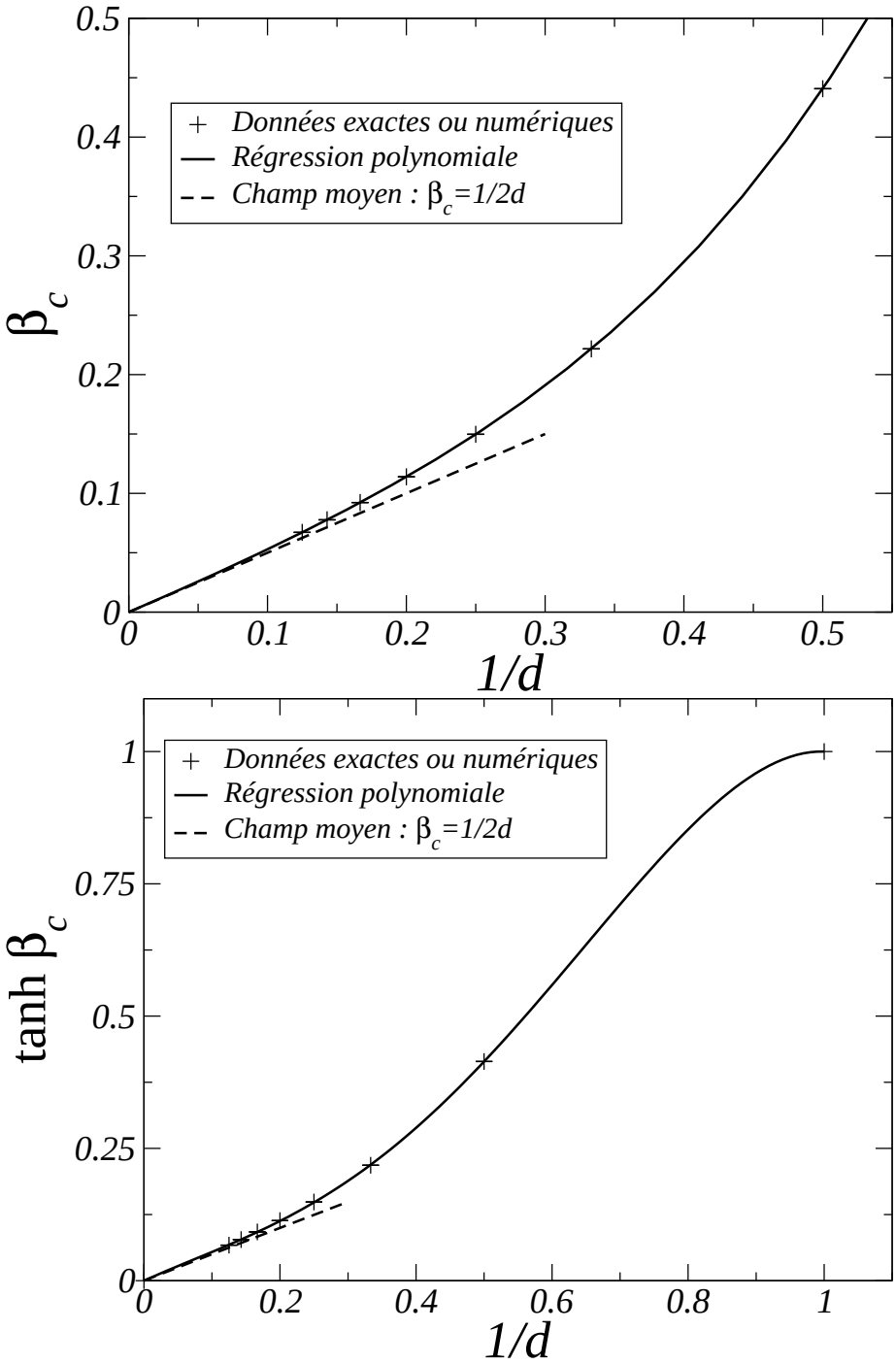


FIG. 2.7 – En haut, la température critique inverse du modèle d'Ising est tracée en fonction de la dimension. La courbe en trait plein correspond à l'interpolation polynomiale (2.49). En bas, nous avons tracé $\tanh \beta_c$ en fonction de la dimension de façon à placer sur la figure la valeur $\beta_c = \infty$ soit $\tanh \beta_c = 1$ pour la dimension $d = 1$. Les lignes en pointillés représentent les expressions obtenues dans l'approximation du champ moyen (1.8).

Chapitre 3

Effets de taille finie anormaux

Nous présentons dans ce chapitre des résultats préliminaires concernant l'étude des effets de taille finie du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure. Dans ce régime d'effets de taille finie, il est établi théoriquement que la longueur de corrélation présente une croissance anormale avec la taille du système. La relation habituelle valable notamment au point pseudo-critique $\xi \sim L$ devient $\xi \sim L^{d/4}$. Le comportement du maximum de la susceptibilité devient $\chi_{max} \sim \xi^2 \sim L^{d/2}$. Ce comportement a été vérifié extensivement par simulations Monte Carlo avec des conditions de bords périodiques. Cependant, on trouve dans la littérature des arguments fondés sur des calculs analytiques contre un tel comportement pour les conditions de bords libres. Nous apportons dans ce chapitre des évidences numériques de la croissance anormale de longueur de corrélation qui a lieu également avec des conditions de bords libres. Dans une première section, nous présentons le cadre des effets de taille finie normaux et la modification engendrée au-dessus de la dimension critique supérieure. La deuxième section a pour objet les méthodes numériques utilisées pour cette étude : les simulations Monte Carlo sont réalisées avec l'algorithme de Wolff, combiné à la repondération de l'histogramme. Dans une troisième section, nous présentons les résultats numériques obtenus en dimension cinq. Dans un premier temps, nous utilisons tous les sites du réseau pour analyser les résultats. L'influence des surfaces ne permet pas d'atteindre le régime asymptotique, mais nos résultats permettent d'exclure un comportement normal. Afin de réduire les corrections d'échelle liées aux surfaces, nous considérons dans un second temps des réseaux de cœur qui ne comportent que des sites de volume. Cette méthode permet de décrire le maximum de la susceptibilité par $\chi_{max} \sim \xi^2 \sim L^{2.5}$ aux barres d'erreur près.

3.1 Introduction

3.1.1 Effets de taille finie : le schéma classique

Lorsqu'un système est de taille L finie, la singularité de l'énergie libre disparaît. Les divergences observées pour la susceptibilité et la chaleur spécifique deviennent

des maxima qui ont lieu en des points pseudo-critiques. L'amplitude des maxima et la valeur des températures pseudo-critiques sont des fonctions de la taille du système. Le système commence à ressentir sa taille finie lorsque la longueur de corrélation ξ devient du même ordre de grandeur que sa taille L, donc à proximité du point critique. Puisque la taille du système modifie le comportement critique, il est justifié de considérer $1/L$ comme une variable pertinente. Lors d'une itération du groupe de renormalisation, la taille se transforme comme $L' \to L/b$. On associe donc à la variable d'échelle $1/L$ la dimension déchelle $y_L = 1$. L'hypothèse homogénéité de la partie singulière de l'énergie libre (1.54) devient [Card96] :

$$f_s(t,h,L) \sim b^{-d} f_s(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b/L). \tag{3.1}$$

Dans la suite, on appelle T_c la température critique du système dans la limite thermodynamique et $T_c(L)$ la température du point pseudo-critique. Prenons l'exemple de l'aimantation dont la transformation (1.58) est obtenue en posant $h = 0$ et $b = |t|^{-1/y_t}$ et en se plaçant dans la phase basse température ($T < T_c$) :

$$m(t,0,L) \sim |t|^{\beta} m(1,0,t^{-\nu}/L) \sim L^{-\beta/\nu}\mathcal{M}(L/\xi(t))\,, \tag{3.2}$$

où $\mathcal{M}(x)$ est une fonction d'échelle reliée à $m(1,0,x)$ par $\mathcal{M}(x) \sim x^{\beta/\nu}m(1,0,x)$. De plus, on a utilisé la relation (1.64) $\xi(t) \sim |t|^{-\nu}$. À partir de cette expression, il est possible de décrire le comportement de l'aimantation en fonction de la taille du système selon deux protocoles. Le premier consiste à se placer en $t = 0$. On a alors d'après (3.2) $m(0,0,L) \sim L^{-\beta/\nu}$. Le deuxième consiste à se placer au point pseudo-critique pour lequel $|t|^{\nu}L =$ Cste, c'est-à-dire :

$$|T_c(L) - T_c| \sim L^{-1/\nu}\,. \tag{3.3}$$

On a alors également, toujours d'après (3.2), le comportement $m(t,0,L) \sim L^{-\beta/\nu}$. De manière générale, une fonction thermodynamique $\mathcal{O}$ qui possède un exposant critique ρ peut se réécrire en fonction de la taille du système selon l'expression (2.21) que nous rappelons :

$$\mathcal{O}(t,L) \sim L^{\rho/\nu}\tilde{\mathcal{O}}(L/\xi(t))\,, \tag{3.4}$$

où $\mathcal{O}(x)$ est une fonction d'échelle. Dans le cadre du comportement d'échelle étendu, cette relation est remplacée par (2.22), mais nous n'étudions pas cet aspect ici.

3.1.2 Effets de taille finie anormaux

Brézin [Brez82] a étudié les effets de taille finie du modèle ϕ^4 sur un réseau à d dimensions avec différentes géométries. En dimensions $d > 4$ et pour des conditions périodiques dans toutes les directions, la longueur de corrélation croît avec la taille L comme :

$$\xi_L(T_c) \sim \mu_L^{-1}(T_c) \sim L^{d/4}\,. \tag{3.5}$$

Cette relation a été vérifiée numériquement par Jones et Young [Jone05] en dimension $d = 5$. Brézin et Zinn-Justin [Brez85] ont considéré entre autres le modèle ϕ^4 à l'ordre le plus bas en perturbation. À partir de l'action effective :

$$S_{eff} = L^d\left(\frac{t}{2}\phi^2 + \frac{1}{4!}\phi^4\right)\,, \tag{3.6}$$

les moyennes de chaque moment de l'aimantation sont données par des intégrales gaussiennes. On a en particulier pour la susceptibilité :

$$\chi \sim L^{d/2} \,. \tag{3.7}$$

Il est possible de définir une quantité invariante au point critique et pseudo-critique qui s'appelle le cumulant de Binder. Il existe plusieurs définitions qui diffèrent par des constantes. En suivant [Brez85], nous choisissons la définition :

$$g(T) = \frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} \,. \tag{3.8}$$

À la température critique T_c le cumulant de Binder $g(T_c)$ prend la valeur universelle [Brez85] :

$$g(T_c) = \frac{\Gamma^4(1/4)}{8\pi^2} \approx 2.188440\ldots \,, \tag{3.9}$$

tandis qu'au point pseudo-critique de la susceptibilité, une intégration de l'action (3.6) mène à la valeur [Pari96] :

$$g(T_c(L)) = 1.515726 \,. \tag{3.10}$$

La relation (3.7) a été vérifiée extensivement par simulation Monte Carlo. On peut par exemple consulter les articles de Binder *et al* [Bind85a, Bind85b], Rickwardt, Nielaba et Binder [Rick94], Parisi et Ruiz-Lorenzo [Pari96], Aktekin *et al* [Akte99]. La valeur universelle $g(T_c) \approx 0.81156$ a fait débat dans la littérature. Plusieurs auteurs ont déterminé numériquement une valeur incompatible [Rick94, Jone05]. Cependant, Luijten et Blöte [Luij96] donnent des évidences de fortes corrections d'échelle qui mènent asymptotiquement à la valeur (3.9). Parisi et Ruiz-Lorenzo [Pari96] concluent également à des résultats compatibles avec [Brez85] pour le cumulant de Binder, tout comme Mon [Mon96].
Il a été montré que le décalage de la température pseudo-critique de la susceptibilité se comporte aussi de manière anormale avec L dans [Luij96] et [Pari96] :

$$t \sim |T_c(L) - T_c| \sim L^{-d/2} \,, \tag{3.11}$$

en accord avec les simulations numériques et en contradiction avec le comportement habituel (3.3). Pour les conditions de bords périodiques deux articles présentent des arguments analytiques en faveur d'un comportement normal. Un article de revue de Watson [Wats73] établit une limite supérieure de la croissance de la susceptibilité à T_c telle que :

$$\chi \leq L^{\gamma/\nu} = L^2 \,, \tag{3.12}$$

en utilisant des relations fluctuation-dissipation et des inégalités de Griffith. L'article de Rudnick, Gaspari et Privman [Rudn85] présente un calcul de la susceptibilité à T_c en développant le paramètre d'ordre sur la base des ondes stationnaires. Leur calcul mène au comportement asymptotique normal $\chi \sim L^2$. Ces résultats remettent en cause l'universalité du comportement anormal qui ne devrait pas dépendre des conditions de bords.

3.2 Méthodes numériques

Dans ce chapitre, nous avons réalisé des simulations numériques du modèle d'Ising à cinq dimensions avec des conditions de bords libres et périodiques en utilisant l'algorithme de Wolff [Wolf89] combiné à la repondération de l'histogramme [Ferr88]. Ces méthodes sont présentées en détail dans l'ouvrage [New01] et les discussions qui suivent s'en inspirent largement.

3.2.1 L'algorithme de Wolff

A proximité du point critique, il y a apparition de fluctuations critiques décrites dans la section 1.2. La longueur de corrélation du modèle d'Ising par exemple devient très grande. Son ordre de grandeur est la taille du système. Cela entraîne l'apparition de larges domaines de spins alignés comme l'illustre la figure 1.9. Le temps de calcul pour simuler des grandes tailles augmente rapidement avec un algorithme Monte Carlo local dont les taux de transitions sont déterminés par exemple avec les procédures de Metropolis ou de Glauber. Le temps d'autocorrélation nécessaire pour obtenir des configurations décorrélées augmente selon :

$$\tau \sim L^{z_c} \,, \tag{3.13}$$

où $z_c \approx 2.17$. On parle de ralentissement critique. Ce ralentissement s'explique en remarquant qu'il est difficile de changer l'aimantation d'un amas corrélé spin par spin. Pour des probabilités d'équilibre définies par la statistique de Boltzmann, la condition du bilan détaillé (2.39) entre deux états ν et μ s'écrit :

$$W_{\nu\to\mu}/W_{\mu\to\nu} = e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)} \,. \tag{3.14}$$

Le taux de transition de Metropolis (2.41) satisfait cette condition :

$$W_{\nu\to\mu} = \frac{1}{N}\min(1, e^{-\beta\Delta E}) \,, \tag{3.15}$$

où $\Delta E = E_\mu - E_\nu$ et N est le nombre de spins du réseau. Pour un réseau à deux dimensions, un spin possède quatre premiers voisins. Si ce spin est au cœur d'un amas corrélé, entouré de quatre premiers voisins alignés, son énergie est $E_\nu = -4J$. L'énergie après retournement de ce spin est $E_\mu = 4J$. On obtient donc à la température critique $T_c \approx 2.269$ un taux d'acceptation très faible $A_{\nu\to\mu} = e^{-8\beta_c J} = 0.0294....$ Donc la plupart des tests sont refusés. Un moyen de remédier à cette difficulté est de mettre au point un algorithme non-local qui effectue un test sur un amas corrélé pouvant contenir plusieurs spins. Un tel algorithme a été mis au point par Wolff [Wolf89] en utilisant l'idée de Swendsen et Wang [Swen87]. Le passage entre deux configurations de spins ν et μ est représenté sur la figure 3.1. La procédure consiste à choisir un site au hasard sur le réseau qu'on peut appeler site graine. A partir de ce spin, on ajoute ses voisins à l'amas avec une probabilité P_{add} s'ils ont la même orientation. Si l'orientation est différente, ils ne sont pas ajoutés à l'amas. La procédure est répétée pour tous les voisins ajoutés à l'amas. Lorsque l'amas est formé on change le signe des spins automatiquement. La probabilité de former l'amas dans la configuration ν est la même

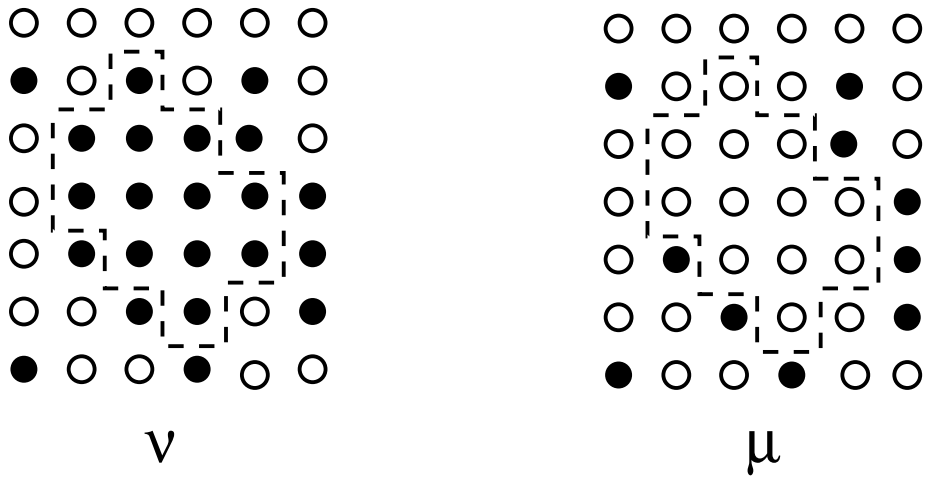


FIG. 3.1 – Les points blancs et noirs représentent des spins de signes opposés et les spins à l'intérieur de la boucle en pointillés font partie d'un même amas. Ce schéma illustre une itération de l'algorithme de Wolff entre deux configurations de spins ν et μ qui diffèrent par l'inversion du signe des spins appartenant à un même amas.

que pour la configuration μ, à ceci près qu'il faut tenir compte des spins de même signe qui n'ont pas été ajoutés à l'amas sur les bords. La probabilité de ne pas ajouter un spin de même signe à l'amas est $1 - P_{add}$. Si m et n représentent les nombres de spins de même signes non-ajoutés à l'amas pour les configurations respectives ν et μ, alors la condition du bilan détaillé (2.39) peut s'écrire comme :

$$\frac{W_{\nu\to\mu}}{W_{\mu\to\nu}} = \frac{g_{\nu\to\mu}A_{\nu\to\mu}}{g_{\mu\to\nu}A_{\mu\to\nu}} = (1-P_{add})^{m-n}\frac{A_{\nu\to\mu}}{A_{\mu\to\nu}} = e^{-\beta J(E_\mu - E_\nu)}\,, \tag{3.16}$$

où nous avons utilisé une statistique de Boltzmann. En notant que $E_\nu - E_\mu = 2J(n - m)$, il vient :

$$\frac{A_{\nu\to\mu}}{A_{\mu\to\nu}} = \left[(1-P_{add})e^{2\beta J}\right]^{n-m}\,. \tag{3.17}$$

Donc en choisissant :

$$P_{add} = 1 - e^{2\beta J}\,, \tag{3.18}$$

les taux d'acceptance pour les transitions $\nu \to \mu$ et $\mu \to \nu$ peuvent prendre pour valeur l'unité. C'est pourquoi on inverse automatiquement le signe de tous les spins une fois l'amas formé. A proximité du point critique, l'algorithme de Wolff réduit de façon significative le temps d'autocorrélation τ et l'exposant dynamique critique z_c par rapport à un algorithme local de type Metropolis ou Glauber. Remarquons que le temps $\tilde{\tau}_W$ mesuré en terme d'itérations de l'algorithme de Wolff correspond au test d'un nombre p de spins contenus dans l'amas. Or un temps τ_M mesuré en terme d'itérations d'un algorithme de Metropolis correspond à un test sur tout le réseau, donc $N = L^d$ spins.

Puiqu'une itération de l'algorithme de Wolff ne balaie qu'une fraction moyenne $\langle p \rangle / L^d$ du réseau, il faut redéfinir le temps d'autocorrélation [New01] de façon à comparer les performances des deux algorithmes :

$$\tau_W = \tilde{\tau}_W \langle p \rangle / L^d \,. \tag{3.19}$$

De plus, il est possible de montrer que $\chi = \beta \langle p \rangle$ [New01]. En notant que $\tilde{\tau}_W \sim L^{\tilde{z}_c^W}$, il vient pour $\xi \sim L$:

$$\tau_W \sim \xi^{z_c^W} \sim L^{\tilde{z}_c^W + \gamma/\nu - d} \,, \tag{3.20}$$

menant à la définition de l'exposant dynamique z_c^W :

$$z_c^W = \tilde{z}_c^W + \gamma/\nu - d \,. \tag{3.21}$$

A deux dimensions par exemple, pour un système de taille 100×100, une valeur $\tilde{\tau}_W = 2.80(3)$ pour l'algorithme de Wolff qui est largement inférieure, même sans redéfinition, à la valeur obtenue avec l'algorithme de Metropolis $\tau_M = 2570(330)$ [New01]. L'exposant dynamique quant à lui vaut $z_c^W \approx 0$ pour l'algorithme de Wolff (voir par exemple les articles [Günd05, Du06] et leurs références) et $z_c^M = 2.1667(5)$ [Nigh96] pour l'algorithme de Metropolis.

3.2.2 La repondération de l'histogramme

La repondération de l'histogramme [Ferr88] est une méthode qui permet à partir d'une simulation à une température donnée d'obtenir une grandeur thermodynamique à des températures différentes. Cela permet de gagner du temps de calcul en évitant de réaliser des simulations à plusieurs températures. Le principe théorique comme la programmation sont simples. Les explications qui suivent sont largement inspirées de l'ouvrage [New01].
Rappelons que la moyenne thermodynamique d'une observable $\mathcal{O}$ s'obtient en moyennant sur tous les états du système, pondérés par un poids de Boltzmann :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_\nu \mathcal{O}_\nu e^{-\beta E_\nu}}{\sum_\nu e^{-\beta E_\nu}} \,. \tag{3.22}$$

Les techniques Monte Carlo consistent à réaliser une chaîne de Markov dans un sous-ensemble de l'espace total des états à partir d'une distribution de probabilité p_ν. Si on réalise M échantillonnages de l'observable $\mathcal{O}$ parmi les états $\{\nu_1, \nu_2 \ldots \nu_M\}$, la moyenne s'écrit :

$$\mathcal{O}_M = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\nu_i} p_{\nu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\nu_i}}}{\sum_{i=1}^M p_{\nu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\nu_i}}} \,. \tag{3.23}$$

L'équation du bilan détaillé (3.14), vérifiée notamment par les algorithmes de Metropolis et de Wolff, permet d'assurer que la distribution des états de la chaîne de Markov s'effectue selon la statistique de Boltzmann. On obtient alors $p_{\nu_i} \propto e^{-\beta E_{\nu_i}}$ et la relation (3.23) s'écrit simplement :

$$\mathcal{O}_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\nu_i} \,. \tag{3.24}$$

Il est cependant possible de réaliser une moyenne thermodynamique à la température β à partir d'une simulation à la température β_0 pour laquelle $p_{\nu_i} \propto e^{-\beta_0 E_{\nu_i}}$. La relation (3.23) devient :

$$\mathcal{O}_M = \frac{\sum_{i=1}^{M} \mathcal{O}_{\nu_i} e^{-(\beta-\beta_0)E_{\nu_i}}}{\sum_{i=1}^{M} e^{-(\beta-\beta_0)E_{\nu_i}}} \,. \tag{3.25}$$

Cette relation constitue le principe de la repondération de l'histogramme. Dans l'étude qui suit, la repondération de l'histogramme est utilisée lors une première simulation préalable relativement courte afin d'estimer approximativement la température pseudo-critique de la susceptibilité. Lors d'une deuxième simulation plus longue qui permet d'obtenir les valeurs pour l'analyse, on se place dans le voisinage immédiat du point pseudo-critique de telle sorte que la température de simulation est bien souvent incluse dans l'incertitude sur la température pseudo-critique.

3.3 La susceptibilité pour les conditions de bords libres

3.3.1 Susceptibilité calculée avec tous les sites

Nous présentons dans cette sous-section une étude numérique comparative de la susceptibilité du modèle d'Ising à cinq dimensions avec des conditions de bords périodiques et libres avec l'algorithme de Wolff [Wolf89] combiné à la repondération de l'histogramme [Ferr88]. Nous avons choisi de réaliser les simulations au point pseudo-critique afin d'éviter les sources d'erreurs liées aux extrapolations dans la détermination de la température d'un système infini T_c. Une simulation préliminaire nous permet d'estimer approximativement le point pseudo-critique. Puis, la simulation finale est réalisée autour de cette estimation aux barres d'erreur près. La repondération de l'histogramme nous permet d'obtenir les points des températures voisines et d'affiner l'estimation préliminaire. Puisque nous utilisons des valeurs repondérées uniquement à proximité de la température de simulation, il n'y a aucun problème de convergence comme nous avons pu le constater en effectuant des recouvrements d'histogrammes réalisés à des températures de simulation différentes. Nous avons réalisé un calcul préalable du temps d'autocorrélation qui se comporte, pour la gamme de tailles que nous considérons selon :

$$\tilde{\tau}_{PBC} = 0.32(7)L^{2.4(2)} \,, \tag{3.26}$$

pour les conditions de bords périodiques et :

$$\tilde{\tau}_{FBC} = 0.20(6)L^{2.6(2)} \,, \tag{3.27}$$

pour les conditions de bords libres. Nous réalisons pour les simualtions finales des mesures toutes les 2τ itérations de l'algorithme de Wolff afin de considérer les variables comme indépendantes dans le calcul des incertitudes [New01]. Dans cette sous-section, les réseaux ont des tailles qui varient entre $L = 11$ et 51 par pas de 5. Le nombre d'itérations et le temps d'autocorrélation utilisés pour chaque taille sont donnés dans la table 3.1, ainsi que les résultats pour le maximum de la susceptibilité $\chi_{max}(L)$, la température pseudo-critique $T_c(L)$ et la valeur du cumulant de Binder $g(T_c(L))$. La susceptibilité est présentée sur la figure 3.2 pour les conditions de bords périodiques

(en haut) et libres (en bas). On constate, comme on s'y attend, que les corrections d'échelle en température sont considérablement plus importantes pour les conditions de bords libres. On rappelle que nous avions déterminé $\beta_c \approx 0.113925$ dans la limite thermodynamique (voir la table 2.1). À partir de ces résultats, on peut extraire le maximum de la susceptibilité et procéder à une analyse des exposants critiques. Le résultat pour les conditions de bords périodiques est tracé sur la figure 3.3. Sur la figure du haut, nous avons tracé le maximum de la susceptibilité en fonction de la taille. On constate que la dépendance est bien décrite par une loi algébrique avec un exposant 2.5 à partir de la taille $L = 21$ aux barres d'erreur près, ce qui est en bon accord avec (3.7). Sur la figure du bas, nous avons réalisé une interpolation de l'exposant des données de la figure du haut en faisant varier la borne inférieure L_{min} de l'intervalle d'interpolation de façon à observer la convergence vers le régime asymptotique ($L_{min} \in [11; 41]$). L'exposant effectif est tracé en fonction de $1/L_{min}$ de telle sorte que le régime asymptotique est atteint à gauche de la figure. À partir de $L = 21$, on s'aperçoit que l'exposant se stabilise autour de la valeur 2.5. La même analyse est réalisée pour les conditions de bords libres. Les résultats sont présentés sur la figure 3.4. Sur la figure du haut, on constate que les données sont bien décrites pour les tailles $L < 31$ par $\chi_{max}(L) \sim L^2$, donc un comportement d'effets de taille finie normal. Cependant, la courbe en dévie significativement à partir de $L = 31$. L'exposant effectif tracé sur la figure du bas est nettement incompatible avec la valeur 2 pour les plus grandes tailles. Cependant, les données ne sont pas suffisamment précises pour extrapoler un exposant 2.5. D'après ce résultat, la susceptibilité croît plus vite que L^2 pour les conditions de bords libres et incidemment, la longueur de corrélation $\xi \sim \chi^{1/2}$ croît plus vite que la taille du système.

Il est également possible de tracer le cumulant de Binder $g(T_c(L))$ défini par l'expression (3.8), et qui doit prendre au point pseudo-critique la valeur universelle (3.10) que nous rappelons $g(T_c(L)) = 1.515726$ [Pari96]. Nous présentons nos résultats sur la figure 3.5 pour les deux types de conditions aux limites. On constate que les données, bien que bruitées, sont en bon accord avec l'estimation de Parisi et Ruiz-Lorenzo [Pari96] pour les deux types de conditions de bords, ce qui constitue un élément supplémentaire en faveur d'un comportement d'effet de taille finie identique. Nous n'avons pas été en mesure de tracer la valeur du cumulant de Binder pour la température T_c afin de vérifier la prédiction théorique (3.9) car T_c est trop loin de la température de simulation pour être incluse dans l'histogramme, en particulier pour les conditions de bords libres. Il est également possible d'obtenir des exposants à partir du décalage de la température pseudo-critique de la susceptibilité en fonction de la taille. Ces températures pseudo-critiques sont déterminées à partir des données de la figure 3.2 et résumées dans la table 3.1 et 3.2 pour les conditions de bords périodiques et libres respectivement. Nous avons tracé le décalage suivant la définition $t = |T_c(L) - T_c|$. Nous avons également testé la définition $\beta(L) - \beta_c \sim |T_c(L) - T_c|/T_c(L)$ qui donne les mêmes valeurs d'exposants aux barres d'erreur près. Nous utilisons la valeur de T_c la plus précise donnée dans la littérature $T_c = 8.77844(2)$ (soit $\beta_c = 0.1139155(5)$) [Luij99] qui possède un chiffre significatif supplémentaire par rapport à notre estimation $T_c = 8.7777(9)$ fournie dans la table 2.1.

Les résultats pour les conditions de bords périodiques sont présentés sur la figure 3.6. On constate que les erreurs relatives sont importantes. Pour les plus grandes tailles, la

température dans la limite thermodynamique $T_c = 8.77844(2)$ est très proche de la température pseudo-critique. Par exemple pour $L = 51$, la température pseudo-critique est $T_c(51) = 8.77801(15)$. L'incertitude sur l'écart est presque aussi grande que l'écart lui-même. Nous n'avons pas pu obtenir une interpolation raisonnable de l'exposant.
La même analyse est effectuée pour le décalage en température avec les conditions de bords libres. Les résultats sont tracés sur la figure 3.7. Puisque les effets de taille finie sont plus importants, la température pseudo-critique est plus éloignée de la valeur dans la limite thermodynamique et les erreurs relatives sont moins importantes. On constate que l'exposant effectif se dirige plus vraisemblablement vers la valeur classique 2 et non pas vers la valeur attendue 2.5 en accord avec la relation (3.11). Cela peut provenir de corrections d'échelle plus importantes pour le décalage en température par rapport au maximum de la susceptibilité.
Les tables 3.1 et 3.2 résument les paramètres et les données extraites de ces simulations pour les conditions de bords périodiques et libres respectivement. Puisque le calcul

L	nbr. iter.	$\beta_c(L)$	$\chi_{max}(L)$	$g(T_c(L))$	τ utilisé
11	2500000	0.114185(20)	283(1)	1.51552(50)	200
16	500000	0.114025(11)	744(4)	1.5095(11)	1000
21	77500	0.113971(11)	1490(23)	1.5157(27)	1000
26	110000	0.113948(6)	2531(32)	1.5141(23)	2500
31	32000	0.113937(5)	3967(90)	1.5014(40)	2500
36	20000	0.113930(4)	5828(80)	1.5083(54)	5000
41	20000	0.113926(3)	7905(250)	1.4949(55)	5000
46	14000	0.113923(2)	10950(390)	1.5263(64)	5000
51	7200	0.113921(2)	14080(685)	1.5497(87)	7000

TAB. 3.1 – Nous présentons les informations extraites des simulations de la susceptibilité pour des conditions de bords périodiques. "nbr. iter." représente le nombre d'itérations indépendantes sur lesquelles sont réalisées les moyennes.

avec tous les sites présente des corrections d'échelle considérables nous adoptons une autre approche en considérant uniquement des sites de volume.

3.3.2 Susceptibilité calculée avec les sites de cœur

Pour un système hypercubique de dimension d, on distingue les sites par leur coordinence z et leur population $N(z)$ dans le réseau. Il existe $N(z) = (L-2)^d$ spins de cœur avec une coordinence $z = 2d$, $N(z) = 2C_d^1(L-2)^{d-1}$ spins d'hypersurface de dimension $d-1$ avec une coordinence $z = 2d-1$... On peut généraliser ce calcul pour des spins de coordinence arbitraire :

$$N(z) = 2^m C_d^m (L-2)^{d-m} \,, \tag{3.28}$$

où m est un entier défini par $z = 2d - m$ et $C_d^m = d!/(m!(d-m)!)$. Il est facile de s'apercevoir de la validité de l'expression (3.28) pour un réseau bidimensionnel représenté en haut sur la figure 3.8. Nous avons tracé en bas sur la figure 3.8 la quantité

L	nbr. iter.	$\beta_c(L)$	$\chi_{max}(L)$	$g(T_c(L))$	τ utilisé
11	1250000	0.120258(29)	109(1)	1.5090(35)	2000
16	625000	0.117033(17)	227(2)	1.5129(50)	2000
21	400000	0.115767(10)	394(3)	1.5131(64)	1000
26	127000	0.115141(10)	614(9)	1.509(11)	2500
31	360000	0.114786(8)	891(6)	1.5118(67)	2500
36	68388	0.114565(6)	1227(21)	1.517(16)	3000
41	150000	0.114419(4)	1630(18)	1.513(11)	4000
46	62500	0.114317(5)	2080(36)	1.511(17)	4000
51	40800	0.114243(3)	2635(57)	1.513(20)	5000

TAB. 3.2 – Nous présentons les informations extraites des simulations de la susceptibilité pour des conditions de bords libres. ”nbr. iter.” représente le nombre d'itérations indépendantes sur lesquelles sont réalisées les moyennes.

$N(z)$ (définie par l'expression (3.28)) en fonction de la taille pour un réseau hypercubique en dimension cinq. Le nombre de sites N_s qui ne sont pas dans le volume s'exprime comme :

$$N_s = L^d - (L-2)^d = 2C_d^1 L^{d-1}(1+\mathcal{O}(L^{-1})) = 2dL^{d-1}(1+\mathcal{O}(L^{-1}))\,. \quad (3.29)$$

Le pourcentage de sites qui ne sont pas dans le volume s'écrit :

$$N_s/L^d = \frac{2d}{L}(1+\mathcal{O}(L^{-1}))\,. \quad (3.30)$$

Pour avoir 1% de site qui n'appartiennent pas au volume, il faut un système de taille $L = 1000$ en dimension cinq. Avec les capacités informatiques qui sont à notre disposition, on peut effectuer une moyenne raisonnable jusqu'à des tailles $L \leq 60$ (à cinq dimensions, le record publié dans la littérature est établi par Stauffer pour une taille $L = 176$ [Stau00]). De manière à réduire les effets liés aux surfaces, nous avons mesuré la susceptibilité des sites de cœur du réseau. Nous avons choisi de conserver un sous-réseau dont la dimension L_c est une fraction de la longueur totale du réseau. Le sous-réseau contient $N_c = L_c^5$ sites. Nous illustrons le procédé par le schéma de la figure 3.9 pour un réseau bidimensionnel avec une fraction $L_c/L = 1/2$. La généralisation à un réseau à cinq dimensions est évidente. La susceptibilité $\chi(L, L_c)$ du sous réseau associé s'écrit en fonction de l'aimantation $M(L, L_c)$ selon :

$$\chi(L, L_c) = \frac{1}{N_c}\left(\langle M(L, L_c)^2\rangle - \langle M(L, L_c)^2\rangle\right)\,. \quad (3.31)$$

Dans un premier temps, on s'intéresse à la variation de la température pseudo-critique de $\chi(L, L_c)$ en fonction de L_c afin de déterminer s'il faut adapter la température de simulation en fonction de la fraction de sites de cœur. L'analyse pour la taille $L = 32$ est présentée en haut sur la figure 3.10. Nous avons tracé la susceptibilité en fonction de la température pour des sous-réseaux dont la taille L_c est une fraction de la longueur

totale du système. De façon à observer plus clairement le décalage en température par rapport au système complet, nous avons normé la susceptibilité par l'amplitude maximale χ_{max}. Le décalage en température est nul aux barres d'erreur près pour toutes les fractions envisagées. Cette information nous permet de réaliser les simulations à la même température. Mais cette méthode ne permet pas de réduire les corrections d'échelle liées au décalage en température $|T_c - T_c(L)|$.
Dans un second temps, nous analysons l'évolution du maximum de la susceptibilité en fonction de la fraction L_c/L. Nous illustrons dans un premier temps le comportement pour la taille particulière $L = 32$ en bas sur la figure 3.10. Le premier point à droite de la courbe correspond au maximum de la susceptibilité pour le réseau entier. La valeur du maximum atteint un pic avant de diminuer. Ce comportement non monotone peut s'interpréter à l'aide du théorème fluctuation-dissipation (1.40) $\chi = \frac{\beta}{V} \int d^d\vec{x} d^d\vec{y} G(\vec{x} - \vec{y})$. Puisque les spins proches des bords libres sont liés à moins de voisins, ils fluctuent plus librement et sont moins corrélés que les sites de volumes. Ainsi, ils contribuent moins en moyenne à la susceptibilité. Dans un second temps, nous traçons sur la figure 3.11 le maximum de la susceptibilité normé par $L^{2.5}$ (en haut) et par L^2 (en bas) en fonction de la fraction L_c/L pour différentes tailles. Dans la figure du haut, on constate pour les plus grandes tailles (en particulier dans l'insert) une superposition aux barres d'erreurs près avec une normation de l'axe des ordonnées par $L^{2.5}$. Cette superposition intervient pour des fractions intermédiaires comprises entre $L/L_c = 0.125$ et $L/L_c = 0.75$. On ne constate aucune superposition sur la figure du bas lors l'axe des ordonnées est normé par L^2. Il existe juste une accumulation pour des valeur petites de L/L_c. Nous obtenons donc une première évidence d'un exposant 2.5 menant à $\chi \sim L^{2.5}$ aux barres d'erreur près pour les conditions de bords libres, confirmant la relation (3.7) pour les spins du volume.
On se propose maintenant d'analyser plus précisément la fraction particulière $L_c/L = 1/2$. Cette valeur permet de se placer suffisamment loin des bords tout en conservant un nombre raisonnable de sites. La susceptibilité est représentée sur la figure 3.12. Nous traçons sur la figure 3.13 le maximum de ces courbes en fonction de L (en haut) ainsi que l'exposant effectif associé obtenu par interpolation algébrique en faisant varier la borne inférieure L_{min} de l'intervalle d'interpolation de façon à observer la convergence vers le régime asymptotique (en bas). Sur la figure du haut, le maximum de la susceptibilité en fonction de L est bien décrit pour les plus grandes tailles par la relation $\chi_{max} \sim L^{2.5}$ aux barres d'erreur près tandis que le comportement normal $\chi_{max} \sim L^2$ est clairement exclus. Sur la figure du bas, l'exposant effectif tend linéairement vers la valeur $2.48(10)$ lorsque la taille tend vers l'infini. Les différentes informations concernant ces simulations sont réunies dans la table 3.3.

Pour conclure, rappelons que dans un premier temps, un calcul avec tous les sites du réseau nous a permis de montrer des corrections importantes dues aux surfaces pour les conditions de bords libres. Cependant, le maximum de la susceptibilité croît plus rapidement que le comportement normal qui est exclu. De plus, le cumulant de Binder est en bon accord pour les deux types de conditions de bords. Dans un second temps, un calcul avec des réseaux de cœur qui contiennent uniquement des sites de volume permet de mettre en évidence le comportement anormal $\chi_{max} \sim L^{2.5}$. Cependant, le décalage de la température pseudo-critique montre des évidences d'un comportement normal. Ce

L	nbr. iter.	$T_c(L)$ utilisée	$\chi_{max}^{cœur}(L)$	τ utilisé
8	11250000	0.12542	14.83(2)	200
12	2062500	0.11393	44.1(1)	400
16	875000	0.11703	93.8(4)	2000
20	250000	0.11595	167(3)	1000
24	125000	0.11534	265(3)	2000
28	125000	0.11496	396(5)	2000
32	87500	0.11473	552(8)	4000
36	83400	0.11456	748(11)	3000
40	30000	0.11444	967(27)	5000

TAB. 3.3 – Nous présentons les informations au sujet des simulations de la corrélation pour FBC lors du calcul où nous conservons uniquement les sites de cœur. ”nbr. iter.” représente le nombre d’itérations indépendantes sur lesquelles sont réalisées les moyennes.

chapitre présente des résultats préliminaires qui nécessitent davantage d’investigations. Nous étudions actuellement les effets de taille fini de la fonction de corrélation.

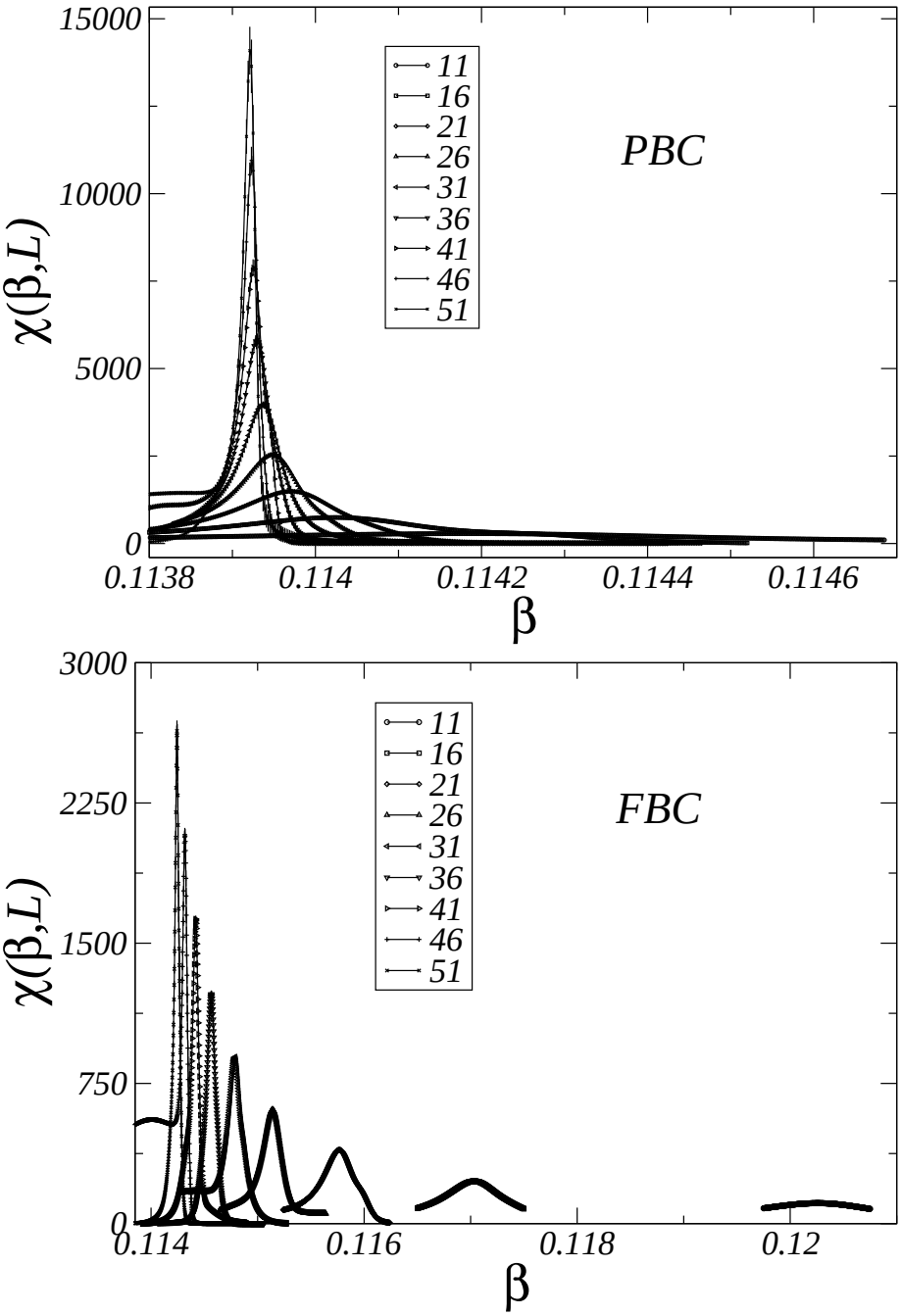


FIG. 3.2 – La susceptibilité du modèle d'Ising à cinq dimensions est tracée en fonction de β pour différentes tailles de système. Les tailles varient de $L = 11$ à $L = 51$ par pas de 5 de droite à gauche. Les résultats sont obtenus pour des conditions de bords périodiques (en haut) et libres (en bas). Les simulations sont effectuées au point pseudo-critique (aux barres d'erreur près) et les points adjacents sont obtenus par repondération de l'histogramme. La repondération n'est plus valable lorsqu'on s'éloigne trop de la température de simulation, ce qui explique les formes incohérentes aux extrémités des courbes.

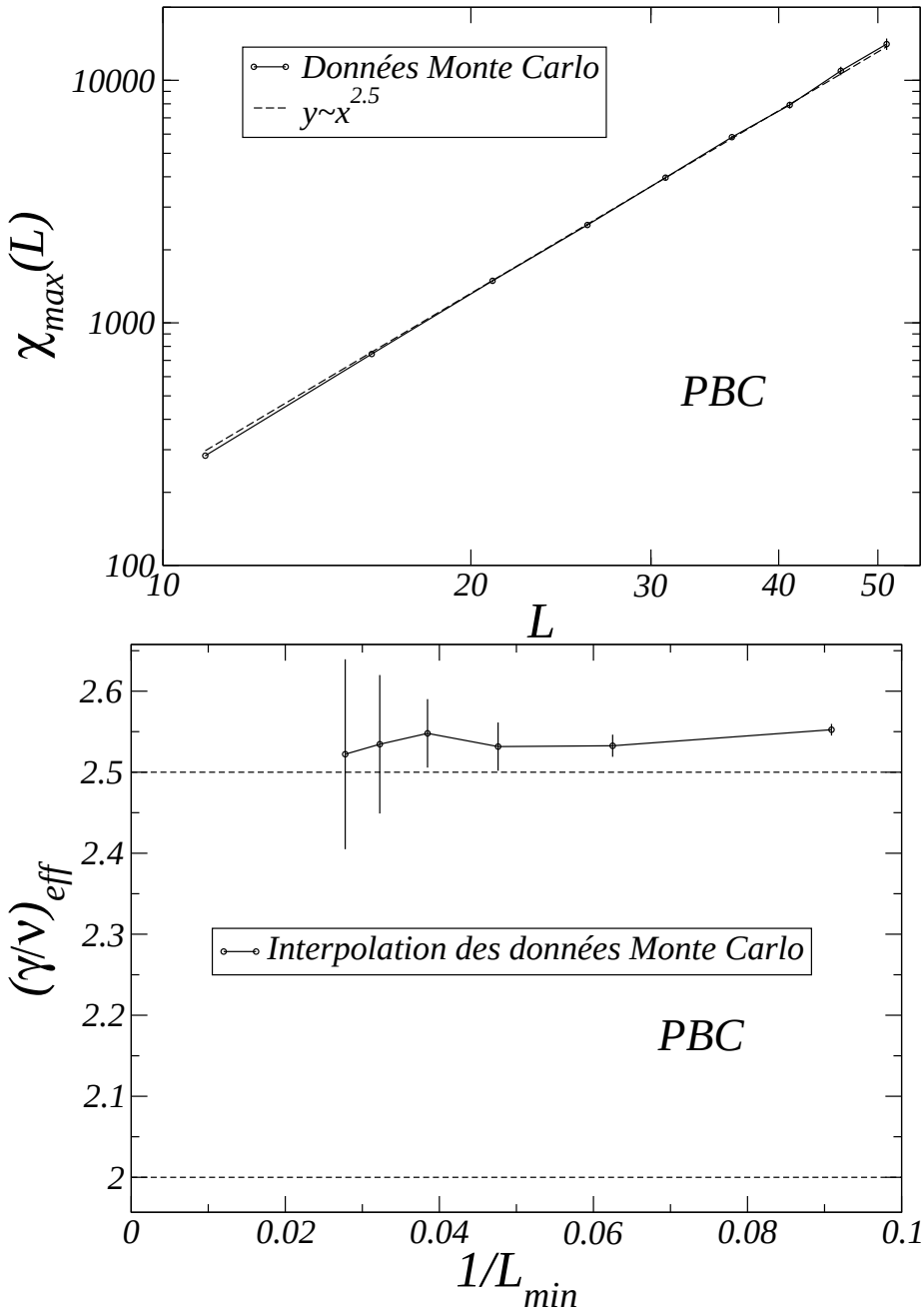


FIG. 3.3 – En haut, le maximum de la susceptibilité est tracé en fonction de la taille du système pour des conditions de bords périodiques. Les données se comportent bien suivant l'expression (3.7) aux barres d'erreur près à partir de la taille $L = 21$. En bas, nous avons interpolé l'exposant de la courbe du haut en faisant varier la borne inférieure L_{min} de l'intervalle d'interpolation de façon à observer la convergence pour les grandes tailles. Les résultats sont tracés en fonction de $1/L_{min}$ de telle sorte que la valeur asymptotique se lit à gauche de la figure. À partir de $L = 21$, les données sont compatibles avec la valeur attendue $d/2 = 2.5$.

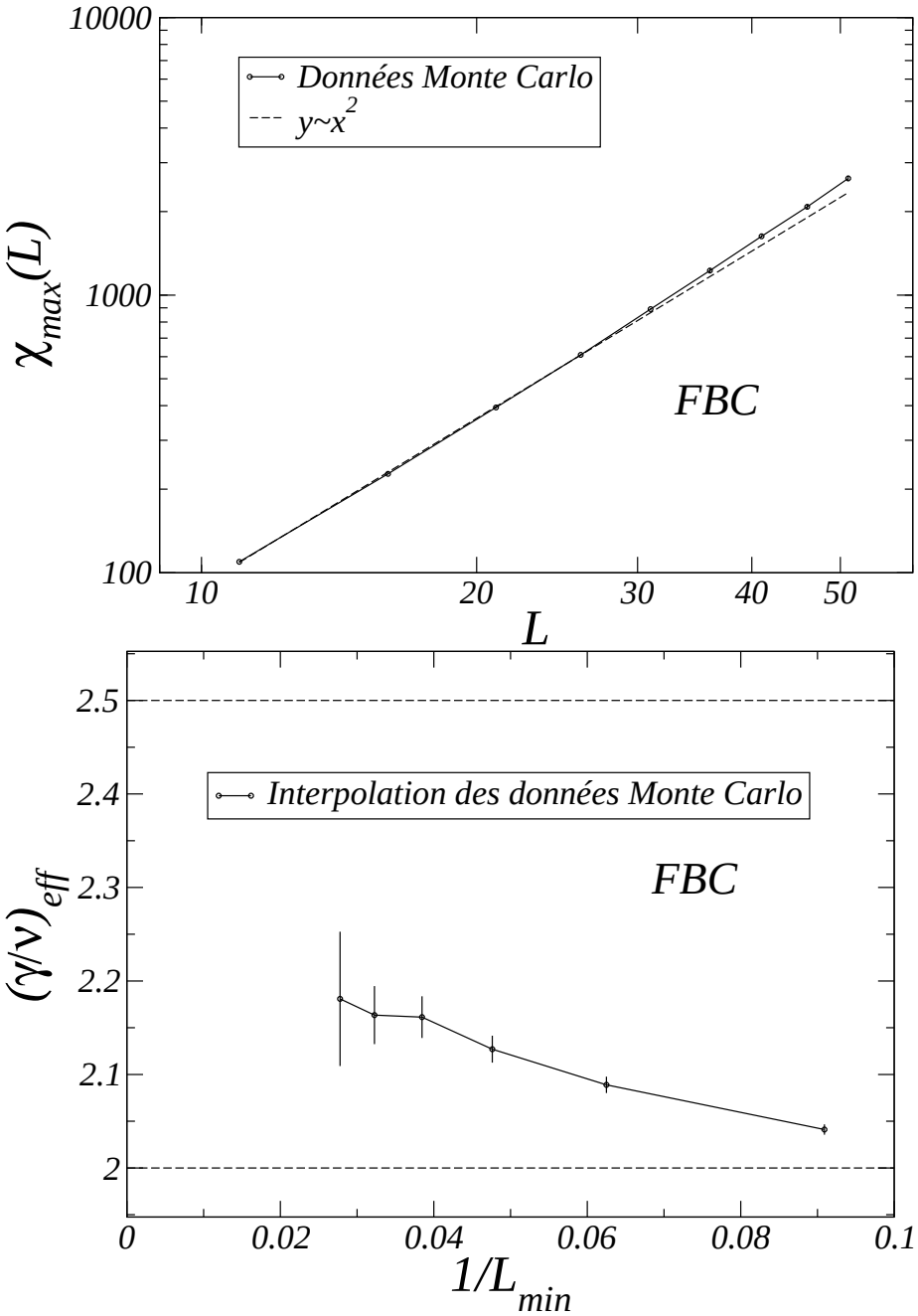


FIG. 3.4 – En haut, le maximum de la susceptibilité est tracé en fonction de la taille du système pour des conditions de bords libres. Les données se comportent dans un premier temps selon l'expression $\chi_{max}(L) \sim L^2$ puis elles dévient de façon significative à partir de $L = 31$. En bas, nous avons interpolé l'exposant de la courbe du haut en faisant varier la borne inférieure L_{min} de l'intervalle d'interpolation de façon à observer la convergence pour les grandes tailles. Les résultats sont tracés en fonction de $1/L_{min}$ de telle sorte que la valeur asymptotique se lit à gauche de la figure. Les données ne sont pas suffisamment précises pour extrapoler un exposant 2.5. Cependant, la valeur 2 est clairement exclue.

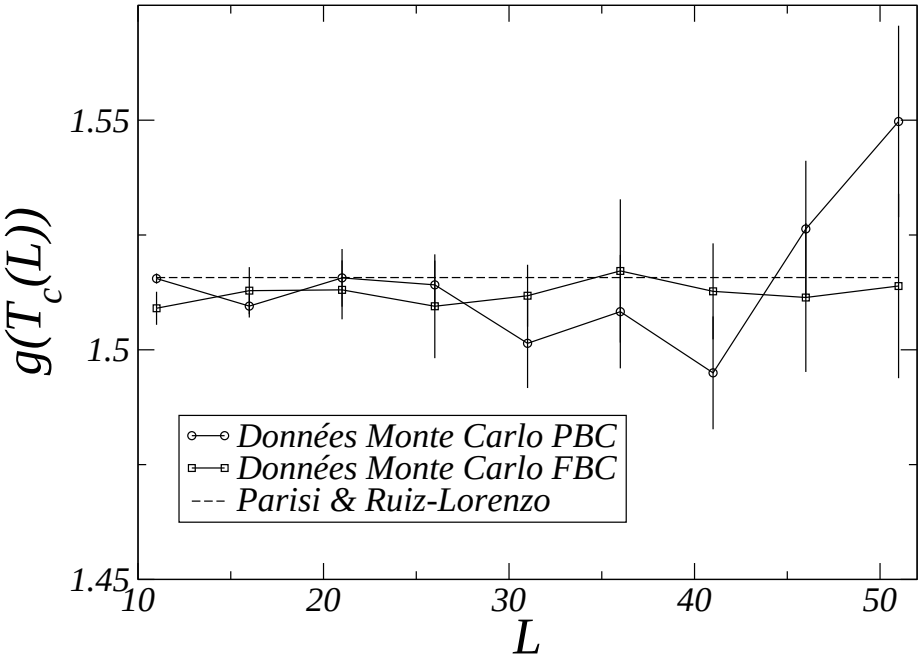


FIG. 3.5 – Le cumulant de Binder au point pseudo-critique pour les deux types de conditions de bords est tracé en fonction de la taille. Nos données numériques sont en bon accord avec l'estimation de Parisi et Ruiz-Lorenzo tracée en pointillés [Pari96].

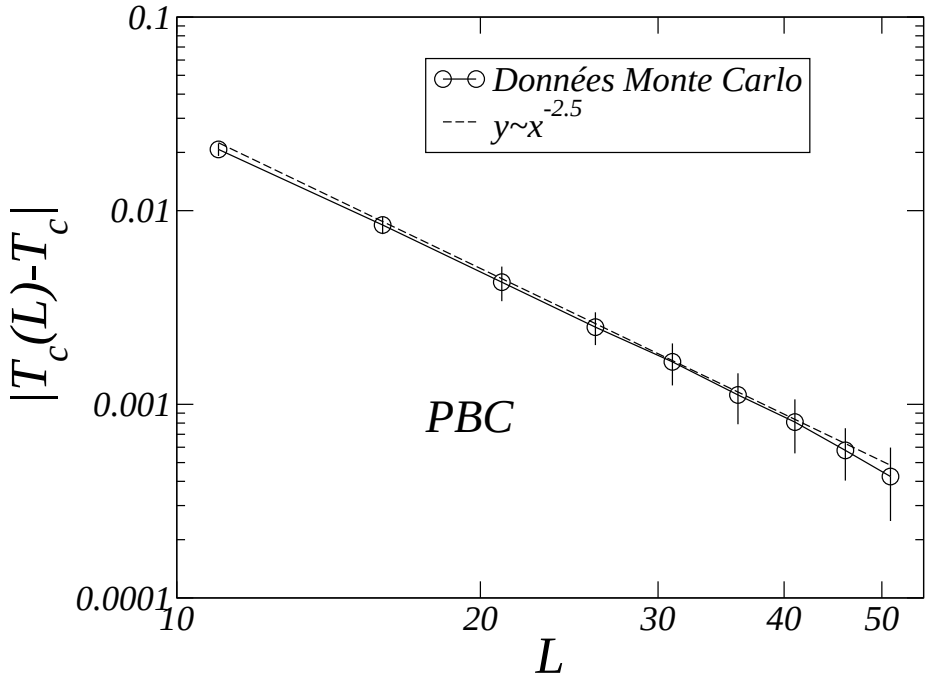


FIG. 3.6 – Le décalage de la température pseudo-critique de la susceptibilité est tracé en fonction de la taille du système pour des conditions de bords périodiques. Les données se comportent comme l'expression (3.11) aux barres d'erreur près pour des tailles suffisamment grandes. Les barres d'erreur sont trop importantes pour obtenir une interpolation de l'exposant raisonnable.

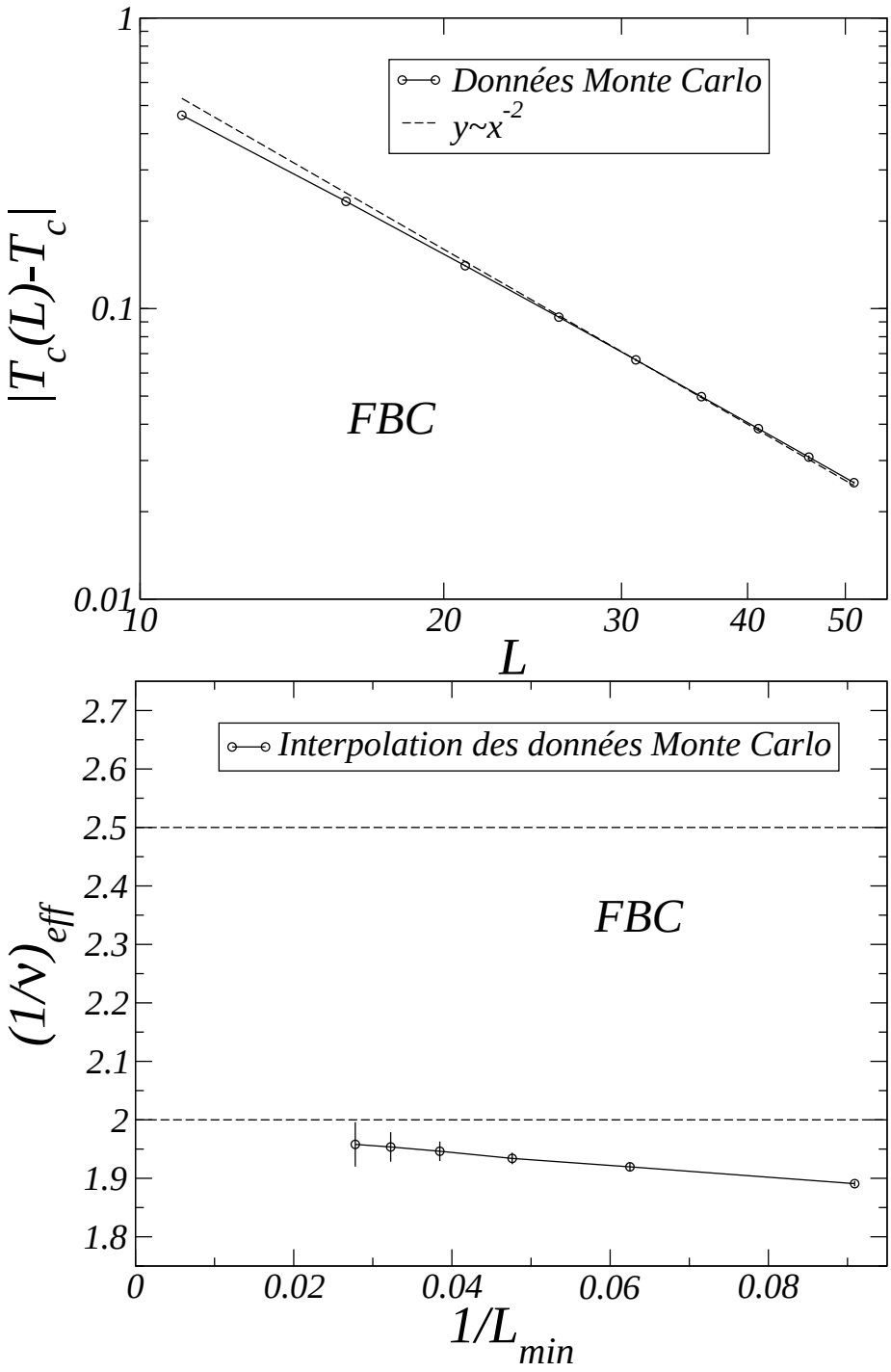


FIG. 3.7 – En haut, le décalage de la température pseudo-critique de la susceptibilité est tracé en fonction de la taille du système pour des conditions de bords libres. En bas, nous avons interpolé l'exposant de la courbe du haut en faisant varier la borne inférieure L_{min} de l'interpolation afin d'observer la convergence pour les grandes tailles. Les résultats sont tracés en fonction de $1/L_{min}$ de telle sorte que la valeur asymptotique se lit à gauche de la figure. L'exposant effectif se dirige vers la valeur classique 2 et pas vers l'exposant 2.5. On constate que les barres d'erreur sont moins importantes que pour les conditions de bords périodiques présentés sur la figure 3.6. Puisque les effets de taille finie sont plus importants, la température pseudo-critique est plus éloignée de la valeur dans la limite thermodynamique et les erreurs relatives sont moins importantes.

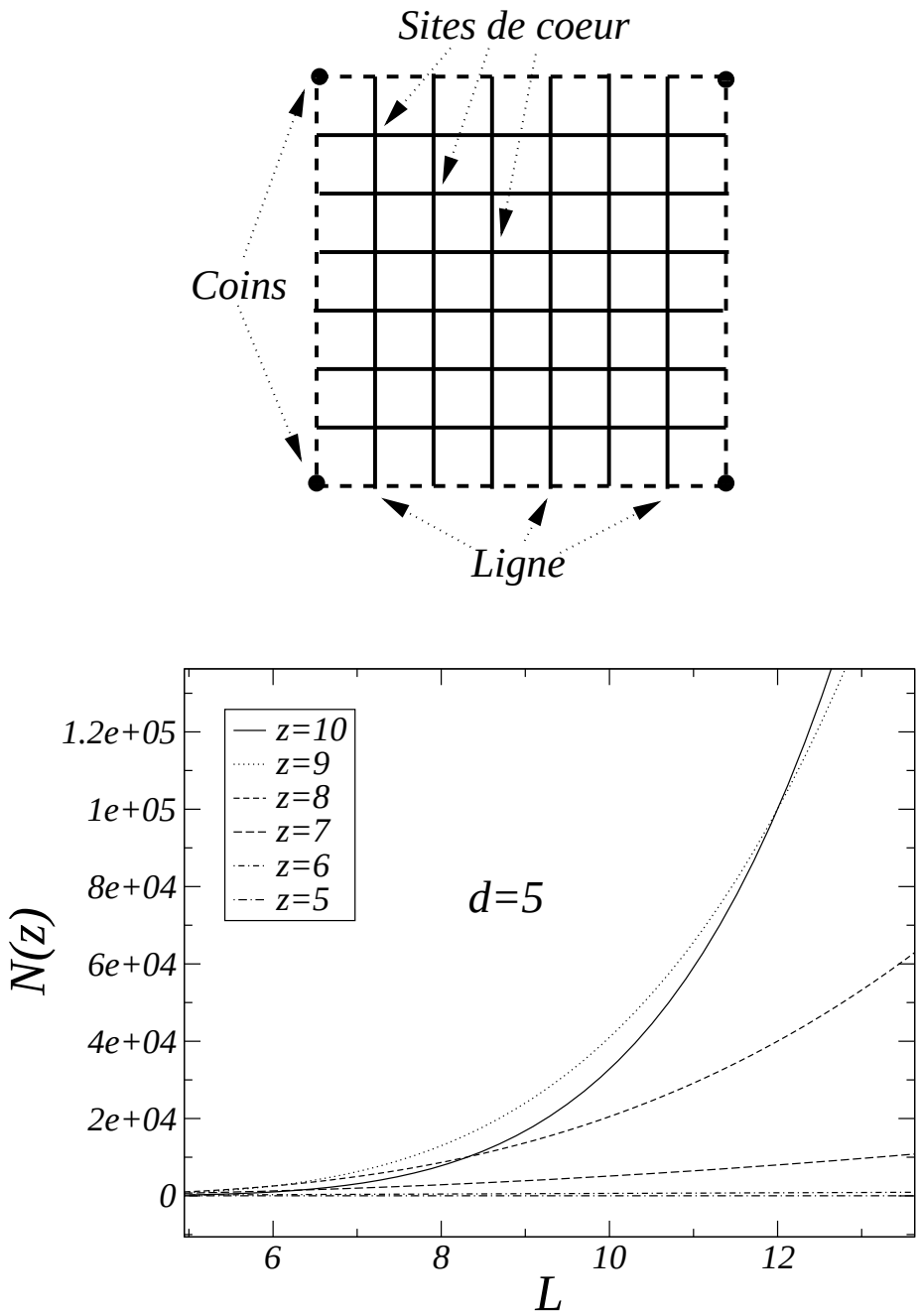


FIG. 3.8 – En haut, illustration de la coordinence en fonction de la position sur le réseau carré bidimensionnel. Le système présente des sites de cœurs de coordinence $z = 4$, sur les bords la coordinence est $z = 3$ et sur les coins la coordinence est $z = 2$. En bas, le nombre de spins de coordinence z est tracé en fonction de la taille du système pour le modèle d'Ising $5d$ avec des conditions de bords libres. À partir de la taille $L = 12$ (qui représente déjà un réseau de $12^5 = 248832$ sites) le système commence seulement à avoir des spins majoritaires de volume avec une coordinence $z = 10$.

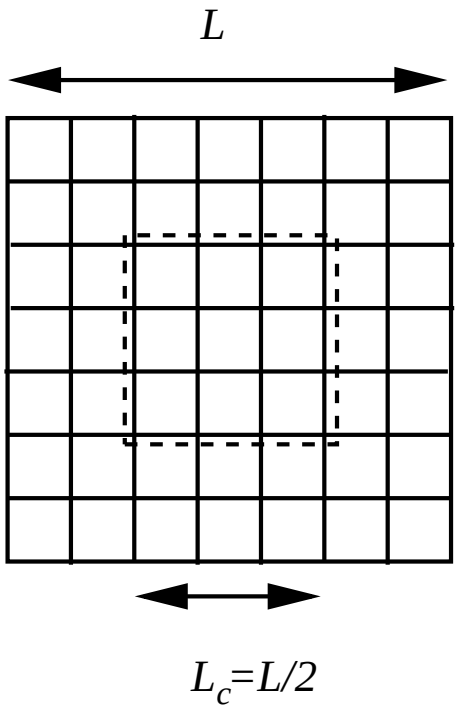


FIG. 3.9 – Le carré en pointillés est un sous-réseau de cœur dont la taille L_c est une fraction de la longueur totale du réseau. Nous avons représenté le cas particulier $L_c = L/2$. La généralisation de la procédure pour un réseau à cinq dimensions est évidente.

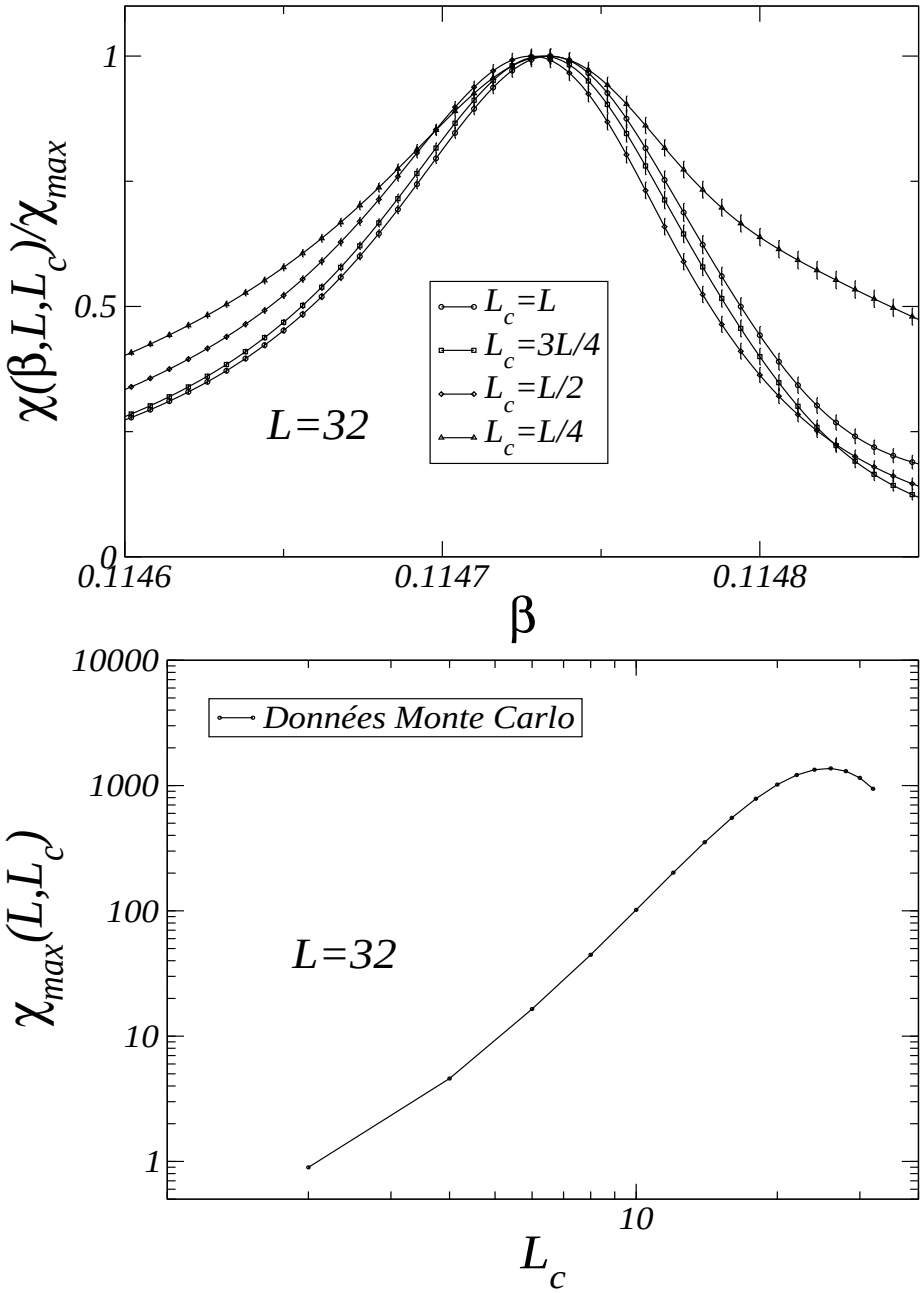


FIG. 3.10 – En haut, la susceptibilité du modèle d'Ising en dimension cinq avec conditions de bords libres pour une taille $L = 32$ est tracée en fonction de la température inverse. Nous avons considéré différents réseaux de cœur dont la taille L_c correspond à une fraction de la longueur du cœur par rapport au système. Pour chaque sous-réseau, la susceptibilité est normée par la valeur maximale χ_{max} de façon à observer plus facilement le décalage en température par rapport au système complet qui est nul aux barres d'erreur près. En bas, nous avons tracé toujours pour la la taille $L = 32$ l'évolution du maximum de la susceptibilité en fonction de la taille L_c du réseau de cœur qui permet de constater un comportement qui n'est pas monotone.

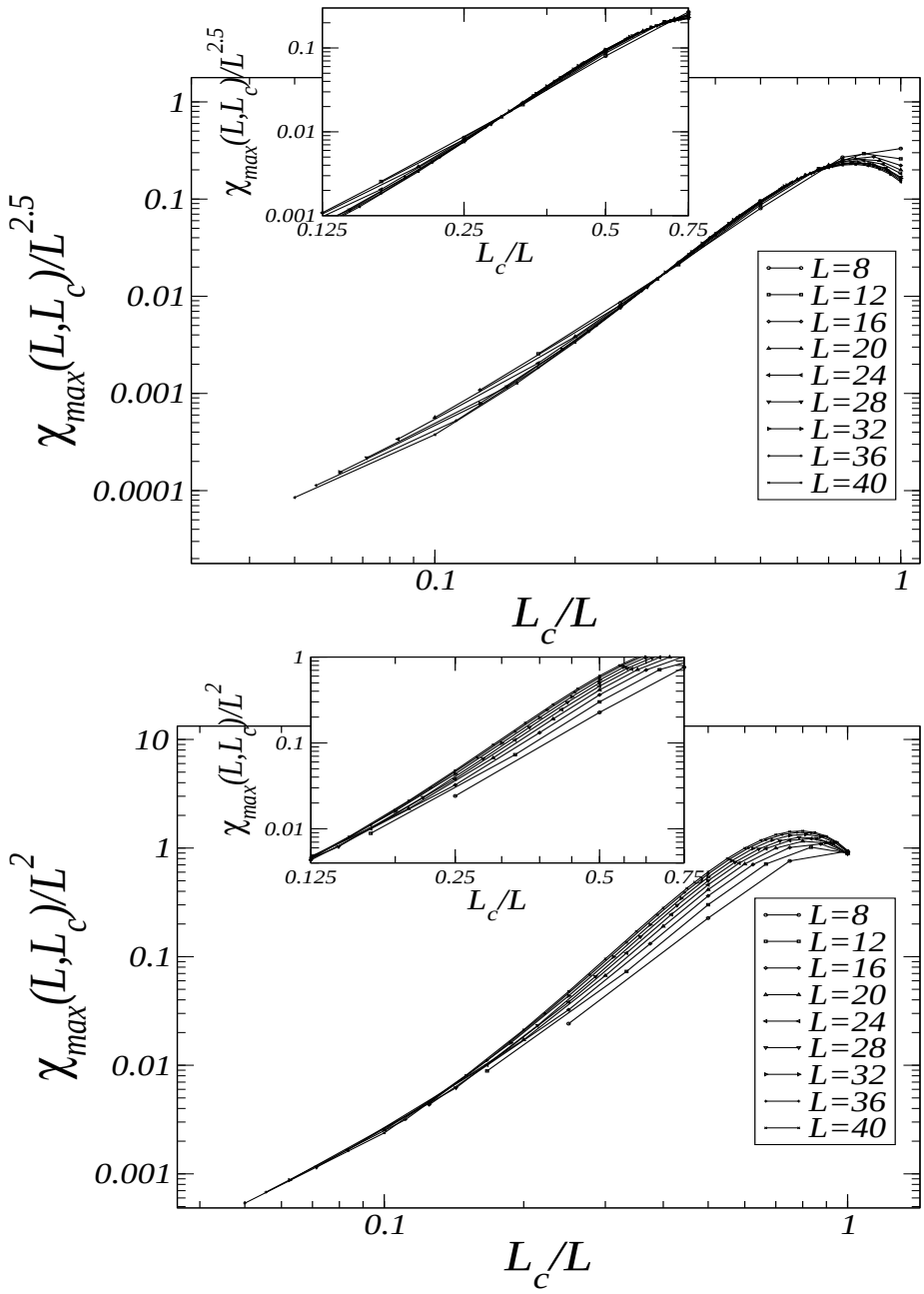


FIG. 3.11 – Le maximum de la susceptibilité normé par $L^{2.5}$ (en haut) et par L^2 (en bas) est tracé en fonction de la fraction L_c/L pour différentes tailles. On constate dans l'insert une superposition des courbes avec les grandes tailles pour des valeurs intermédiaires de fractions (entre $L/L_c = 0.125$ et $L/L_c = 0.75$) confirmant la relation (3.7) pour les spins du volume.

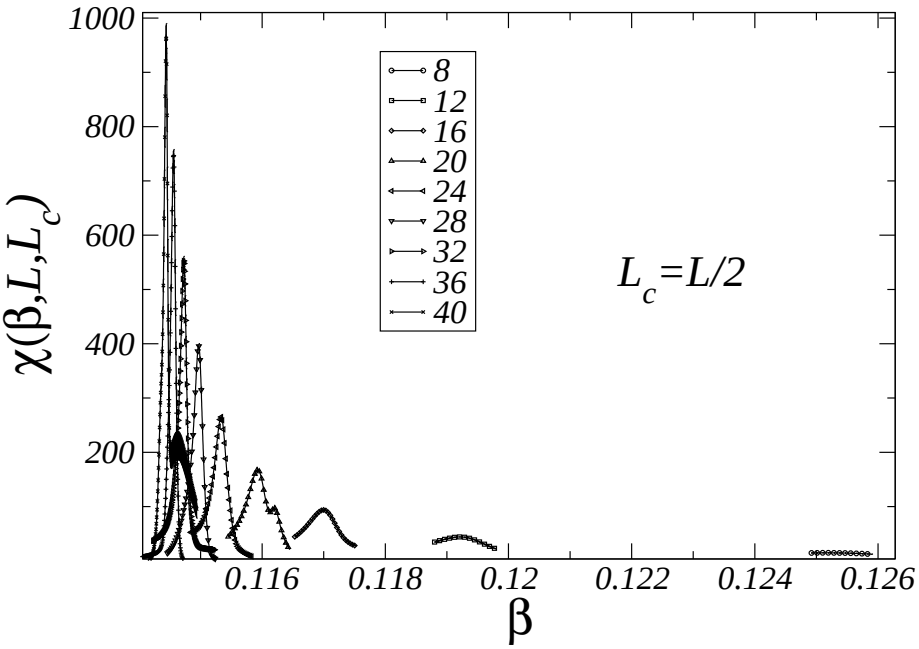


FIG. 3.12 – La susceptibilité du modèle d'Ising à cinq dimensions est tracée en fonction de β pour différentes tailles de système pour les conditions de bords libres lorsque $L_c = L/2$. Les tailles varient de $L = 8$ à $L = 40$ par pas de 4 de droite à gauche. Les calculs sont effectués au point pseudo-critique et les points adjacents sont obtenus par repondération de l'histogramme. Les formes incohérentes en fin d'histogramme (un deuxième pic pour les tailles $L = 20$ et $L = 40$ par exemple) signifient que la repondération est effectuée trop loin de la température de simulation.

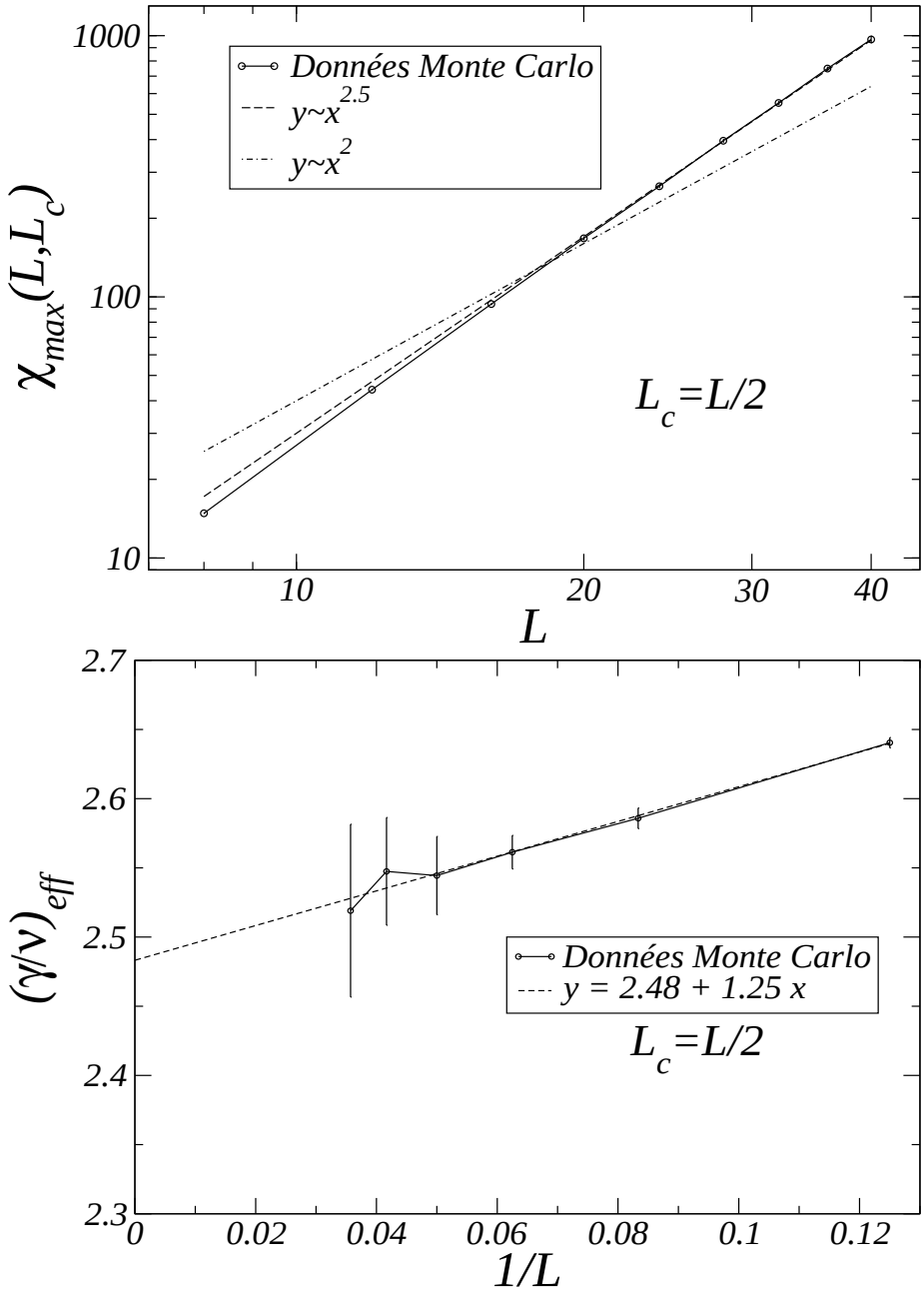


FIG. 3.13 – En haut, le maximum de la susceptibilité (obtenu à partir de la figure 3.12) est tracé en fonction de $L = 2L_c$. Les points correspondant aux plus grandes tailles sont bien décrits par la relation $\chi_{max} \sim L^{2.5}$ aux barres d'erreur près. La description par le comportement normal $\chi_{max} \sim L^2$ est nettement incompatible avec les donnés numériques. En bas, l'exposant effectif obtenu par interpolation algébrique de la courbe du haut est tracé en fonction de l'inverse de la borne inférieure L_{min} de l'intervalle d'interpolation. Les points sont bien décrits par une relation linéaire qui tend vers la valeur $2.48(10)$.

Deuxième partie

Vieillissement de systèmes de spins $2d$ complètement frustrés

Chapitre 4

Phénomènes critiques hors équilibre

Le but de ce chapitre est de présenter une introduction au phénomène de vieillissement. Dans un premier temps, on caractérise le vieillissement, puis on présente une théorie d'échelle phénomènologique qui permet de reproduire le comportement aux temps longs des grandeurs à deux temps. Enfin, on détaille les résultats connus pour certains modèles paradigmatiques sur réseau.

4.1 Phénoménologie

4.1.1 Brisure de l'invariance par translation temporelle

L'un des postulats de la physique statistique à l'équilibre est l'hypothèse ergodique : il est possible de remplacer les moyennes dans l'espace des configurations par une moyenne temporelle sur un temps suffisant pour que le système visite chaque état de l'espace des configurations un grand nombre de fois. Les grandeurs thermodynamiques fluctuent temporellement autour d'une valeur moyenne. Les grandeurs $G(t, s)$ qui sont des fonctions à deux temps t et s ($s < t$) dépendent uniquement de la différence $t - s$ car le système est invariant par translation temporelle.
Cependant, lorsque le temps de relaxation excède les temps expérimentaux accessibles, l'hypothèse ergodique n'est plus vérifiée comme par exemple après une modification rapide des paramètres extérieurs. Le système évolue hors de l'équilibre. Parmi ces situations hors équilibre, il existe une catégorie qui présente des caractéristiques universelles : les systèmes vieillissants. On rencontre des systèmes vieillissants expérimentaux parmi les liquides qui donnent lieu à une transition vitreuse comme certains polymères [Stru78], les verres structuraux [Ange95], les verres de spins (voir [Vinc07] pour une revue récente sur les verres de spins), les gels colloïdaux [Cipe00]. Du vieillissement se manifeste aussi dans des modèles ferromagnétiques simples comme le modèle d'Ising bidimensionnel lors d'une trempe dans la phase basse température ou à la température critique. L'étude des quantités à un temps ne permet pas de caractériser au mieux ce

régime car leur décroissance est très lente et le système apparaît presque à l'équilibre. Les quantités à deux temps manifestent plus fortement l'entrée dans le régime hors de l'équilibre car elles présentent notamment une brisure de l'invariance par translation temporelle *i.e.* $G(t,s) \neq G(t-s)$. Les fonctions à deux temps d'un système vieillissant dépendent simultanément des temps t et s. Le temps s est appelé temps d'attente. Plus le temps d'attente est grand, plus le système relaxe lentement. Ce phénomène est illustré sur les figures 4.1, 4.2, 4.3 et 4.4. On remarque que pour des valeurs de $t-s$ suffisamment faibles, les courbes se superposent indiquant l'existence d'un pré-régime de quasi-équilibre avant le régime de vieillissement. Il est cependant possible de décrire toutes ces fonctions par des courbes universelles à partir d'une hypothèse d'échelle.

4.1.2 Cinétique de domaines

L'une des caractéristiques d'un système vieillissant est l'existence d'un régime d'échelle où il est possible de définir des fonctions universelles pour des âges différents. On parle aussi de régime de vieillissement. Ce régime est obtenu dans la limite s puis $t \to \infty$ (les limites ne commutent pas). On obtient des fonctions universelles en fonction des temps d'attente pour les expériences présentées sur la figure 4.1 en divisant le temps de mesure par un temps caractéristique qui est une fonction du temps d'attente. Les résultats sont présentés sur la figure 4.5. En haut, la variable $t-s$ est divisée par un temps caractéristique fonction du temps d'attente $\tau(s) \sim s$ qui permet une superposition des courbes. On remarque de plus qu'une normation appropriée de la réponse intégrée permet d'obtenir une fonction universelle pour les différents matériaux présentés dans la légende. En bas, dans l'insert, on constate aussi la superposition du facteur de structure pour les différents temps d'attente lorsqu'on divise le temps $t-s$ par un temps caractéristique $\tau(s)$. Dans la figure principale, ce temps caractéristique est tracé en fonction du temps d'attente. La dépendance asymptotique est algébrique avec un exposant proche de un également. Les courbes de la figure 4.2 obtenues par dynamique moléculaire peuvent également se superposer en utilisant la variable d'échelle $(t-s)/\tau(s)$ comme on le constate en haut sur la figure 4.6. La dépendance du temps caractéristique $\tau(s)$ en fontion de s est tracée en bas sur la figure 4.6.

On peut comprendre le phénomène dans le cas des ferromagnétiques préparés dans un état initial désordonné puis trempé dans la phase basse température ou au point critique. Dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel, on observe alors la croissance de domaines ordonnés de taille caractéristique $L(t)$. Dans la limite d'une taille infinie, le système ne s'équilibre pas et demeure hors de l'équilibre indéfiniment. Bien entendu, un système fini s'équilibre après un temps suffisamment grand lorsque la taille des domaines est comparable à la taille du système. On constate deux comportements différents pour une trempe sous-critique et une trempe critique. Le phénomène de croissance de domaines est illustré sur la figure 4.7 pour une trempe à la température $T_c/2$. On peut déterminer la croissance de la taille des domaines en fonction du temps [Bray94] :

$$L(t) \sim t^{1/z}\,, \tag{4.1}$$

où z est l'exposant dynamique dans la phase basse température dont la valeur est $z = 2$ [Bray94]. Lorsqu'on réalise une trempe à la température critique, on ne peut plus

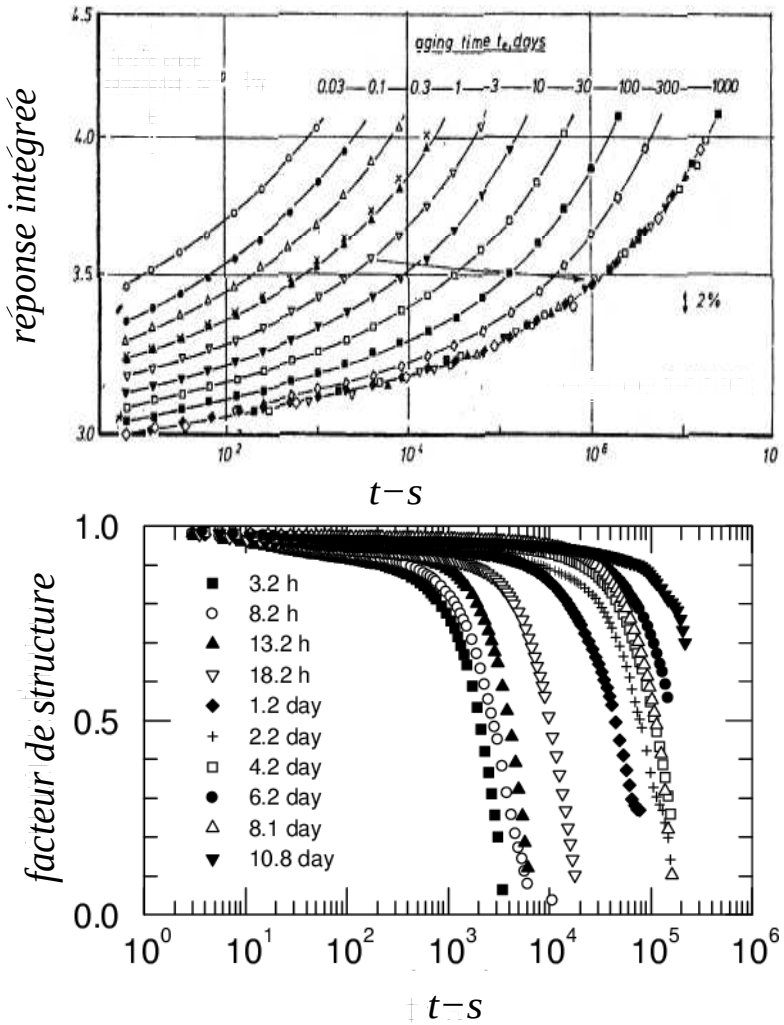


FIG. 4.1 – En haut, la réponse mécanique intégrée du PVC est mesurée après une trempe (d'après les travaux de Struik [Stru78]). En bas, le facteur de structure d'un gel colloïdal est mesuré après avoir amené le système hors de l'équilibre par protocole chimique (d'après les travaux de Cipelletti *et al* [Cipe00]). Les données sont tracées en fonction de la différence $t - s$ pour différents temps d'attente s écoulés après l'entrée des systèmes dans un régime hors de l'équilibre. Les courbes ne se superposent pas, ce qui indique une brisure de l'invariance par translation temporelle. De plus, la relaxation est d'autant plus lente que l'âge s est élevé : le système vieillit.

parler de domaines ordonnés mais de domaines corrélés ou autosimilaires dont la taille $L(t)$ peut être assimilée à la longueur de corrélation $\xi(t) \sim L(t)$. La croissance de ces

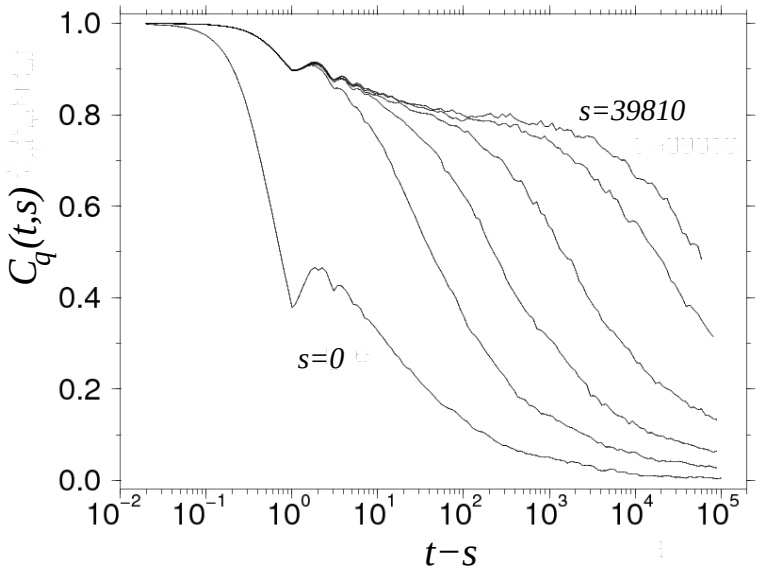


FIG. 4.2 – Le facteur de structure d'un liquide vitreux est obtenu après une trempe par dynamique moléculaire. Les données sont tracées en fonction de $t - s$ pour différents temps d'attente $s = 0$, 10, 100, 1000 et 39810 (de gauche à droite). La trempe est effectuée entre les températures $T_i = 5$ et $T_f = 0.4$ et le vecteur d'onde est $q = 7.2$ (d'après les travaux de Kob et Barrat [Kob97]).

domaines est illustrée sur la figure 4.8. La longeur de corrélation croît comme :

$$\xi(t) \sim t^{1/z_c}\,, \tag{4.2}$$

où z_c est l'exposant dynamique critique qui vaut $z_c = 2.1667(5)$ [Nigh96]. Notons que le modèle d'Ising présente également du vieillissement en partant de l'état fondamental et en trempant le système à la température critique [Cala06].
À partir de ces deux protocoles, on s'aperçoit que la croissance de la longueur caractéristique ne dépend que de l'exposant dynamique z qui est un exposant universel déterminé par le point fixe vers lequel se dirige le système par itération du groupe de renormalisation à la température de trempe finale [Bray94]. Il existe une seule longueur caractéristique dans le système. Nous avons eu un premier aperçu de la portée de cette hypothèse qui permet de justifier les fonctions d'échelle indépendantes de l'âge du système dans les exemples présentés sur les figures 4.5 et 4.6. Nous allons dans la suite considérer plus en détail le comportement de ces fonctions d'échelle pour les modèles statistiques simples tel que le modèle d'Ising.

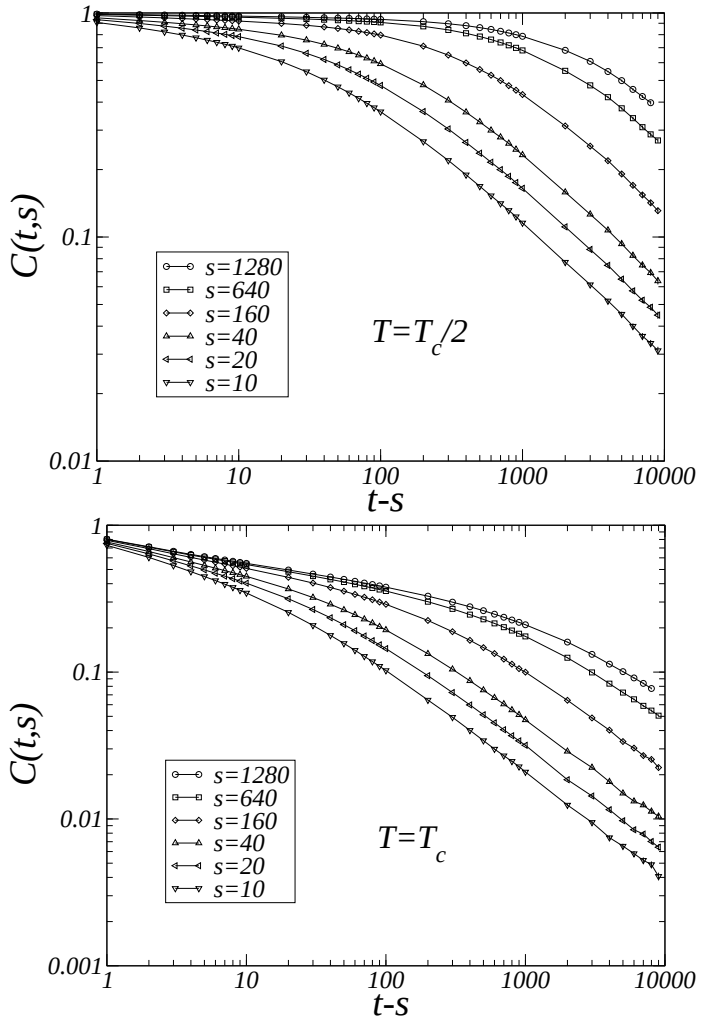


FIG. 4.3 – L'autocorrélation spin-spin du modèle d'Ising est obtenue après une trempe à la température $T_c/2$ (en haut) et à la température critique T_c (en bas) en partant d'un état initial désordonné. Les données sont tracées en fonction de $t - s$. Après un régime de quasi-équilibre, les courbes se séparent ce qui met en évidence la brisure de l'invariance par translation temporelle. Les données sont obtenues par simulation Monte Carlo avec un système de taille 192×192. Pour la trempe critique, le temps final est $t_f = 20000$ et les moyennes sont effectuées sur 2000 histoires thermiques alors que pour la trempe critique, le temps final est $t_f = 10000$ et les moyennes sont effectuées sur 5000 histoires thermiques.

4.2 Théorie d'échelle des fonctions à deux temps

Nous présentons dans cette section les différentes fonctions d'échelle que nous serons amenés à utiliser par la suite. Le modèle d'Ising sert une fois encore de support

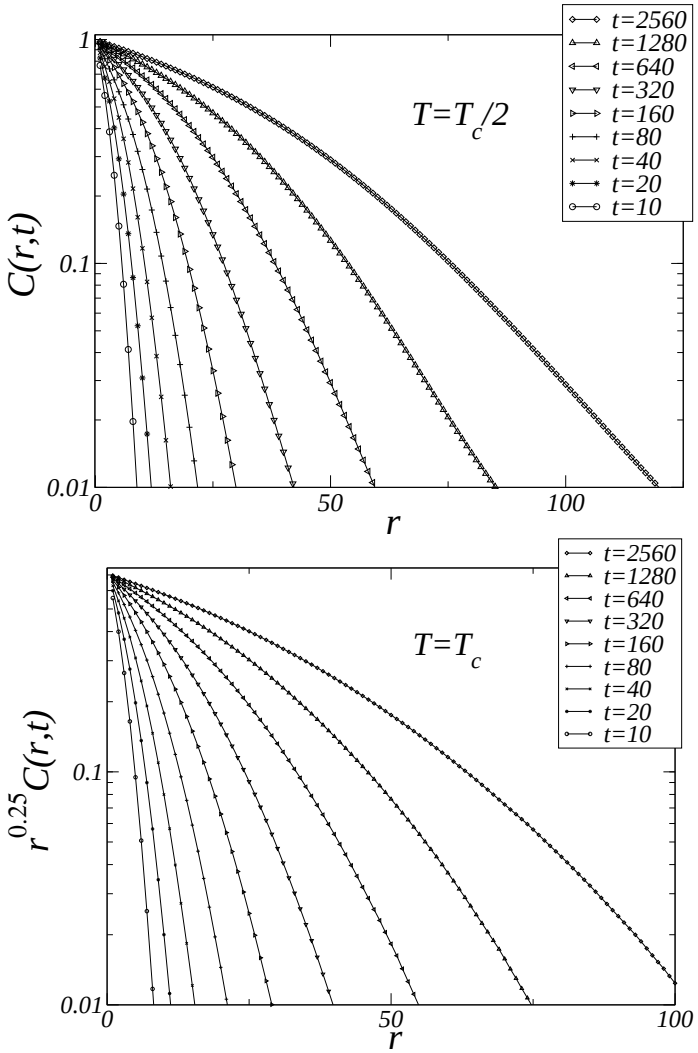


FIG. 4.4 – La fonction de corrélation spatiale spin-spin à temps égaux du modèle d'Ising est tracée pour une trempe par dynamique de Glauber depuis un état désordonné jusque dans la phase basse température ($T_c/2$) (en haut) et jusqu'au point critique (en bas). Les données sont tracées pour différents temps écoulés depuis la trempe. Les courbes ne se superposent pas. Pour les deux températures, nous avons utilisé des réseaux carrés de taille 400×400 et les moyennes sont réalisées sur 2000 histoires thermiques.

à cette présentation.

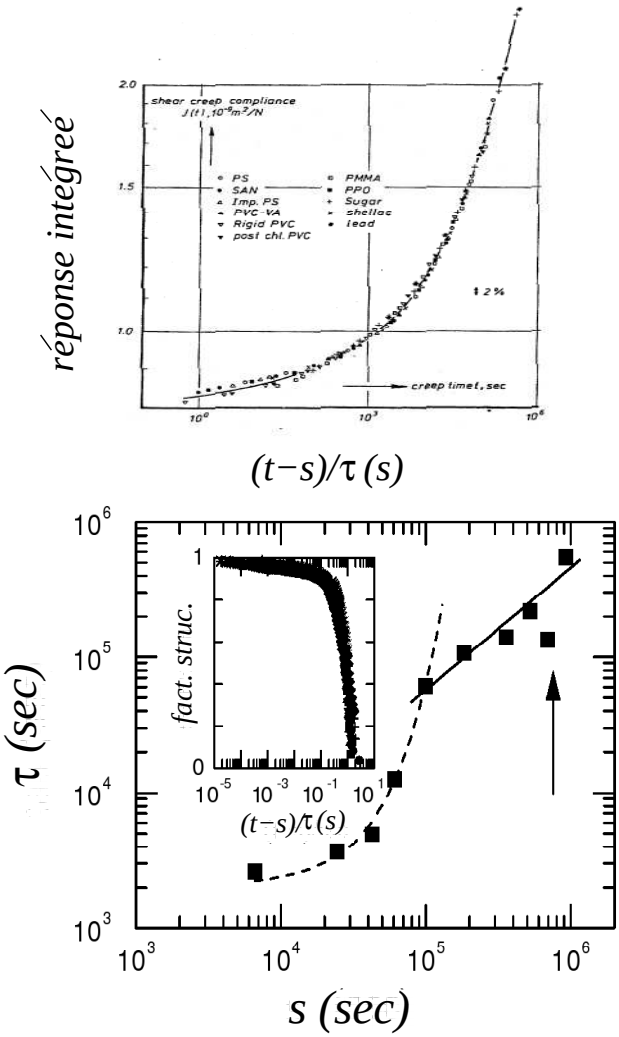


FIG. 4.5 – Il est possible de décrire les données de la figure 4.1 par des courbes universelles en utilisant la variable d'échelle $(t-s)/\tau(s)$ où $\tau(s)$ est un temps caractéristique fonction du temps d'attente selon $\tau(s) \approx s$ pour les deux exemples présentés. En haut, une normation appropriée de la réponse intégrée permet en plus de superposer les courbes pour différents matériaux (d'après les travaux de Struik [Stru78]). En bas, la fonction d'échelle du facteur de structure est tracée dans l'insert et la dépendance du temps caractéristique $\tau(s)$ en fonction de s est tracée dans la figure principale (d'après les travaux de Cipelletti *et al* [Cipe00]).

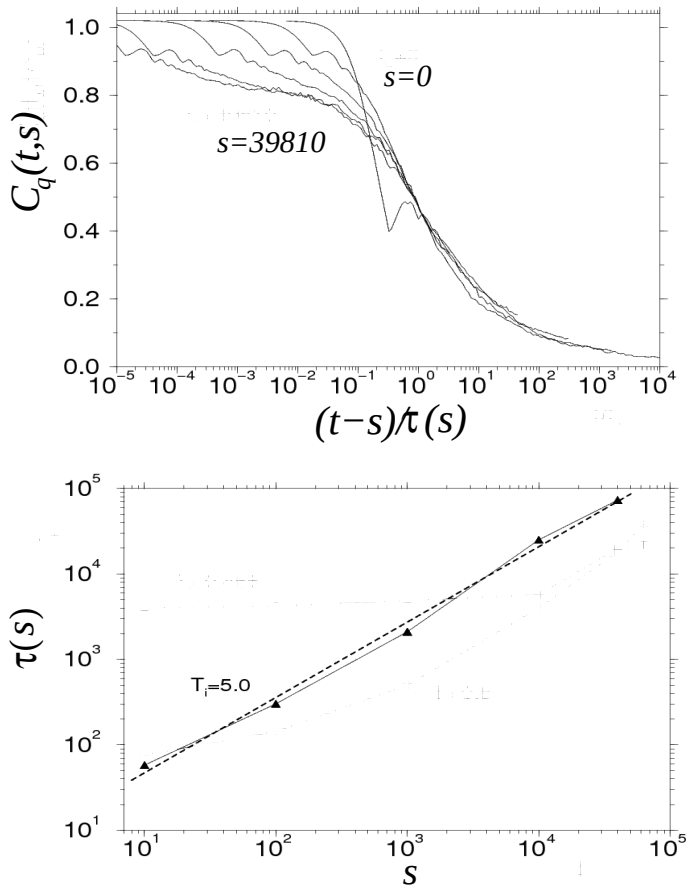


FIG. 4.6 – En haut, les données de la figure 4.2 se superposent lorsqu'on utilise la variable d'échelle $(t-s)/\tau(s)$ où $\tau(s)$ est une fonction du temps d'attente s qui est tracée sur le graphe du bas

4.2.1 Les fonctions de corrélation

Il est possible de mettre en évidence la longueur caractéristique en calculant par exemple la corrélation à temps égaux $C(r,t)$ définie par :

$$C(r,t) = \langle S_i(t) S_j(t) \rangle \,, \tag{4.3}$$

où le symbole $\langle \ldots \rangle$ signifie une moyenne sur les histoires thermiques et $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$. Remarquons qu'il n'est pas nécessaire de retrancher le terme $\langle S_i(t) \rangle \langle S_j(t) \rangle$ qui est nul dans le régime de vieillissement. Pour une trempe critique, il n'y a pas de domaines ordonnés, mais des domaines critiques autosimilaires d'aimantation nulle. Pour une trempe sous-critique, il existe des domaines ordonné d'aimantation non nulle pour une

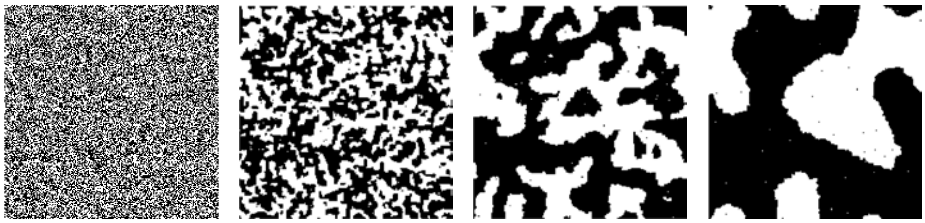


FIG. 4.7 – Les figures représentent le modèle d'Ising bidimensionnel pour un réseau de taille 200×200 après une trempe à la température $T_c/2$ par dynamique de Glauber en partant d'un état initial désordonné représenté à gauche. Les différentes figures correspondent à différents temps écoulés depuis la trempe : de gauche à droite $t = 0$ (état initial), puis $t = 10$, 100 et 1000. On constate l'apparition de domaines ordonnés d'aimantation opposée dont la taille croît au cours du temps.

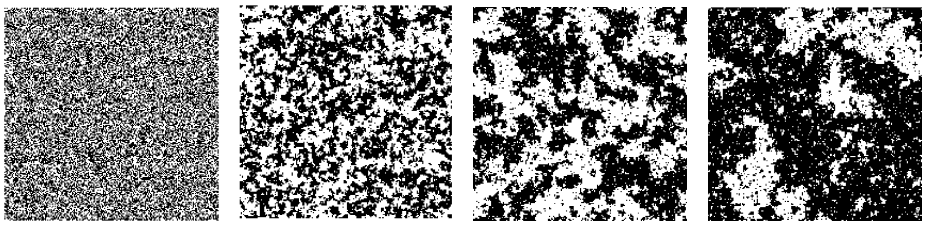


FIG. 4.8 – Les figures représentent le modèle d'Ising bidimensionnel pour un réseau de taille 200×200 trempé à la température critique T_c par dynamique de Glauber en partant d'un état initial désordonné à gauche. Les différentes figures correspondent à différents temps écoulés depuis la trempe : de gauche à droite $t = 0$ (état initial), puis $t = 10$, 100 et 1000. Des domaines autosimilaires se forment et croissent au cours du temps.

configuration initiale donnée. Mais à partir d'une configuration initiale aléatoire, un site i possède une chance égale d'acquérir une valeur d'aimantation et la même valeur opposée. Donc la moyenne sur les histoires thermiques annule l'aimantation moyenne : $\langle S_i(t) \rangle = 0$. Nous avons déjà commenté le comportement de la fonction de corrélation à l'équilibre dans la première partie. Dans la phase basse température $C(r) \sim \mathcal{C}(r/\xi)$ où $\mathcal{C}(x)$ est une fonction qui décroît exponentiellement pour $x \gg 1$. Au point critique, l'autosimilarité conduit à une modulation de la corrélation par un terme algébrique $C(r) \sim \mathcal{C}(r/\xi)/r^{d-2+\eta}$.

Après une trempe, des domaines de taille caractéristique $L(t)$ se forment et la mesure de la corrélation $C(r,t)$ conduit à des courbes différentes comme on peut le voir sur la figure 4.4 pour une trempe à $T_c/2$ (en haut) et T_c (en bas).

L'hypothèse d'échelle dynamique postule que $L(t)$ est la seule longueur caractéristique

dans le système au temps t. Ainsi, lorsqu'on norme toutes les longueurs du système à un instant t par cette longueur caractéristique, deux systèmes à des temps différents apparaissent statistiquement identiques. On s'attend donc à des fonctions de corrélation de la forme :

$$C(r,t) \sim \mathcal{C}_{sc}^{sp}(r/t^{1/z}) \qquad \text{pour une trempe sous-critique ("sc")}\,, \tag{4.4}$$

$$C(r,t) \sim \frac{\mathcal{C}_{c}^{sp}(r/t^{1/z_c})}{r^{d-2+\eta}} \qquad \text{pour une trempe critique ("c")}\,. \tag{4.5}$$

Les fonctions d'échelle $\mathcal{C}_{sc}^{sp}(r/t^{1/z})$ et $\mathcal{C}_{c}^{sp}(r/t^{1/z_c})$ dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel sont tracées sur la figure 4.9, où on constate que les mêmes données de la figure 4.4 se superposent comme lorsqu'on norme les distances par la longueur caractéristique au temps de la mesure.
Définissons maintenant la fonction d'autocorrélation par :

$$C(t,s) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle S_i(s)S_i(t)\rangle\,. \tag{4.6}$$

Nous avons déjà constaté la brisure de l'invariance par translation temporelle aux temps longs sur la figure 4.3. Nous pouvons désormais commenter davantage cette figure et notamment le régime de quasi-équilibre où les courbes se superposent en fonction de $t-s$ pour des temps t et s comparables. Grâce à l'image de croissance des domaines, on s'aperçoit qu'un spin à l'intérieur d'un domaine équilibré ressent uniquement des fluctuations d'équilibre tant qu'il n'est pas atteint par la paroi d'un autre domaine. Le temps caractéristique après lequel un spin commence à ressentir le mouvement des parois pour un système d'âge s est de l'ordre de s^{1/z_c} lors d'une trempe critique et $s^{1/z}$ lors d'une trempe sous-critique. Les grandeurs à deux temps se comportent donc comme à l'équilibre dans ce régime. Cet argument permet également d'obtenir le préfacteur des fonctions d'échelle en prenant la limite $t \to s$ [Godr00b]. La fonction d'autocorrélation (4.6) se comporte comme :

$$C(t,s) \sim \langle M(s)M(t)\rangle \underset{t\to s}{\approx} \langle M_{eq}^2(s)\rangle\,. \tag{4.7}$$

Pour une trempe sous-critique, les domaines possèdent une aimantation au carré $M_{eq}^2(s) \approx M_{eq}^2 = Cste$ dont la dépendance est faible en fonction de la taille $L(s)$ qui est rapidement plus grande que la longueur de corrélation. Pour une trempe critique, les domaines possèdent au temps s une aimantation au carré $M_{eq}^2(s)$ dont la valeur dépend directement de la taille des domaines, par analogie avec les effets de taille finie à l'équilibre, sous la forme $M_{eq}^2(s) \sim \xi(s)^{-2\beta/\nu} \sim s^{-2\beta/(\nu z_c)}$. On pose $a_c = 2\beta/(\nu z_c) = (d-2+\eta)/z_c$. Notons que ces arguments habituellement présentés ont une valeur purement dimensionnelle. Le préfacteur s^{-a_c} provient en fait de la contribution d'équilibre de l'autocorrélation $C_{eq}(t,s) \sim (t-s)^{-a_c}$. Par continuité, on doit retrouver cette expression pour des temps de mesure $t \to s$. Ce terme est d'ailleurs justifié par les modèles exactement solubles tels que le modèle sphérique [Godr00b] et le modèle XY dans l'approximation des ondes de spin (voir la section 4.3). Ce terme peut se réécrire sous la forme $(t-s)^{-a_c} = s^{-a_c}(t/s-1)^{-a_c} \underset{t,s\to\infty}{\sim} s^{-a_c}(t/s)^{-a_c}$. Le

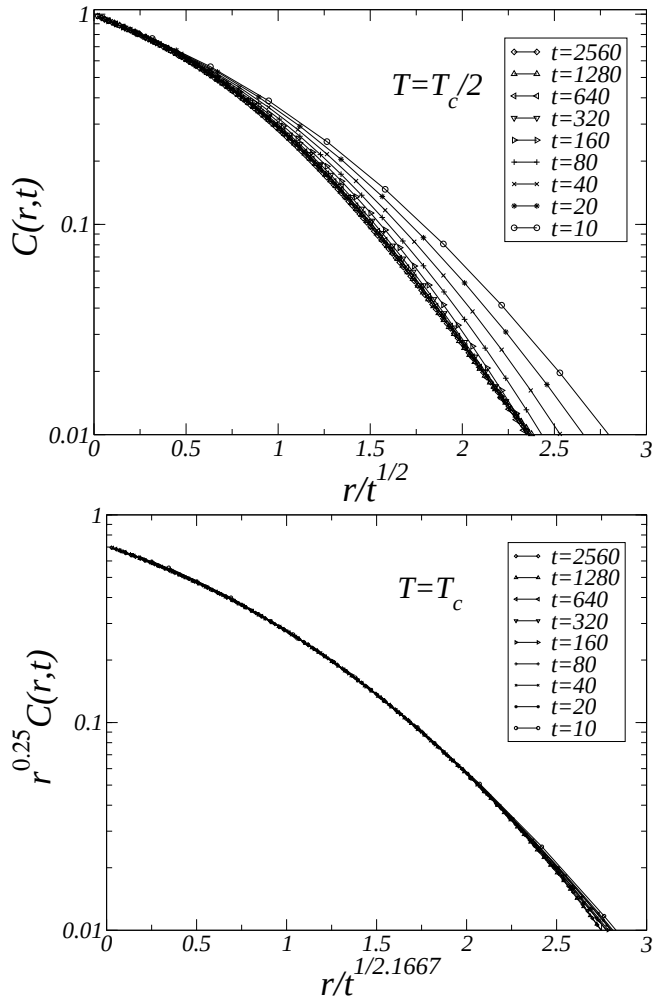


FIG. 4.9 – La fonction de corrélation spatiale spin-spin à temps égaux du modèle d'Ising pour une trempe par dynamique de Glauber depuis un état désordonné est tracée pour deux températures de trempe finale : jusque dans la phase basse température ($T_c/2$) en haut et jusqu'au point critique en bas. Les données sont les mêmes que pour la figure 4.4 mais tracées en normant r par les longueurs caractéristiques $L(t) = t^{1/2}$ (en haut) et $L(t) = t^{1/2.1667}$ (en bas). Les courbes se superposent pour des temps suffisamment grands. Cette superposition illustre l'hypothèse d'échelle dynamique : il existe une seule longueur caractéristique dans le système.

rapport t/s vient par la suite s'ajouter à la contribution de vieillissement décrite plus bas qui s'exprime aussi comme un rapport t/s.
Aux temps longs, le système vieillit. On fera l'hypothèse que la fonction à deux temps

ne dépend que de $L(t)/L(s)$ pour une trempe sous-critique et $\xi(t)/\xi(s)$ pour une trempe critique *i.e.* le rapport des longueurs caractéristiques aux deux temps considérés. Il vient pour une trempe sous-critique :

$$C(t,s) \sim M_{eq}^2 \tilde{\mathcal{C}}_{sc}(\xi(t)/\xi(s)) \sim M_{eq}^2 \mathcal{C}_{sc}(t/s)\,, \tag{4.8}$$

où $\tilde{\mathcal{C}}_{sc}(x)$ et $\mathcal{C}_{sc}(x)$ sont des fonctions d'échelle, tandis que pour une trempe critique :

$$C(t,s) \sim s^{-a_c} \tilde{\mathcal{C}}_{c}(\xi(t)/\xi(s)) \sim s^{-a_c} \mathcal{C}_{c}(t/s)\,, \tag{4.9}$$

où $\tilde{\mathcal{C}}_{c}(x)$ et $\mathcal{C}_{c}(x)$ sont des fonctions d'échelle. D'après la discussion qui précède, il est possible de réécrire l'expression précédente sous la forme :

$$C(t,s) \sim (t-s)^{-a_c} \tilde{\mathcal{C}}_{c}^{bis}(\xi(t)/\xi(s)) \sim (t-s)^{-a_c} \mathcal{C}_{c}^{bis}(t/s)\,, \tag{4.10}$$

où $\tilde{\mathcal{C}}_{c}^{bis}(x)$ et $\mathcal{C}_{c}^{bis}(x)$ sont des fonctions d'échelle. Nous avons tracé les fonctions d'échelle de l'autocorrélation $\mathcal{C}_{sc}(t/s) \sim C(t,s)$ et $\mathcal{C}_{c}(t/s) \sim s^{a_c} C(t,s)$ sur la figure 4.10 pour le modèle d'Ising bidimensionnel. Elles présentent une décroissance asymptotique algébrique. Pour une trempe sous-critique :

$$\mathcal{C}_{sc}(x) \sim x^{-\lambda/z}\,, \tag{4.11}$$

où λ est un nouvel exposant introduit dans le contexte des verres de spins [Fish88a]. Pour une trempe critique, on a :

$$\mathcal{C}_{c}(x) \sim x^{-\lambda_c/z_c}\,, \tag{4.12}$$

où λ_c est aussi un nouvel exposant [Huse89] qui est relié à la classe d'universalité du modèle selon les arguments du groupe de renormalisation appliqué aux phénomènes hors de l'équilibre [Jans89]. Notons qu'on peut aussi définir la fonction d'échelle intervenant dans (4.10) par :

$$\mathcal{C}_{c}^{bis}(x) \sim x^{-\lambda_c/z_c + a_c} \sim x^{-\phi}\,, \tag{4.13}$$

où $\phi = \lambda_c/z_c - a_c$. On peut relier la valeur de l'exposant λ_c à celle de l'exposant θ (appelé *initial slip exponent* en anglais) introduit dans la dynamique aux temps courts (de l'anglais *short-time dynamics*) par la relation [Jans89] :

$$\lambda_c = d - z_c\theta\,. \tag{4.14}$$

L'exposant θ est défini lors d'une trempe jusqu'à la température critique depuis un état initial à haute température qui possède cependant une faible aimantation m_0. La forme d'échelle dynamique pour le $k^{\text{ième}}$ moment $M^{(k)}$ de l'aimantation s'écrit alors :

$$M^{(k)}(t,\tau,m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z_c}t, b^{1/\nu}\tau, b^{x_0}m_0)\,, \tag{4.15}$$

où dans ce contexte t est le temps, τ la température réduite, b est le facteur de réduction spatial et x_0 est la dimension anormale de l'aimantation initiale. À partir de cette hypothèse, il est possible de montrer que l'aimantation $M(t)$ commence par croître selon $M(t) \sim m_0 t^{\theta}$ dans la limite $t \to 0$ avant de décroître selon $M(t) \sim t^{-\beta/(\nu z)}$

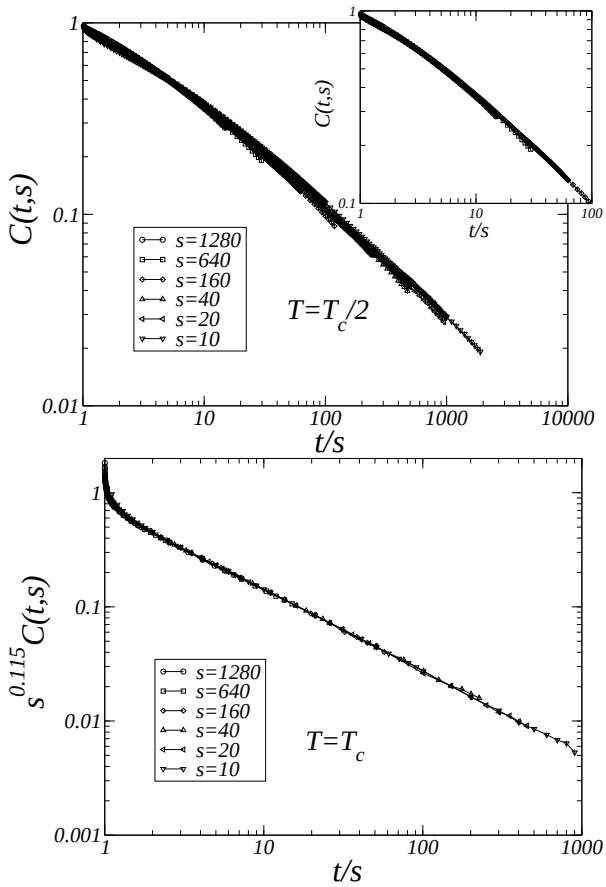


FIG. 4.10 – Les fonctions d'échelle $\mathcal{C}_{sc}(t/s) \sim C(t,s)$ et $\mathcal{C}_c(t/s) \sim s^{a_c}C(t,s)$ définies dans les expressions (4.8) et (4.9) de l'autocorrélation du modèle d'Ising pour une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température $T_c/2$ (en haut) et T_c (en bas) sont tracées en fonction de la variable d'échelle t/s. Les courbes sont indistinguables aux barres d'erreur près pour la trempe critique. De plus, on constate une décroissance algébrique pour un rapport $t/s \gg 1$. Pour la trempe sous-critique, on a réalisé un agrandissement dans l'insert pour les trois plus grands temps d'attente afin de constater l'accumulation des courbes, mais le régime algébrique asymptotique n'est pas vraiment prononcé pour ce choix de paramètres : le régime asymptotique est atteint pour des valeur de s et t plus grandes que pour une trempe critique. On a utilisé un réseau de taille 192×192, un temps final $t_f = 10.000$ et une moyenne sur 5000 histoires thermiques pour la trempe critique et un réseau de taille 384×384, un temps final $t_f = 20.000$ et une moyenne sur 300 histoires thermiques pour la trempe sous-critique.

dans la limite $t \to \infty$ (voir [Zhen98] pour une revue). L'exposant θ est lui-même relié à la dimension anormale x_0 (définie dans (4.15)) de l'aimantation initiale par $\theta = (x_0 - \beta/\nu)/z_c$. Il faut noter que la relation (4.14) est valable uniquement pour des états initiaux sans corrélation spatiale à longue portée [Korn07]. Les valeurs des exposants λ_c/z_c, θ et z_c pour une liste de modèles sont rassemblées dans la table 4.1 (la plupart des valeurs sont extraites de l'ouvrage [Henk08]).

4.2.2 Les fonctions de réponse

La fonction d'autoréponse se mesure selon le protocole suivant : on applique un champ infinitésimal sur un site au temps s et on mesure la moyenne du spin sur le même site au temps t. Le protocole de mesure de la réponse est illustré à gauche sur la figure 4.11. Le couplage s'effectue par couplage des spins avec un champ en ajoutant un terme Zeeman au hamiltonien :

$$-\sum_{i=1}^{N} h_i S_i \,. \tag{4.16}$$

La définition de l'autoréponse est :

$$R(t,s) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{\delta\langle S_i(t)\rangle}{\delta h_i(s)}\bigg|_{h=0} \,, \tag{4.17}$$

où $N = L\times L$ représente le nombre de sites du réseau et $h_i(s)$ est un champ magnétique appliqué au site i au temps s. Pour une trempe sous-critique, il est raisonnable, par analogie avec l'autocorrélation, de supposer un comportement de la forme [Godr00b] :

$$R(t,s) \underset{t,s\to\infty}{\sim} s^{-a-1}\mathcal{R}_{sc}(t/s) \,, \tag{4.18}$$

où $\mathcal{R}_{sc}(x)$ est une fonction d'échelle dont le comportement asymptotique est le même que pour l'autocorrélation (4.12) [Godr00b] :

$$\mathcal{R}_c(x) \underset{t,s\to\infty}{\sim} x^{-\lambda^r/z} \,. \tag{4.19}$$

La valeur de l'exposant a a donné lieu à un débat dans la littérature entre $a = 1/4$ [Corb02, Corb03, Corb05] et $a = 1/2$ [Henk03a, Henk03b, Henk04, Henk05a]. On peut consulter l'ouvrage [Henk08] pour une discussion plus détaillée de ce point. Les arguments de [Henk03a, Henk03b, Henk04, Henk05a] ainsi que les données numériques de l'article [Chat03] permettent de conclure en faveur de la valeur $a = 1/2$. Pour une trempe critique, les résultats exacts pour le modèle sphérique [Godr00a] suggèrent un comportement identique à $\partial_s C(t,s)$. En utilisant (4.9), il vient :

$$R(t,s) \sim s^{-a_c-1}\mathcal{R}_c(t/s) \,, \tag{4.20}$$

où $\mathcal{R}_c(x)$ est une fonction d'échelle dont le comportement asymptotique est le même que pour l'autocorrélation (4.12) [Godr00b] :

$$\mathcal{R}_c(x) \sim x^{-\lambda_c^r/z_c} \,. \tag{4.21}$$

Modèle	Dimension	Référence	Méthode	λ_c/z_c	θ	z_c
Sphérique	$d=3$	[Godr00b]	Exact	$3/4d-1$	$1-d/4$	2
	$d>4$	[Godr00b]	Exact	$d/2$	0	2
Sph. LP ($\sigma<2$)	$\sigma<d<2\sigma$	[Baum07b]	Exact	$3/4d-\sigma/2$	$1-d/(2\sigma)$	σ
	$d>2\sigma$	[Baum07b]	Exact	$d/2$	0	σ
Ising	1	[Godr00a, Lipp00]	Exact	$1/2$	0	2
	2	[Gras95]	MC		$0.191(3)$	$2.172(6)$
		[Nigh96]	MC			$2.1667(5)$
		[Okan97]	MC	$0.737(1)$		$2.155(3)$
		[Chat04]	MC	$0.738(21)$		
		[Chat04]	MC [tr]	$0.739(22)$		
		[Chat04]	MC [hc]	$0.731(17)$		
	$3d$	[Gras95]	MC		$0.104(3)$	$2.032(4)$
		[Jast99]	MC		$0.108(2)$	$2.042(6)$
		[Ito00]	MC			$2.055(10)$
Horloge 3 états	$2d$	[Okan97]	MC	$0.839(1)$	$0.075(3)$	$2.196(8)$
		[Silv02]	MC			$2.198(2)$
		[Chat04]	MC	$0.844(18)$		
		[Chat04]	MC [tr]	$0.845(20)$		
		[Chat04]	MC [hc]	$0.844(16)$		
Horloge 4 états	$2d$	[Silv02]	MC			$2.290(3)$
		[Chat04]	MC	$0.99(12)$		
		[Chat04]	MC [tr]	$0.99(17)$		
		[Chat04]	MC [hc]	$0.97(8)$		
		[Silv04]	MC		$-0.0429(11)$	
Ashkin-Teller	2	[Chat04]	MC	$0.802(20)$		
Baxter-Wu	2	[Chat04]	MC	$1.13(6)$		
Ising Multispin	2	[Chat04]	MC	$0.977(25)$		
Heisenberg	3	[Fern06]	MC		$0.482(3)$	$1.976(9)$
ISG	3	[Henk05b]	MC [bi]	$0.362(5)$		
		[Henk05b]	MC [ga]	$0.320(5)$		
	4	[Henk05b]	MC [bi]	$0.615(10)$		
		[Henk05b]	MC [ga]	$0.68(1)$		
FFIM	2	[cette thèse]	MC [ff]	$1.02(2)$		$2.004(9)$
		[cette thèse]	MC [at]	$1.02(2)$		$1.992(16)$
FFXY(chiralité)	2	[cette thèse]	MC [ff]	$0.98(5)$		
FFXY(spins)	2	[cette thèse]	MC [ff]	$0.74(3)(T_{BKT}^{FF})$		$2\forall T\leq T_{BKT}^{FF}$

TAB. 4.1 – Valeurs des exposants λ_c/z_c, θ et z_c de l'aimantation pour une trempe depuis une température infinie jusqu'au point critique. Les réseaux utilisés sont indiqués par [tr] pour le réseau triangulaire ferromagnétique, [hc] pour le réseau en nid d'abeille (de l'anglais *honeycomb*), [ff] pour le réseau carré complètement frustré, [at] pour le réseau triangulaire antiferromagnétique, , [bi] et [ga] pour des constantes de couplages choisies selon une distribution de probabilité binaire ou gaussienne respectivement. Sinon, le réseau est ferromagnétique carré. La notation MC signifie une méthode Monte Carlo. Les notations sph. LP, ISG, FFIM et FFXY correspondent respectivement au modèle sphérique à longue portée où σ est un paramètre caractérisant la décroissance des interactions, au modèle de verre de spin de type Ising (de l'anglais *Ising Spin Glass*) au modèle d'Ising complètement frustré $2d$ et au modèle XY complètement frustré $2d$. Pour le FFXY, T_{BKT}^{FF} représente la température de Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless des spins (la plupart des valeurs sont extraites de l'ouvrage [Henk08]).

On constate en général que $\lambda_c^r = \lambda_c$. La fonction d'autoréponse est difficile à mesurer en pratique. Il est souvent préférable d'utiliser des réponses intégrées. Il existe le protocole TRM de l'anglais *ThermoRemanent Magnetization* qui consiste à placer le système dans un champ magnétique faible entre le moment de la trempe jusqu'au temps d'attente. La mesure est alors effectuée sans champ appliqué. Il existe aussi le protocole ZFC de l'anglais *Zero-Field Cooled*. La trempe est effectuée sans champ. Le champ est appliqué à partir du temps d'attente. Les protocoles pour ces deux types de réponses intégrées sont schématisés sur la figure 4.11. Nous utiliserons dans la suite

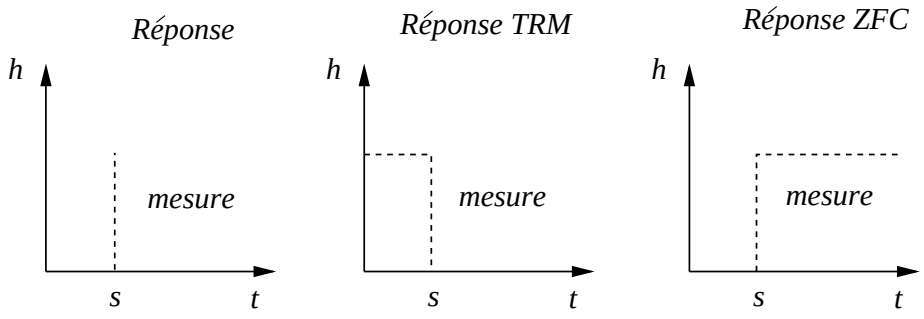


FIG. 4.11 – Nous avons représenté le protocole pour différents types de fonction de réponse. La trempe est effectuée au temps $t = 0$ et s est le temps d'attente. À gauche, la fonction de réponse est mesurée après une impulsion de champ magnétique au temps s. Au milieu, la réponse intégrée TRM est obtenue en appliquant un champ entre les temps 0 et s. À droite, la réponse intégrée ZFC est obtenue en appliquant un champ pendant la mesure, à partir du temps s.

les définitions suivantes :

$$\rho_{TRM}(t,s) = k_B T \int_0^s R(t,u)du\,, \tag{4.22}$$

et

$$\rho_{ZFC}(t,s) = k_B T \int_s^t R(t,u)du\,. \tag{4.23}$$

Il existe plusieurs façons de mesurer la fonction de réponse pour un ferromagnétique lors d'une simulation Monte Carlo. On peut effectivement appliquer un champ magnétique faible (voir [Barr98] par exemple). Mais ce protocole peut mener à l'apparition de termes non linéaires si le champ est trop fort. Nous avons utilisé une méthode alternative dite *sans champ*, où on utilise les propriétés de l'équation maitresse. Cette méthode fut d'abord présentée dans [Chat03] puis dans [Ricc03]. Rappelons quelques généralités pour décrire les grandes lignes de cette méthode. Plus de détails sont disponibles dans [Chat03]. L'évolution temporelle d'un système de spins sur réseau est décrite par l'équation maitresse :

$$P(\{\sigma\}, t+1) = \sum_{\{\sigma'\}} \tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\}, t) P(\{\sigma'\}, t)\,, \tag{4.24}$$

où $\{\sigma\}$ est une configuration de spins, $P(\{\sigma\},t)$ la probabilité d'obtenir la configuration $\{\sigma\}$ au temps t et $\tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\})$ le taux de transition par unité de temps entre la configuration $\{\sigma'\}$ et $\{\sigma\}$. Une configuration est à l'équilibre lorsque sa probabilité $P_{eq}(\{\sigma\})$ ne dépend pas du temps :

$$\frac{\partial P_{eq}(\{\sigma\})}{\partial t} = 0\,. \tag{4.25}$$

Remarquons que le taux de transition doit satisfaire la relation :

$$\sum_{\{\sigma'\}} \tau(\{\sigma \to \sigma'\},t) = 1\,, \tag{4.26}$$

et récrivons (4.24) :

$$P(\{\sigma\},t{+}1){-}P(\{\sigma\},t) = \sum_{\{\sigma'\}} \tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\},t)P(\{\sigma'\},t){-}\tau(\{\sigma\} \to \{\sigma'\},t)P(\{\sigma\},t)\,. \tag{4.27}$$

La condition de stationnarité (4.25) est satisfaite si on impose la condition dite du bilan détaillé :

$$\tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\},t)P_{eq}(\{\sigma'\}) = \tau(\{\sigma\} \to \{\sigma'\},t)P_{eq}(\{\sigma\})\,. \tag{4.28}$$

En supposant que la probabilité d'équilibre est donnée par la statistique de Boltzmann, on peut récrire (4.28) sous la forme :

$$\tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\},t)e^{-\beta H(\{\sigma'\})} = \tau(\{\sigma\} \to \{\sigma'\},t)e^{-\beta H(\{\sigma\})}\,, \tag{4.29}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\},t)}{\tau(\{\sigma\} \to \{\sigma'\},t)} = e^{-\beta\Delta E}\,, \tag{4.30}$$

où $\Delta E = H(\{\sigma'\}) - H(\{\sigma\})$ est la différence d'énergie entre les configurations de spins finale et initiale. Le principe de la simulation Monte-Carlo est de trouver un test satisfaisant la relation (4.28). Pour un système de spins, il est courant d'utiliser une méthode de tests locaux appelée *single flip* en anglais où l'on choisit un spin σ_i au hasard auquel on attribue de manière aléatoire un spin $\tilde{\sigma}_i \neq \sigma_i$. La transition $\sigma_i \to \tilde{\sigma}_i$ est acceptée avec un taux de transition satisfaisant (4.28). Prenons par exemple la dynamique de Glauber [Glau63] que nous pouvons écrire sous la forme compacte :

$$\tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\},t) = \left[\prod_{j\neq i} \delta_{\sigma_j,\sigma'_j}\right] \frac{\delta_{\sigma'_i,\sigma_i} + \delta_{\sigma'_i,\tilde{\sigma}_i} e^{-\beta\Delta E}}{1+e^{-\beta\Delta E}}\,. \tag{4.31}$$

Soulignons que sous cette forme, la condition (4.26) est explicitement satisfaite. Écrivons la fonction de corrélation du paramètre d'ordre sous la forme :

$$C_{ij}(t,s) = \langle m_i(t)m_j(s)\rangle\,, \tag{4.32}$$

$$= \sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} m_i(\{\sigma\})P(\{\sigma\},t|\{\sigma'\},s)m_j(\{\sigma'\})P(\{\sigma'\},s)\,. \tag{4.33}$$

Afin de calculer la réponse du paramètre d'ordre local à un champ infinitésimal, on introduit un terme Zeeman $-h_i m_i$ au taux de transition (4.31) :

$$\tau(\{\sigma'\} \to \{\sigma\}, t) = \left[\prod_{j\neq i} \delta_{\sigma_j,\sigma'_j}\right] \frac{\delta_{\sigma'_i,\sigma_i} + \delta_{\sigma'_i,\tilde{\sigma}_i} e^{-\beta\Delta E + \beta h_i (m_i(\{\tilde{\sigma}\}) - m_i(\{\sigma\}))}}{1 + e^{-\beta\Delta E + \beta h_i (m_i(\{\tilde{\sigma}\}) - m_i(\{\sigma\}))}}\,, \tag{4.34}$$

$$= \left[\prod_{j\neq i} \delta_{\sigma_j,\sigma'_j}\right] \frac{\delta_{\sigma'_i,\sigma_i} e^{\beta h_i m_i(\{\sigma\})} + \delta_{\sigma'_i,\tilde{\sigma}_i} e^{-\beta\Delta E + \beta h_i m_i(\{\tilde{\sigma}\})}}{e^{\beta h_i m_i(\{\sigma\})} + e^{-\beta\Delta E + \beta h_i m_i(\{\tilde{\sigma}\})}}\,. \tag{4.35}$$

La valeur moyenne du paramètre d'ordre du site i au temps t s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
\langle m_k(t)\rangle &= \sum_{\{\sigma\}} m_k(\{\sigma\}) P(\{\sigma\}, t)\,, && (4.36)\\
&= \sum_{\{\sigma\},\{\sigma'\}} m_k(\{\sigma\}) P(\{\sigma\}, t|\{\sigma'\}, s+1) P(\{\sigma'\}, s+1)\,,\\
&= \sum_{\substack{\{\sigma\},\{\sigma'\},\\ \{\sigma''\}}} m_k(\{\sigma\}) P(\{\sigma\}, t|\{\sigma'\}, s+1) \tau(\{\sigma'' \to \sigma'\}, s) P(\{\sigma''\}, s)\,.
\end{aligned}$$

La réponse linéaire est définie par (4.17) comme la réponse du paramètre d'ordre local $\langle m_i(t)\rangle$ à un champ infinitésimal $h_i(s)$ appliqué au temps s. Or dans l'expression (4.36), la seule quantité dépendant de $h_i(s)$ est le taux de transition $\tau(\{\sigma'' \to \sigma'\}, s)$. Il vient :

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial \tau}{\partial h_i(s)}\right|_{h=0} (\{\sigma''\} \to \{\sigma'\}) &=\\
&= \frac{\partial}{\partial h_i(s)} \left(\left[\prod_{j\neq i} \delta_{\sigma''_j,\sigma'_j}\right] \frac{\delta_{\sigma''_i,\sigma'_i} e^{\beta h_i m_i(\{\sigma''\})} + \delta_{\sigma'_i,\tilde{\sigma}_i} e^{-\beta\Delta E + \beta h_i m_i(\{\tilde{\sigma}\})}}{e^{\beta h_i m_i(\{\sigma''\})} + e^{-\beta\Delta E + \beta h_i m_i(\{\tilde{\sigma}\})}} \right)\,,\\
&= \beta \left(m_i(\{\sigma'\}) - \frac{m_i(\{\sigma''\}) + m_i(\{\tilde{\sigma}\}) e^{-\beta\Delta E}}{1 + e^{-\beta\Delta E}} \right) \epsilon_i(s) \tau(\{\sigma''\} \to \{\sigma'\}, s)\,,
\end{aligned}$$

où $\epsilon_i = 1$ si le spin concerné dans la transition $\{\sigma''\} \to \{\sigma'\}$ est situé sur le site i et $\epsilon_i = 0$ sinon. En utilisant cette dernière expression dans la définition de la réponse linéaire, on obtient :

$$\begin{aligned}
R_{kj}(t,s) &= \left.\frac{\partial \langle m_k(t)\rangle}{\partial h_i(s)}\right|_{h\to 0}\,,\\
&= \sum_{\substack{\{\sigma\},\{\sigma'\},\\ \{\sigma''\}}} m_k(\{\sigma\}) P(\{\sigma\}, t|\{\sigma'\}, s+1) \left(\frac{\partial \tau}{\partial h_i(s)}\right)_{h=0} (\{\sigma''\} \to \{\sigma'\}) P(\{\sigma''\}, s)\,,\\
&= \beta \langle m_k(t) \left(m_i(s+1) - m_i^W(s)\right) \epsilon_i(s)\rangle\,, && (4.37)
\end{aligned}$$

où m_i^W est la valeur moyenne de l'aimantation au temps s de la valeur initiale du spin avant le test avec la valeur du spin proposée pour le test. Nous considérerons

par la suite l'autoréponse $R_{jj}(t,s)$. Nous obtenons ainsi une expression de la réponse linéaire calculable numériquement de façon simple sans avoir recours à l'application d'un champ dans le système.

4.2.3 Le rapport fluctuation-dissipation

A l'équilibre thermodynamique, les fonctions d'autocorrélation et d'autoréponse sont reliées par le théorème fluctuation-dissipation ou TFD (voir par exemple les revues [Cala05, Cris03] et leurs références) :

$$k_B T R(t,s) = \partial_s C(t,s)\,. \tag{4.38}$$

On peut généraliser cette relation à différentes observables locales comme l'énergie [Cala05, Maye03]. Lorsque le système est hors de l'équilibre, les hypothèses qui mènent à la relation (4.38) ne sont plus valables. L'étude du vieillissement pour le modèle *p-spin* sphérique [Cugl93] montre qu'on peut généraliser le TFD en écrivant une égalité effective. La déviation par rapport au TFD est incluse dans une fonction $X(t,s)$ appelée rapport fluctuation-dissipation ou RFD [Cugl93, Cugl94, Fran94, Cugl95] :

$$X(t,s) = \frac{k_B T R(t,s)}{\partial_s C(t,s)}\,. \tag{4.39}$$

Le RFD prend évidemment la valeur $X(t,s) = 1$ à l'équilibre de façon à retrouver le TFD (4.38). Le RFD peut également être interprété en terme de température effective $T_{eff} = T/X(t,s)$ [Cug97, Nieu98]. Cette interprétation est justifiable si le RFD ne dépend pas de l'observable. On peut lire les articles [Maye03] et [Cala05] pour une discussion sur ce sujet. Dans le régime de vieillissement, il a été conjecturé [Cugl94] que le RFD devient une fonction de l'autocorrélation uniquement. Cette hypothèse est justifiée notamment par l'étude des modèles de type champ moyen de verres de spins [Cugl94, Cugl95]. Lorsqu'on effectue une trempe sous-critique, le RFD s'annule. Ce résultat est manifeste à partir des expressions (4.8) pour l'autocorrélation et (4.18) pour l'autoréponse, combinées aux comportements asymptotiques (4.12) et (4.21), et en prenant $\lambda^r = \lambda$. En revenant à la définition (4.39), il vient :

$$X(t,s) \sim s^{-a}\,. \tag{4.40}$$

La superposition de $s^a X(t,s)$ pour des grandes valeurs de la variable d'échelle $(t-s)/s$ a été observée pour une trempe à $\approx (3/4)T_c$ [Chat03]. Lorsqu'on effectue une trempe au point critique, le RFD prend une valeur asymptotique X_∞ définie par :

$$X_\infty = \lim_{t,s\to\infty} X(t,s)\,, \tag{4.41}$$

où les limites entre t et s ne commutent pas. On s'en aperçoit avec le modèle d'Ising à partir des expressions (4.9) pour l'autocorrélation et (4.20) pour l'autoréponse, combinées aux comportements asymptotiques (4.12) et (4.21), et en prenant $\lambda_c^r = \lambda_c$. En revenant à la définition (4.39), les dépendances temporelles disparaissent [Godr00b] :

$$X_\infty = \frac{\nu\lambda_c - 2\beta}{\nu z_c}\frac{\mathcal{A}_C}{\mathcal{A}_R}\,, \tag{4.42}$$

où $\mathcal{A}_C$ et $\mathcal{A}_R$ sont les amplitudes de l'autocorrélation et de l'autoréponse respectivement. Puisque X_∞ fait intervenir des rapport d'amplitudes et des exposants d'équilibre, elle peut être considérée universelle. Cette propriété d'universalité est vérifiée pour les modèles exactement solubles tels que la chaine d'Ising [Godr00a, Lipp00, Kope89], le modèle sphérique en dimensions $d \geq 3$ [Godr00b] et le modèle gaussien [Cug94] et elle est justifiée pour les modèles non solubles par les arguments du groupe de renormalisation et d'invariance d'échelle qui sont applicables au point critique [Godr00a, Godr00b, Cala02a, Cala04]. La table 4.2 résume les valeurs X_∞ pour une liste de modèles (la plupart des valeurs sont extraites de [Cala05] et [Henk08]).

Depuis les résultats analytiques sur les modèles de verres de spins de type champ moyen [Cugl94, Cugl95] on a vu apparaître dans la littérature des travaux où le RFD est obtenu à partir de la pente des réponses intégrées tracées en fonction de l'autocorrélation (*Fluctuation-Dissipation plot* ou *FD plot* en anglais). De telles mesures expérimentales de RFD ont été réalisées notamment à partir de verres de spins [Heri02] et à partir de cristaux liquides [Joub09]. On peut également consulter l'article [Barr98] et ses références pour des mesures à partir de simulations numériques. Cependant, il faut faire attention à la méthode utilisée comme l'ont remarqué Mayer *et al* [Maye03]. L'analyse doit être réalisée à un temps t fixé et avec un temps s qui varie et non pas à s fixé et avec t qui varie comme on peut le voir habituellement. La distinction entre les méthodes s'obtient en revenant à la définition (4.39) du RFD :

$$X(t,s) = \frac{k_B T R(t,s)}{\partial_s C(t,s)}\,, \tag{4.43}$$

$$\Leftrightarrow k_B T R(t,s) = X(t,s)\partial_s C(t,s)\,. \tag{4.44}$$

Commençons par la réponse intégrée ZFC définie par l'expression (4.23). Elle s'obtient en intégrant les deux membres de (4.44) par rapport à s, pour un temps t fixé :

$$\rho_{ZFC}(t,s) = k_B T \int_s^t R(t,u)du = \int_s^t X(t,u)\partial_u C(t,u)du\,. \tag{4.45}$$

En se plaçant dans le régime de vieillissement la limite (4.41) nous permet d'écrire :

$$\lim_{t,s\to\infty} \rho_{ZFC}(t,s) = X_\infty \int_s^t \partial_s C(t,u)du\,, \tag{4.46}$$

$$= X_\infty \big(\underbrace{C(t,t)}_{=1} - C(t,s)\big)\,, \tag{4.47}$$

$$= X_\infty (1 - C(t,s))\,, \tag{4.48}$$

ce qui nous permet d'obtenir X_∞ par régression linéaire. Dans les régimes d'équilibre et de quasi-équilibre, puisque $X(t,s) = 1$, on obtient à partir de (4.45) après avoir posé $X(t,u) = 1$:

$$\rho_{ZFC}(t,s) = 1 - C(t,s)\,. \tag{4.49}$$

Afin d'illustrer ces expressions, nous avons tracé la réponse intégrée ZFC en fonction de l'autocorrélation sur la figure 4.12 pour le modèle d'Ising $2d$ trempé depuis la phase haute température jusqu'à la température critique. L'analyse est réalisée pour t fixé et

Modèle	Dimension	Référence	Méthode	X_∞
Marche aléatoire	$\forall d$	[Cug94]	Exact	$1/2$
Gaussien	$\forall d$	[Cug94]	Exact	$1/2$
Sphérique	3	[Godr00b]	Exact	$1-2/d$
	$d>4$	[Godr00b]	Exact	$1/2$
Sph. LP ($\sigma<2$)	$\sigma<d<2\sigma$	[Baum07b]	Exact	$1-\sigma/d$
	$d>2\sigma$	[Baum07b]	Exact	$1/2$
Ising	1	[Godr00a, Lipp00]	Exact	$1/2$
	2	[Godr00b]	MC	$0.26(1)$
		[Cala02b]	TC $\mathcal{O}(\epsilon^2)$	$0.30(5)$
		[Maye03]	MC	$0.340(5)$
		[Chat03]	MC	$0.33(2)$
		[Sast03]	MC	$0.33(1)$
		[Chat04]	MC	$0.328(1)$
		[Chat04]	MC [tr]	$0.323(1)$
		[Chat04]	MC [hc]	$0.328(1)$
	3	[Godr00b]	MC	≈ 0.40
		[Cala02b]	TC $\mathcal{O}(\epsilon^2)$	$0.429(6)$
Horloge 3 états	2	[Chat04]	MC	$0.406(1)$
		[Chat04]	MC [tr]	$0.402(3)$
		[Chat04]	MC [hc]	$0.404(1)$
Horloge 4 états	2	[Chat04]	MC	$0.459(8)$
		[Chat04]	MC [tr]	$0.460(4)$
		[Chat04]	MC [hc]	$0.467(21)$
Ashkin-Teller	2	[Chat04]	MC	$0.403(8)$
Baxter-Wu	2	[Chat04]	MC	$0.548(15)$
Ising Multispin	2	[Chat04]	MC	$0.466(3)$
Ising dilué	3	[Sche05]	TC	$1/2-\sqrt{3\epsilon/424}$
XY	3	[Cala02b]	TC $\mathcal{O}(\epsilon^2)$	$0.416(8)$
		[Abri04c]	MC	$0.43(4)$
Heisenberg	3	[Cala02b]	TC $\mathcal{O}(\epsilon^2)$	$0.405(10)$
RFIM	3	[Cala02c]	TC $\mathcal{O}(\sqrt{\epsilon})$	≈ 0.416
ISG	3	[Henk05b]	MC [bi]	$0.12(1)$
		[Henk05b]	MC [ga]	$0.09(1)$
	4	[Henk05b]	MC [bi]	$0.19(1)$
		[Henk05b]	MC [ga]	$0.16(1)$
Cardy-Ostlund	2	[Sche04]	RG $\mathcal{O}(\tau^2)$	$(2+2e^{\gamma_E}\tau)^{-1}$
FFIM	2	[cette thèse]	MC [ff]	$0.33(1)$
		[cette thèse]	MC [at]	$0.33(1)$
FFXY(chiralité)	2	[cette thèse]	MC [ff]	$0.405(5)$
FFXY(spins)	2	[cette thèse]	MC [ff]	$0.385(15)$ (T_{BKT}^{FF})
XY	2	[cette thèse]	MC	$0.215(15)$ (T_{BKT})

TAB. 4.2 – Valeurs du RFD de l'aimantation pour une trempe depuis une température infinie jusqu'au point critique. Les réseaux utilisés sont indiqués par [tr] pour le réseau triangulaire ferromagnétique, [hc] pour le réseau en nid d'abeille (de l'anglais *honeycomb*), [ff] pour le réseau carré complètement frustré, [at] pour le réseau triangulaire antiferromagnétique, [bi] et [ga] pour des constantes de couplages choisies selon une distribution de probabilité binaire ou gaussienne respectivement. Sinon, le réseau est ferromagnétique carré. Les méthodes sont abrégées par MC pour Monte Carlo, TC pour théorie des champs et RG pour groupe de renormalisation. Les notations RFIM, FFIM, sph. LP, ISG correspondent respectivement au modèle d'Ising en champ aléatoire de l'anglais *Random Field Ising Model*, au modèle d'Ising complètement frustré, au modèle sphérique à longue portée où σ est un paramètre caractérisant la décroissance des interactions et au modèle d'Ising de type verre de spin (de l'anglais *Ising Spin Glass*). Pour les résultats de théorie des champs, $\epsilon = 4-d$. Pour le modèle de Cardy-Ostlund, $\tau = (T-T_g)/T_g$, T_g est la température de transition vitreuse et γ_E est la constante d'Euler (la plupart des valeurs sont extraites de [Cala05] et [Henk08]).

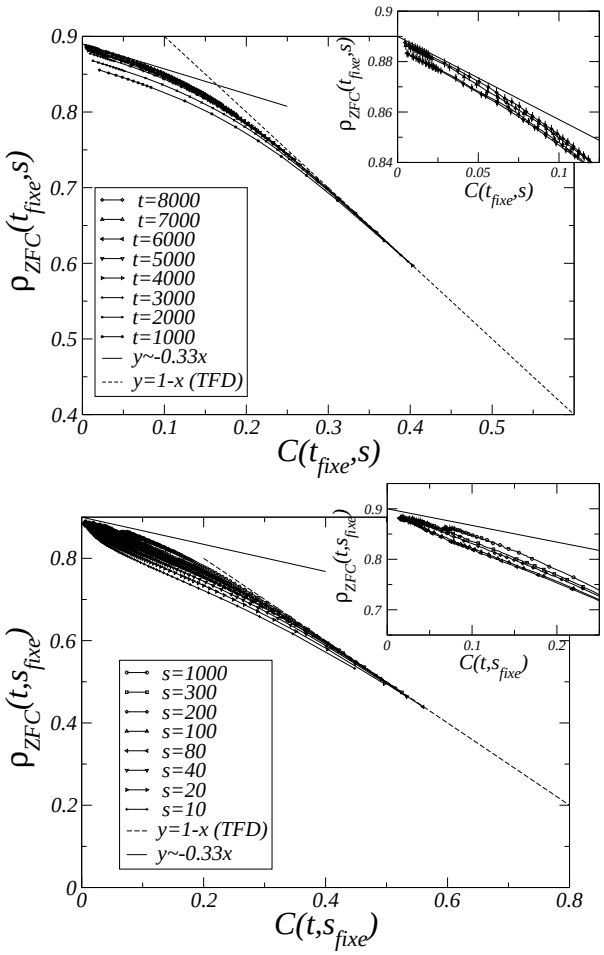


FIG. 4.12 – La fonction de réponse intégrée ZFC $\rho_{ZFC}(t,s)$ du modèle d'Ising $2d$ trempé depuis la phase haute température jusqu'à la température critique est tracée en fonction de l'autocorrélation de façon à mesurer le RFD qui correspond à la pente (suivant l'expression (4.48)) dans le régime de vieillissement *i.e.* pour les valeurs faibles de la fonction d'autocorrélation, à gauche des figures. En haut, l'analyse est effectuée de façon correcte pour un temps t qui est fixé et un temps s qui varie. En bas, l'analyse est effectuée de façon incorrecte pour un temps s qui est fixé et un temps t qui varie. Le premier cas permet de retrouver l'estimation du calcul direct $X_\infty = 0.330(5)$ tandis que le second mène à une valeur clairement incompatible. La droite en pointillés correspond à l'expression (4.49) obtenue avec le théorème fluctuation dissipation qui est valable dans le régime de quasi-équilibre *i.e.* pour les grandes valeurs de la fonction d'autocorrélation, à droite des figures.

s qui varie (en haut) et pour s fixé et t qui varie (en bas). La réponse intégrée TRM s'obtient en intégrant les deux membres de (4.44) toujours par rapport à s et pour un temps t fixé selon :

$$\rho_{TRM}(t,s) = k_B T \int_0^s R(t,u)du = \int_0^s X(t,u)\partial_u C(t,u)du\,. \tag{4.50}$$

Dans le régime de vieillissement, cette relation devient :

$$\begin{aligned}
\lim_{t,s\to\infty} \rho_{TRM}(t,s) &= X_\infty \int_0^s \partial_s C(t,u)du\,, && (4.51)\\
&= X_\infty \big(C(t,s) - \underbrace{C(t,0)}_{\ll C(t,s)}\big)\,, && (4.52)\\
&\approx X_\infty C(t,s)\,. && (4.53)
\end{aligned}$$

Il est également possible d'extraire la valeur asymptotique X_∞ en traçant $\rho_{TRM}(t,s)$ en fonction de $C(t,s)$. Dans le régime de quasi-équilibre, on obtient à partir de (4.50) en posant $X(t,u) = 1$:

$$\rho_{TRM}(t,s) = C(t,s) - \underbrace{C(t,0)}_{\ll C(t,s)} \approx C(t,s)\,. \tag{4.54}$$

4.3 Vieillissement du modèle XY $2d$

4.3.1 Propriétés à l'équilibre

Le hamiltonien du modèle XY bidimensionnel s'écrit :

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}'\rangle} \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}'} = -J \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}'\rangle} \cos\left(\theta_{\vec{r}} - \theta_{\vec{r}'}\right)\,, \tag{4.55}$$

où les spins $\vec{S}_{\vec{r}}$ possèdent deux composantes. Le théorème de Mermin-Wagner [Merm66, Hohe67] assure qu'un système de spins à symétrie continue ne peut présenter une aimantation macroscopique en l'absence de champ magnétique. Il n'existe donc pas de transition entre une phase ordonnée et une phase désordonnée. Cependant, le modèle sert de paradigme pour les transitions topologiques mises en évidence par Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless [Bere71, Kost73, Kost74]. On parle aussi de transition BKT (l'acronyme provient des initiales des auteurs précédents) ou transition de type XY.
Le modèle contient des défauts topologiques appelés vortex. Si un vortex est contenu à l'intérieur d'un contour orienté et fermé $\mathcal{C}$, alors la circulation autour de ce contour vaut :

$$\oint_{\mathcal{C}} d\vec{r}\vec{\nabla}\theta_{\vec{r}} = \pm 2\pi q\,, \tag{4.56}$$

où "q" est la charge ou vorticité d'un défaut topologique. Les charges $q = \pm 1$ sont favorisées par rapport aux charges plus élevées qui nécessitent plus d'énergie. Deux défauts topologiques de charges opposées $q = \pm 1$ sont représentés sur la figure 4.13.

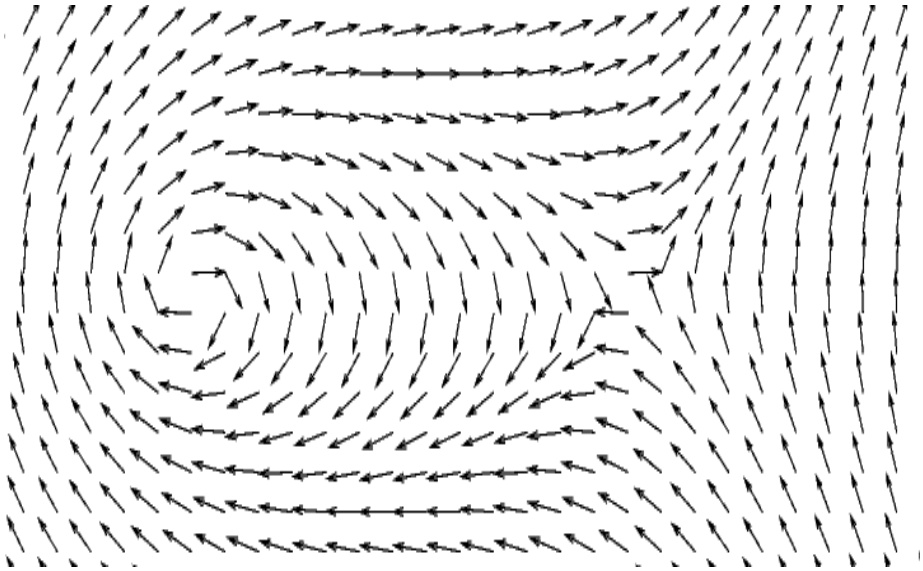


FIG. 4.13 – Paires de défauts topologiques de charges opposées $q = \pm 1$ dans le modèle XY. Sur un cercle de rayon R entourant un vortex, le gradient vérifie $|\vec{\nabla}\theta| = 1/R$.

Ces défauts topologiques sont libres dans la phase haute température et liés par paires de charges opposées dans la phase basse température. Cette transition s'effectue à la température de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless [Bere71, Kost73, Kost74] notée T_{BKT}^{XY}. L'énergie E_v d'un vortex isolé de charge q à l'intérieur d'un cercle de rayon R s'écrit :

$$E_v = \frac{J}{2} \int_a^R d\vec{r} \left(\vec{\nabla}\theta\right)^2 = \pi J q^2 \ln(R/a) \sim \ln(R/a)\,. \tag{4.57}$$

L'énergie d'un vortex isolé diverge logarithmiquement en fonction de la distance par rapport à son cœur, d'où l'écrantage à basse température. Cette expression permet également de comprendre pourquoi les charges ± 1 sont favorisées. L'entropie S_v associée à la création d'un vortex dans le cercle de rayon R est $S_v \sim \ln\left((R/a)^2\right)$ où $(R/a)^2$ donne l'ordre de grandeur du nombre de possibilités de placer le cœur sur l'un des sites. L'énergie libre F_v s'écrit :

$$F_v = E_v - TS_v \sim (\pi J - 2T)\ln(R/a)\,. \tag{4.58}$$

À haute température, le terme entropique l'emporte et les vortex sont libres tandis qu'à basse température, le terme énergétique l'emporte et il est préférable de lier les vortex par paires. Il est possible d'estimer grossièrement la température $T_{BKT}^{XY} = \frac{\pi J}{2} \approx 1.57J$ qui permet d'annuler F_v. Les estimations Monte Carlo les plus précises donnent $T_{BKT}^{XY} = 0.8929(1)$ [Hase97, Hase05a]. Pour des températures $T > T_{BKT}^{XY}$, les vortex sont libres dans le système, ce qui entraîne une décroissance exponentielle

de la corrélation spatiale. Pour des températures $T \leq T_{BKT}^{XY}$, l'appariement des vortex par paires écrante leurs interactions. La longueur de corrélation est infinie et la fonction de corrélation décroît algébriquement avec un exposant $\eta(T)$ qui dépend de la température. Pour des températures suffisamment basses, on a notamment une dépendance linéaire suivant l'équation (4.62). L'intervalle de températures $T \leq T_{BKT}^{XY}$ est appelé ligne critique. Puisque les spins sont corrélés à grande distance sans présenter de phase ordonnée, on parle aussi de phase QLRO de l'anglais *Quasi-Long Range Order*. À température suffisamment basse, l'écart angulaire entre les spins est faible. Les excitations consistent en des ondes de spins que nous avons représentées sur la figure 4.14. Dans cette approximation, on peut développer le hamiltonien (4.55) pour

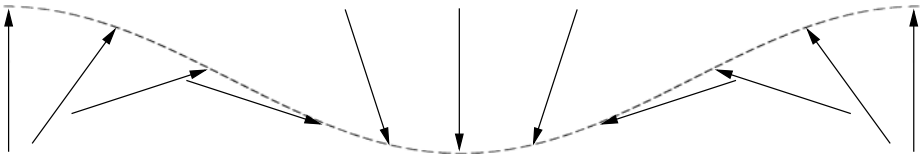


FIG. 4.14 – À faible température, l'écart angulaire entre les spins est faible. Les excitations du système consistent en des ondes de spin représentées ici en pointillés.

obtenir, à des constantes inessentielles près :

$$\mathcal{H}_{XY}^{SW} = \frac{J}{2} \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} (\theta_{\vec{r}} - \theta_{\vec{r}'})^2 \ . \tag{4.59}$$

Une transformation de Fourier mène à :

$$\mathcal{H}_{XY}^{SW} = \frac{J}{2} \sum_{\vec{k}} |\vec{k}|^2 |\theta_{\vec{k}}|^2 \, . \tag{4.60}$$

L'hamiltonien étant gaussien, les propriétés thermodynamiques se calculent analytiquement. On obtient notamment la fonction de corrélation :

$$\langle \vec{S}_{\vec{r}} \vec{S}_{\vec{r}'} \rangle_{th.} \sim |\vec{r} - \vec{r}'|^{-\eta(T)} \, , \tag{4.61}$$

où les moyennes thermiques d'équilibre sont désormais représentées par le symbole $\langle \ldots \rangle_{th.}$. L'exposant $\eta(T)$ s'exprime sous la forme :

$$\eta(T) = \frac{k_B T}{2\pi J} \, . \tag{4.62}$$

Ces quelques éléments permettent d'aborder la dynamique du modèle.

4.3.2 La dynamique du modèle XY

Lorsqu'on effectue une trempe depuis l'état fondamental, la dynamique est gouvernée par les ondes de spin. Supposons que la dynamique des variables angulaires θ

est déterminée par une équation de Langevin :

$$\frac{\partial \theta_{\vec{r}}(t)}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{H}_{XY}^{SW}[\theta]}{\delta \theta_{\vec{r}}} + \xi_{\vec{r}}(t)\,, \tag{4.63}$$

où $\xi_{\vec{r}}$ est un bruit gaussien de moyenne $\langle \xi_{\vec{r}}(t) \rangle = 0$ et de variance $\langle \xi_{\vec{r}}(t)\xi_{\vec{r}'}(t) \rangle = k_B T \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t')$. Il est commode de travailler dans l'espace de Fourier où l'équation de Langevin devient :

$$\frac{\partial \theta_{\vec{k}}(t)}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{H}_{XY}^{SW}[\theta]}{\delta \theta_{-\vec{k}}} + \xi_{\vec{k}}(t)\,. \tag{4.64}$$

La solution s'écrit :

$$\theta_{\vec{k}}(t) = \theta_{\vec{k}}(0)e^{-Jk^2 t/2} + \int_0^t dt' \xi_{\vec{k}}(t') e^{Jk^2(t'-t)/2}\,, \tag{4.65}$$

où les conditions initiales correspondant à l'état fondamental ferromagnétique à température nulle sont $\theta(\vec{k}, 0) = 0$. La fonction d'autocorrélation $C(t, s)$ s'écrit :

$$C(t,s) = \langle \vec{S}_{\vec{r}}(t) \cdot \vec{S}_{\vec{r}}(s) \rangle = \langle \cos(\theta(\vec{r},t) - \theta(\vec{r},s)) \rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle (\theta(\vec{r},t)-\theta(\vec{r},s))^2 \rangle}\,, \tag{4.66}$$

où on a utilisé le théorème de Wick pour obtenir l'exponentielle puisque le bruit est gaussien. Le calcul se conclut par (voir [Bert01] par exemple) :

$$C(t,s) \sim (t-s)^{-\eta/2} \left(\frac{t+s}{\sqrt{ts}} \right)^{\eta/2}\,. \tag{4.67}$$

Cette forme d'échelle a été vérifiée numériquement [Bert01, Abri04b]. L'autoréponse se comporte comme [Bert01] :

$$R(t,s) \sim (t-s)^{-1-\eta/2} \left(\frac{t+s}{\sqrt{ts}} \right)^{\eta/2}\,. \tag{4.68}$$

Cette dernière expression combinée à la dérivée partielle de l'autocorrélation (4.67) mène au rapport fluctuation-dissipation :

$$X(t,s) = \frac{k_B T R(t,s)}{\partial_s C(t,s)} \sim \frac{s(t+s)}{t^2 - 4ts - s^2}\,. \tag{4.69}$$

On constate que le RFD présente une singularité lorque le dénominateur s'annule *i.e.* pour $t_0/s_0 = 2 + \sqrt{5}$.
Lors d'une trempe depuis la phase haute température la dynamique tend à annihiler les vortex libres en les regroupant par paires de charges opposées. Les formes des fonctions d'échelle restent identiques, mais on s'attend à une modification de croissance de la longueur caractéristique due à la présence de défauts topologiques dans l'état initial. Il est possible d'obtenir les corrections des variables d'échelle en considérant les arguments phénoménologiques suivants [Yurk93, Rute95b, Bray94]. Commençons par déterminer le coefficient de friction associé au mouvement des vortex. Pour cela,

on écrit le taux de dissipation de l'énergie E_p d'une paire de vortex séparés par une distance R au-delà de laquelle leur effet est écranté comme :

$$\frac{dE_p}{dt} = \int_a^R d^2\vec{r}\frac{\delta E}{\delta\theta}\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\int_a^R d^2\vec{r}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 = -v^2\int_a^R d^2\vec{r}\left(\frac{\partial\theta_v}{\partial x}\right)^2 = -\gamma_v v^2\,. \tag{4.70}$$

On a utilisé (4.63) pour écrire la deuxième égalité. La troisième égalité s'obtient en remarquant que la configuration du champ autour d'un vortex isolé qui se déplace à la vitesse v dans la direction x peut s'écrire comme $\theta(x,y,t) = \theta_v(x-vt,y)$ par changement de repère galiléen. Enfin, la quatrième égalité s'obtient en posant $\gamma_v = \int_a^R d^2\vec{r}\left(\vec{\nabla}\theta_v\right)^2$ qui est un coefficient de frottement. Ce coefficient de frottement fait intervenir le gradient du champ qui se comporte comme $|\vec{\nabla}\theta_v| \sim 1/R$ autour d'un cercle contenant un vortex. Une intégration mène à :

$$\gamma_v \sim \ln(R/a)\,. \tag{4.71}$$

La force d'attraction qu'exerce un vortex sur son homologue de charge opposée dérive de l'énergie de paire E_p selon la relation $F \sim -dE_p/dR$, ce qui nous permet d'écrire la vitesse comme :

$$v = dR/dt = F/\gamma_v \sim 1/(R\ln(R/a))\,. \tag{4.72}$$

Dans un système composé de plusieurs paires vortex-antivortex, on assimile R à $\xi(t)$, la distance moyenne au temps t séparant des vortex de charges opposées. Elle peut être elle-même assimilée à la longueur de corrélation car c'est la seule longueur caractéristique à l'intérieur du système. On obtient son comportement temporel en intégrant l'expression (4.72) :

$$\xi(t) \sim \left(\frac{t}{\ln t}\right)^{1/2}\,. \tag{4.73}$$

Cela nous permet notamment d'écrire la densité de défauts topologiques. Puisque ce sont des défauts ponctuels sans extension spatiale, on a en moyenne un défaut topologique pour une surface $\xi^2(t)$. Donc leur densité se comporte comme :

$$\rho(t) \sim \xi^{-2}(t) \sim \frac{\ln t}{t}\,. \tag{4.74}$$

La croissance anormale de la longueur caractéristique fut d'abord établie pour une trempe à $T = 0$ [Yurk93, Rute95b, Bray94] avant d'être supposée vraie pour toutes températures $T \leq T_{BKT}^{XY}$ [Bray00]. Plusieurs études numériques ont confirmé cette relation [Roja99, Bert01, Abri04b, Zhen03]. Cet exposant dynamique est identique à celui obtenu pour une trempe depuis l'état fondamental jusqu'à une température $T \leq T_{BKT}$ [Cug94, Rute95a]. L'autocorrélation (4.67) devient :

$$C(t,s) \sim (t-s)^{-\eta/2}\mathcal{C}\left(\frac{t\ln s}{s\ln t}\right)\,. \tag{4.75}$$

La fonction d'échelle $\mathcal{C}(x)$ vérifie :

$$\mathcal{C}(x) \underset{t,s\to\infty}{\sim} x^{-\phi}\,, \tag{4.76}$$

où ϕ est un exposant hors équilibre. L'autoréponse (4.68) devient :

$$R(t,s) \sim (t-s)^{-1-\eta/2}\mathcal{R}\left(\frac{t\ln s}{s\ln t}\right) . \tag{4.77}$$

où $\mathcal{R}(x)$ est une fonction d'échelle qui se comporte comme (4.76) :

$$\mathcal{R}(x) \underset{t,s\to\infty}{\sim} x^{-\phi} . \tag{4.78}$$

On constate numériquement que le rapport fluctuation-dissipation prend une valeur asymptotique finie [Abri04a] :

$$X(t,s) = X_\infty . \tag{4.79}$$

Au même titre que le modèle d'Ising, il est raisonnable de supposer cette grandeur universelle.

Chapitre 5

Le vieillissement du modèle d'Ising complètement frustré $2d$

Le but de ce chapitre est d'étudier l'influence des défauts topologiques dans le vieillissement du modèle d'Ising complètement frustré $2d$ ou FFIM (de l'anglais *Fully-Frustrated Ising Model*) lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique par dynamique Monte Carlo locale. Dans une première section, nous présentons le modèle : les propriétés à l'équilibre et la controverse sur la présence de défauts topologiques lors de la relaxation depuis un état initial désordonné. Dans la deuxième section, nous présentons une étude préalable de la dynamique à l'équilibre dans la phase haute température et à la température critique. Les résultats dans la phase haute température permettent d'avoir une intuition sur la présence de défauts topologiques libres. À la température critique, ils permettent de s'affranchir de leur influence et d'estimer précisément l'exposant dynamique. Finalement, dans la troisième partie, nous présentons nos résultats après une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique afin d'étudier le vieillissement. Nous mettons notamment en évidence la croissance de la longueur caractéristique en étudiant les fonctions de corrélation et le rapport fluctuation-dissipation. Cette croissance est modifiée par des corrections logarithmiques, signature de la présence de défauts topologiques comme pour le modèle XY.

5.1 Le modèle d'Ising complètement frustré $2d$ (FFIM)

On parle de frustration lorsque les degrés de liberté microscopiques d'un système ne peuvent minimiser simultanément leurs interactions dans l'état fondamental [Toul77, Harr08]. On a représenté sur la figure 5.1 des plaquettes frustrées carrée et triangulaire pour le modèle d'Ising dans l'état fondamental. On ne peut pas trouver d'arrangement où toutes les liaisons sont satisfaites. Pour la plaquette triangulaire antiferromagnétique, les liaisons sont homogènes. La frustration est le résultat de la topologie du réseau. Pour la plaquette carrée, les liaisons sont inhomogènes et la frustration provient de la compétition des interactions ferro et antiferromagnétiques. Le produit des

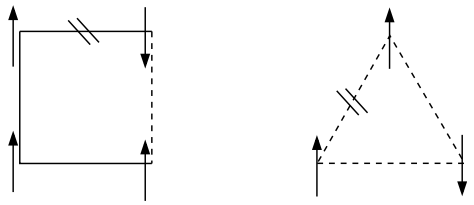


FIG. 5.1 – Exemple de plaquettes frustrées carrée et triangulaire avec des spins de type Ising dans l'état fondamental. Les lignes continues représentent des couplages ferromagnétiques qui privilégient énergétiquement l'alignement des spins. Les lignes pointillées représentent des couplages antiferromagnétiques qui privilégient au contraire des spins de sens opposés. Il existe nécessairement une liaison insatisfaite représentée par des hachures.

liaisons autour d'une plaquette frustrée vérifie [Toul77] :

$$\prod_{\square} \operatorname{sign} J_{ij} = -1 \,. \tag{5.1}$$

5.1.1 FFIM à l'équilibre

Le modèle d'Ising complètement frustré ou FFIM correspond à un modèle d'Ising où toutes les plaquettes sont frustrées. Par la suite, on regroupe sous le nom FFIM le modèle d'Ising sur réseau triangulaire antiferromagnétique ou ATIM de l'anglais *Antiferromagnetic Triangular Ising Model* et sur réseau carré complètement frustré ou FSIM de l'anglais *Fully-Frustrated Square Ising Model*. Le réseau du ATIM est représenté à gauche sur la figure 5.2. Le réseau du FSIM peut se présenter sous plusieurs configurations. Nous présentons les configurations périodiques qui sont le plus utilisées dans la littérature sur la figure 5.2 : la configuration zigzag et la configuration domino empilé (de l'anglais *pile-up domino*) et qu'on abrège simplement par configuration domino. Contrairement aux verres de spins comme le modèle de Edwards et Anderson [Edwa75] où la frustration des plaquettes est aléatoire, ces modèles permettent d'étudier la contribution de la frustration sans le désordre. La simplification du problème se manifeste à deux dimensions car le ATIM et le FSIM sont exactement solubles à l'équilibre.

Le ATIM à l'équilibre

Le ATIM a pour hamiltonien [Wann50] :

$$\mathcal{H}_{ATIM} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \,, \tag{5.2}$$

où la somme est effectuée entre les plus proches voisins d'un réseau triangulaire antiferromagnétique. En champ nul, la fonction de partition se calcule exactement par

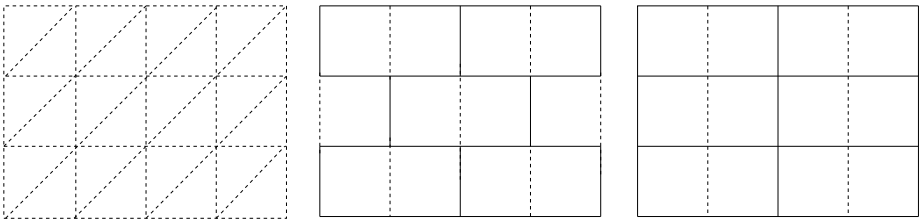


FIG. 5.2 – Trois réseaux bidimensionnels complètement frustrés. De gauche à droite : le réseau triangulaire antiferromagnétique, le réseau zigzag et le réseau domino. Les lignes continues et pointillées représentent respectivement des couplages ferro et antiferromagnétiques.

la méthode des matrices de transfert [Wann50]. L'énergie libre donne lieu à une singularité à la température critique $T_c = 0$ [Wann50] qui correspond à une transition continue. On peut également calculer l'entropie par site de l'état fondamental qui est finie et vaut :

$$s(T_c = 0) \approx 0.32306\ldots \tag{5.3}$$

La valeur donnée dans l'article pionnier de Wannier est légèrement supérieure due à une erreur d'estimation numérique d'une intégrale. Ce résultat montre que l'état fondamental est obtenu à partir d'un nombre de configurations exponentiellement grand en fonction de la taille du système. La fonction de corrélation se calcule exactement en utilisant la méthode du pfaffien. Au point critique, le résultat s'écrit [Step64] :

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{1/2}} \cos\left(\frac{2\pi}{3}\frac{1}{r}\right) . \tag{5.4}$$

C'est une fonction oscillante à l'intérieur d'une enveloppe qui décroît comme $1/r^{1/2}$, d'où $\eta = 1/2$. Pour $T \neq 0$, $C(r)$ oscille à l'intérieur d'une enveloppe qui décroît exponentiellement avec r. On a donc un système dont la longueur de corrélation diverge à l'approche du point critique. Cette valeur de l'exposant η a été confirmée par simulations Monte Carlo, en particulier par l'étude des effets de taille finie de la susceptibilité [Zhan94].

Le ATIM appartient à la classe d'universalité de la première transition en partant de la phase haute-température du modèle d'horloge à six états [Alex80] *i.e.* un modèle XY avec un terme de brisure de symétrie d'ordre six. Or un tel terme de brisure de symétrie n'est pas pertinent [José77] et donc la transition est de type XY. On peut aussi montrer l'existence d'une application entre le ATIM et un modèle *Solid-On-Solid* (SOS) [Blöt82]. Or le modèle SOS peut lui-même être appliqué sur le modèle XY. Cela confirme une transition de type XY pour le ATIM. L'application du ATIM sur le SOS est obtenue en traçant une liaison entre les interactions satisfaites. Puisque dans l'état fondamental, chaque plaquette triangulaire possède une et une seule interaction insatisfaite, on obtient un réseau recouvert par des losanges comme l'illustre la figure 5.3. Puis on associe une différence de hauteur relative entre les sites connectés et les sites

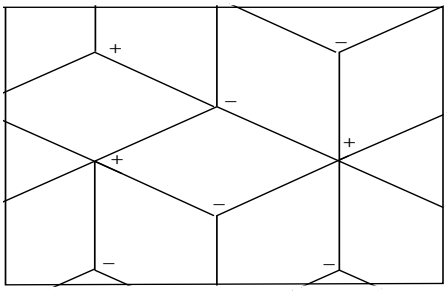


FIG. 5.3 – Les signes plus et moins représentent les spins. Lorsqu'on associe une liaisons entre les interactions satisfaites ($S_iS_j = -1$) dans l'état fondamental du ATIM, on obtient un recouvrement du réseau par des losanges. En associant une hauteur relative entre les sites connectés et non connectés, on peut exprimer l'énergie du ATIM en terme d'un hamiltonien *Solid-On-Solid* (SOS) [Blöt93].

non connectés, ce qui permet d'exprimer l'énergie du ATIM en terme d'un hamiltonien SOS avec interactions entre plus proches voisins soumis à la contrainte du recouvrement par les losanges.
Le diagramme de phase dans le plan $h-T$ (où $h = H/(k_BT)$ est le champ magnétique réduit) a été établi par la combinaison de méthodes exactes et de calculs numériques par la méthode des matrices de transfert [Blöt93]. Ce diagramme de phase est présenté sur la figure 5.4. On constate la présence d'une ligne critique à température nulle en présence d'un champ magnétique qui se termine pour une valeur de champ $h_{BKT} = 0.266(10)$. Sur cette ligne, le système donne lieu à une transition de type Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless [Bere71, Kost73, Kost74] qui a déjà été mise en évidence en utilisant la méthode des matrices de transfert et des simulations Monte Carlo [Blöt90]. Pour des champs $h > h_{KT}$, le système présente une phase ordonnée et une phase désordonnée. La transition de phase est du second ordre, dans la même classe d'universalité que le modèle de Potts à trois états.

Le FSIM à l'équilibre

Le FSIM a pour hamiltonien [Vill77a] :

$$\mathcal{H}_{FSIM} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j \,, \tag{5.5}$$

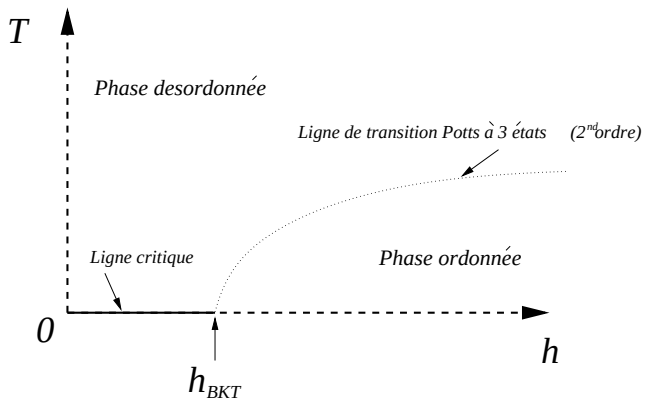


FIG. 5.4 – Diagramme de phase du ATIM dans le plan $h - T$ [Blöt93]. Sur la ligne critique (pour $T = 0$ et $h < h_{BKT}$) le système donne lieu à une transition de type Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless [Bere71, Kost73, Kost74]. Puis, pour $h > h_{BKT}$, le système présente une phase désordonnée et une phase ordonnée avec une transition du second ordre dans la classe d'universalité du modèle de Potts à trois états.

où la somme est effectuée entre les plus proches voisins d'un réseau carré. Les constantes de couplage sont choisies de manière à assurer la frustration complète du réseau. Il existe une transformation de jauge triviale entre les configurations de frustration qui laissent la fonction de partition et donc les propriétés thermodynamiques inchangées [Matt76, Toul77, Frad78]. La fonction de partition du modèle se calcule exactement en champ nul par la méthode du pfaffien et elle présente une singularité pour $T_c = 0$ [Vill77a] correspondant à une transition continue comme le ATIM. Dans la limite thermodynamique, l'entropie par site est finie car il existe là aussi un nombre exponentiellement grand d'états fondamentaux en fonction de la taille du système. Elle est déterminée exactement en comptant le nombre de possibilités de placer une et une seule liaison insatisfaite par plaquette. Le résultat vaut [Fish61] :

$$s(T_c = 0) = G/\pi \approx 0.29156\ldots\,, \tag{5.6}$$

où G est la constante de Catalan. Pour illustration, des exemples d'états fondamentaux typiques sont présentés sur la figure 5.5 pour les configurations de frustration domino et zigzag. Il est possible de déterminer analytiquement le comportement en température de la longueur de corrélation $\xi(T)$ à l'approche de la température critique [Forg80]. Ce comportement est exponentiel. De plus, une étude numérique récente conjecture une amplitude $1/2$ [Luki06], ce qui mène à l'expression :

$$\xi(T) \approx \frac{1}{2} e^{2J\beta}\,. \tag{5.7}$$

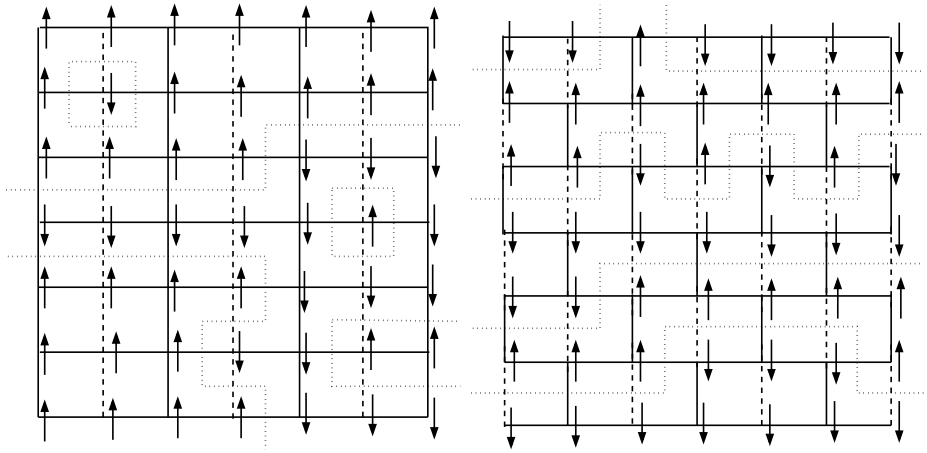


FIG. 5.5 – Exemple d'états fondamentaux pour le FSIM en configuration domino (à gauche) et zigzag (à droite) pour des conditions de bords périodiques. Les lignes avec des points représentent les frontières entre domaines ferromagnétiques. Pour la configuration zigzag, les états fondamentaux sont formés de boucles ferromagnétiques. La configuration domino présente des îlots de spins d'aimantation opposée, parfois constitués d'un seul spin.

Le comportement de la longueur de corrélation a également été déterminé dans le cadre du comportement déchelle étendu pour toute température [Katz08] :

$$\xi(T) = \tanh^{1/2}(\beta)\,(1-\tanh(\beta))^{-1}\ , \tag{5.8}$$

ce qui mène à l'expression (5.7) pour $\beta \to \infty$. La fonction de corrélation est connue analytiquement à $T_c = 0$ [Forg80]. Elle décroît algébriquement avec un exposant $\eta = 1/2$, comme pour le ATIM. Cette valeur a été vérifiée par simulations Monte Carlo en étudiant les effets de taille finie [Kand92]. La susceptibilité χ et le quatrième moment de l'aimantation C_4 divergent au point critique avec la taille du système selon les relations respectives $\chi \sim L^{2-\eta}$ avec $\eta = 0.507(9)$ et $C_4 \sim L^{d+4-2\eta}$ avec $d - 2\eta = 1.03(5)$, en accord avec la valeur exacte $\eta = 1/2$.
De plus, la partie singulière f_s de l'énergie libre des deux modèles se comporte comme le ATIM selon [Forg80] :

$$f_s \sim e^{-4J\beta}\,. \tag{5.9}$$

Or la transformation homogène de l'énergie libre (1.54) permet d'écrire en champ nul $f_s(t,0) \sim b^{-d} f_s(b^{y_t} t, 0) \sim t^{\nu d} f_s(1,0) \sim \xi^d$. Cette relation est bien vérifiée par (5.7) et (5.9). Ces faits suggèrent que le FSIM et le ATIM appartiennent à la même classe d'universalité à l'équilibre, bien qu'aucune preuve rigoureuse n'existe.
Il existe différentes façons de généraliser le FSIM. Par exemple, si on définit par J et J' les intensités respectives des liaisons ferro et antiferromagnétiques, alors il est possible

de déterminer le diagramme de phase dans le plan (J/J',T/J) pour les configurations zigzag et domino de la figure 5.2 [Andr79]. On peut généraliser davantage le modèle domino en introduisant des interactions ferromagnétiques horizontales et verticales de différentes intensités [Vill80]. Ce modèle donne lieu au phénomène de réentrance : il présente une phase ferromagnétique pour des températures intermédiaires $0 < T < T_c$ et une phase paramagnétique pour toute autre température et en particulier pour $T = 0$. Le phénomène de réentrance a également été observé dans le modèle de Potts $2d$ complètement frustré à trois états en configuration de frustration de type domino par la méthode numérique des matrices de transfert [Fost01]. On peut également diluer la frustration du modèle domino en augmentant le nombre n de plaquettes entre deux colonnes possédant des liaisons antiferromagnétiques (le cas particulier $n = 2$ de ce modèle est donné par la configuration domino, à droite sur la figure 5.2) [Wu03]. Il est alors possible de déterminer la température critique, l'énergie et l'entropie de l'état fondamental en fonction de n par la méthode des matrices de transfert.

5.1.2 Controverse concernant la dynamique du FFIM

À l'équilibre, le FFIM donne lieu à une transition BKT. Dans la phase haute température, il existe donc des défauts topologiques de charges opposées qui s'associent par paires au point critique. Ces défauts topologiques correspondent à des plaquettes qui ne sont pas dans leur état fondamental [Moor99]. Lors de la relaxation depuis la phase haute température jusqu'au point critique, puisque la dynamique est gouvernée par les mouvements irréversibles des parois de domaine, on s'attend à ce que les défauts topologiques perturbent la croissance des domaines comme dans le cas du modèle XY où on peut montrer que (voir la section 4.3) :

$$\xi(t) \sim \left(\frac{t}{\ln t}\right)^{1/2} . \tag{5.10}$$

La dynamique est ralentie par des défauts topologiques. Ces corrections ont été mises en évidence par Moore *et al* en mesurant notamment la densité de défauts topologiques par simulations Monte Carlo qui se comporte selon l'expression (4.74) $\rho(t) \sim \xi^{-2}(t) \sim \frac{\ln t}{t}$ [Moor99]. Ces mêmes auteurs ont également réalisé une moyenne temporelle des spins autour de tels défauts topologiques qui permet de retrouver la forme des vortex du modèle XY. Ces défauts sont illustrés sur la figure (5.6) d'après l'article de Moore *et al* [Moor99]. L'autre scénario [Kim03-07] consiste en une dynamique sans défauts topologiques semblable au modèle d'Ising comme nous l'avons présenté dans le chapitre 4 donc sans corrections logarithmiques dans la croissance de la longueur caractéristique. Les simulations Monte Carlo de Kim *et al* [Kim03-07] mènent à une croissance de la longueur caractéristique de la forme :

$$\xi(t) \sim t^{1/z'_c} , \tag{5.11}$$

où l'exposant dynamique prend la valeur $z'_c = 2.33(5)$. Leurs mesures de la densité de défauts topologiques ne leur a pas permis pas de retrouver les corrections logarithmiques de Moore *et al* [Moor99]. Or la transition de type BKT à l'équilibre devrait se refléter dans la dynamique. Kim *et al* ont également mesuré la croissance de la

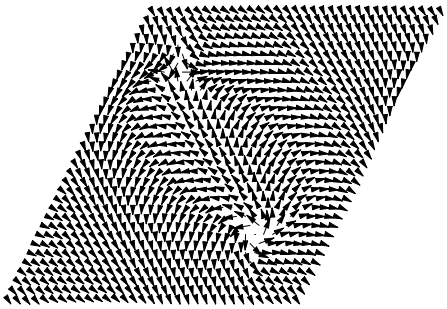


FIG. 5.6 – Cette figure est obtenue en moyennant temporellement les spins du ATIM autour de défauts topologiques *i.e.* des plaquettes qui ne sont pas dans l'état fondamental (d'après l'article de Moore *et al* [Moor99]).

longueur caractéristique par relaxation à partir d'un état fondamental dominant (qui contribue fortement à l'entropie) et trouvent un exposant dynamique $z_c = 2$. Ces auteurs concluent à un désaccord de l'exposant dynamique en fonction de l'état initial. Or l'exposant dynamique est supposé être une grandeur liée à la classe d'universalité du système. Ne pourrait-on pas remédier à l'incompatibilité entre les exposants critiques z_c et z'_c en tenant compte de l'influence des défauts topologiques ?

5.2 Dynamique à l'équilibre

Avant d'étudier le vieillissement du FFIM, nous réalisons une étude préalable de la dynamique à l'équilibre d'une part à température finie et d'autre part à la température critique $T_c = 0$. Cette partie nous permet dans un premier temps de cerner l'influence des défauts topologiques qui sont libres lors de la dynamique dans la phase haute température. Nous obtenons des résultats qui suggèrent un ralentissement de la dynamique par des corrections logarithmiques. Ce fait permet aussi de comprendre le changement de comportement de la relaxation rencontré dans le FSIM [Fier97-99] lorsque la température est réduite (on parle alors d'anomalie dynamique). Dans un second temps, la dynamique à température nulle nous permet de nous affranchir de l'effet des défauts topologiques qui sont alors écrantés par paires de charges opposées. Ce protocole permet d'obtenir une valeur précise de l'exposant dynamique, compatible avec la valeur $z = 2$ du modèle XY.

5.2.1 Dynamique à température finie

Pour des températures proches de zéro, il a été observé que la relaxation de l'autocorrélation de l'énergie du FSIM [Fier97-99] cesse d'être exponentielle et adopte un comportement de type exponentielle étirée. Ce changement dans la relaxation est appelé anomalie dynamique. Cette anomalie dynamique a également été observée dans une réalisation expérimentale récente du ATIM à partir de monocouche de colloïdes [Han08]. Ce comportement s'observe aussi dans les verres de spins en dimensions deux [McMi83] et trois [Ogie85].
Il a été proposé d'interpréter cette anomalie pour le FSIM en terme de percolation [Camp94, Scar97, Glot95] d'amas de type Fortuin-Kasteleyn [Fort72] et Coniglio-Klein [Coni80]. Il est en effet possible de réécrire le hamiltonien du FSIM comme un modèle de percolation complètement frustré [Coni91]. Ce modèle présente deux points critiques [Pezz97, Fier97-99]. Le premier intervient à une température T_p qui correspond à la percolation des amas. Le second point critique intervient à la température de transition des spins T_c. À deux dimensions, il existe donc un point critique à température finie à la température $T_p = 1.701(1)$ soit $\beta_p = 0.58789(35)$ [Fier97-99]. Cette transition appartient à la classe d'universalité de la percolation [Fier97-99] *i.e.* la classe d'universalité du modèle de Potts à un état. Dans le cadre de ce scénario, il est donc possible de prédire exactement à partir de quelle température l'anomalie a lieu.
Ne pourrait-on pas expliquer simplement cette anomalie par la présence de défauts topologiques qui sont libres dans la phase haute température et qui entraînent un ralentissemement de la dynamique par friction ?
Nous avons choisi d'étudier la dynamique *via* la fonction d'autocorrélation spin-spin du FSIM et du ATIM. Cette étude est réalisée à l'équilibre dans la phase haute température. L'hypothèse d'échelle dynamique nous permet d'écrire l'autocorrélation $C_T(t-s)$ à la température T sous la forme [Hal67-69, Hohe77] :

$$C_T(t-s) = \mathcal{A}(\beta)\frac{D((t-s)/\tau)}{(t-s)^{\eta/z}}\,, \tag{5.12}$$

où $\mathcal{A}(\beta)$ est une amplitude qui peut dépendre de β et τ est le temps de relaxation. Cette relation s'obtient de façon heuristique en faisant l'analogie avec la corrélation spatiale à l'équilibre en remplaçant r par $t^{1/z}$ et la longueur de corrélation ξ par le temps de relaxation $\tau^{1/z}$. La fonction $D(x)$ est bien approchée par une exponentielle à haute température, mais peut aussi avoir une forme plus compliquée de type exponentielle étirée. Notons que puisque nous sommes à l'équilibre, l'invariance par translation temporelle nous permet d'écrire l'autocorrélation comme une fonction de la différence $t-s$. En première approximation, on suppose que :

$$D(x) \sim e^{-x/\tau(\beta)}\,, \tag{5.13}$$

où $\tau(\beta)$ un temps caractéristique qui diverge en fonction de la température selon l'expression :

$$\tau(\beta) \sim \xi_c^z(\beta)\,. \tag{5.14}$$

Puisque τ tend vers l'infini lorsque T tend vers zéro, la forme (5.12) permet bien de retrouver une décroissance algébrique à la température critique $T_c = 0$:

$$C_0(t-s) \sim \frac{1}{(t-s)^{\eta/z}} \,. \tag{5.15}$$

La présence de défauts topologiques libres dans la phase haute température devrait se manifester par un ralentissement de la dynamique par l'intermédiaire de corrections logarithmiques dans la contribution (5.13) :

$$D(x) \sim e^{-(x/\ln x)/\tau(\beta)} \,. \tag{5.16}$$

Les simulations ont été effectuées pour des températures comprises entre $\beta = 0.15$ et $\beta = 1$ par pas de 0.05. Cet intervalle contient la température de transition de percolation $\beta_p = 0.58789(35)$ à partir de laquelle l'anomalie dynamique doit avoir lieu [Fier97-99]. La thermalisation est rapide puisque nous sommes à des températures suffisamment éloignées du point critique. Les réseaux sont thermalisés en quelques dizaines d'itérations Monte Carlo locales pour les températures les plus hautes et quelques centaines pour les températures les plus basses. Nous avons utilisé un réseau de dimensions 192×192, les moyennes ont été effectuées sur 1000 histoires thermiques et le réseau carré possède une frustration de type zigzag. Nous avons adapté le temps final pour chaque température suivant la rapidité de la décroissance de l'autocorrélation. Ces temps sont du même ordre de grandeur que dans l'étude [Fier97-99]. Les calculs ont nécessité en moyenne environ 24h par température sur un processeur *Xeon quad-core* de fréquence 2GHz. Nous mesurons l'autocorrélation spin-spin $C_T(t-s)$ à la température T suivant la définition :

$$C_T(t-s) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \langle S_i(t) S_i(s) \rangle \,, \tag{5.17}$$

où $\langle \ldots \rangle$ signifie une moyenne sur les histoires thermiques et $N = L \times L$ est le nombre de spins du réseau.

Nous avons tracé sur la figure 5.7 la fonction $D(t-s) = C_T(t,s)/C_0(t,s)$ en fonction de $(t-s)/\ln(t-s)$. Tout d'abord, on remarque l'absence de vieillissement puisque, pour une température donnée, les courbes pour des temps d'attente s différents se superposent lorsqu'on les trace en fonction de $(t-s)/\ln(t-s)$: il y a bien invariance par translation temporelle comme on s'y attend à l'équilibre. Ici, le temps d'attente s signifie le temps écoulé depuis la fin de la thermalisation. On constate ensuite une relaxation exponentielle même pour des températures inférieures à la température de percolation T_p. Nous réalisons une interpolation du temps de relaxation τ à partir des donnnées de la figure 5.7 en supposant la forme (5.16) vraie en première approximation. Le résultat de l'interpolation est tracé sur la figure 5.8 en fonction de la température inverse β. Le comportement du temps caractéristique en fonction de β s'interprète simplement. D'une part, le comportement de la longueur de corrélation du FFIM en fonction de la température est exponentiel selon (5.7). D'autre part, on s'attend à une relation entre τ et ξ de la forme (5.14) avec un exposant dynamique $z_c = 2$ comme pour le modèle XY. D'où une relation de la forme :

$$\tau \sim e^{4\beta J} \,. \tag{5.18}$$

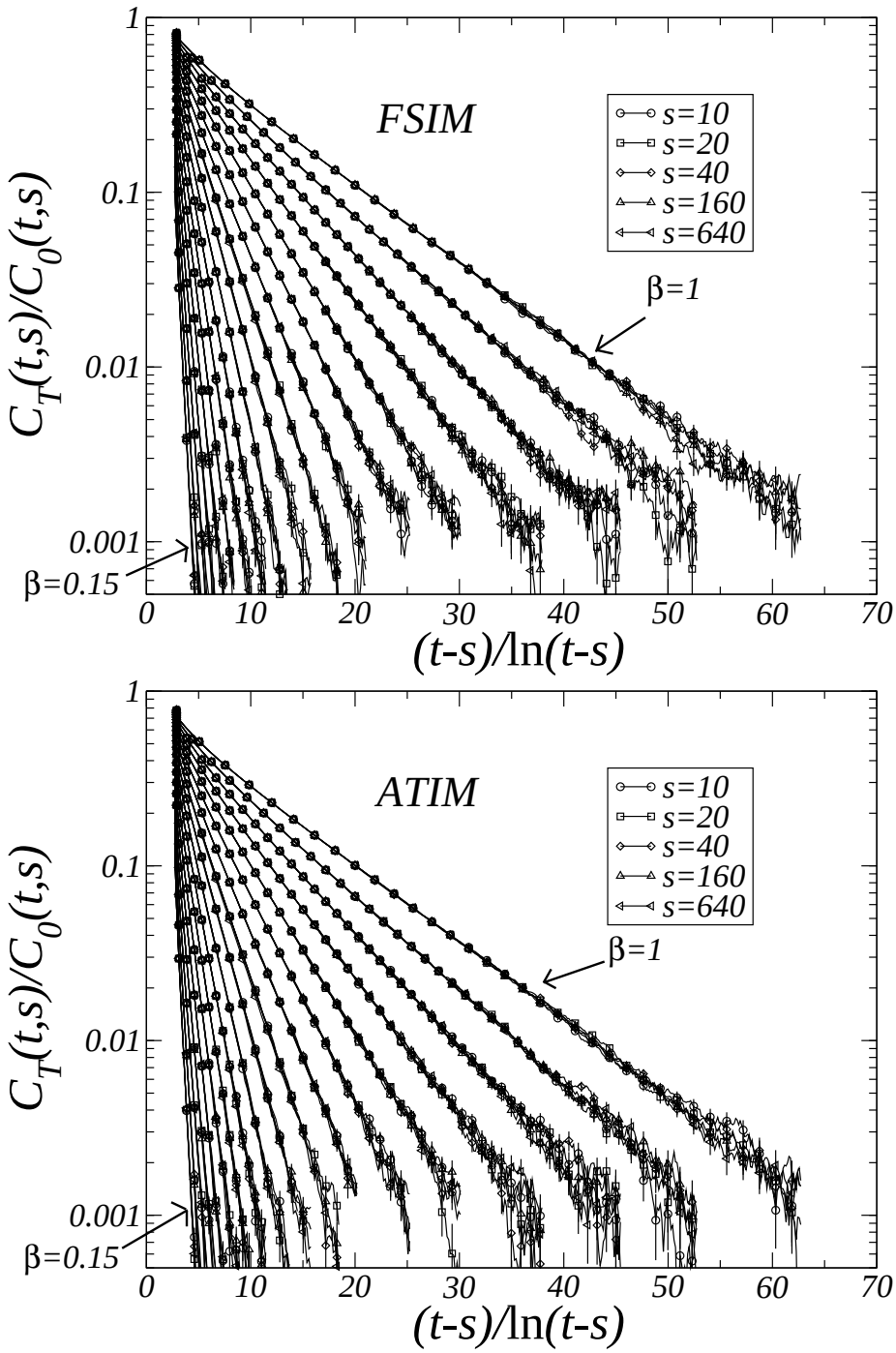


FIG. 5.7 – Nous représentons les résultats pour la fonction d'échelle $D(t-s) = C_T(t,s)/C_0(t,s)$ de l'autocorrélation spin-spin à l'équilibre et à températures finies comprises entre $\beta = 0.15$ et $\beta = 1$ par pas de 0.05 (de bas en haut pour un graphe donné). Nous avons utilisé l'expression analytique exacte $C_0 = (t-s)^{-0.25}$. Les données sont tracées pour le FSIM (en haut) et le ATIM (en bas) en fonction de $(t-s)/\ln(t-s)$ pour différents temps d'attente s écoulés depuis la fin de la thermalisation. On constate l'invariance par translation temporelle car toutes les courbes se superposent pour une température donnée lorsqu'on change le temps d'attente s, comme on s'y attend à l'équilibre. La relaxation est bien approchée par une décroissance exponentielle, même au-dessus de la température inverse de percolation $\beta_p = 0.58789(35)$.

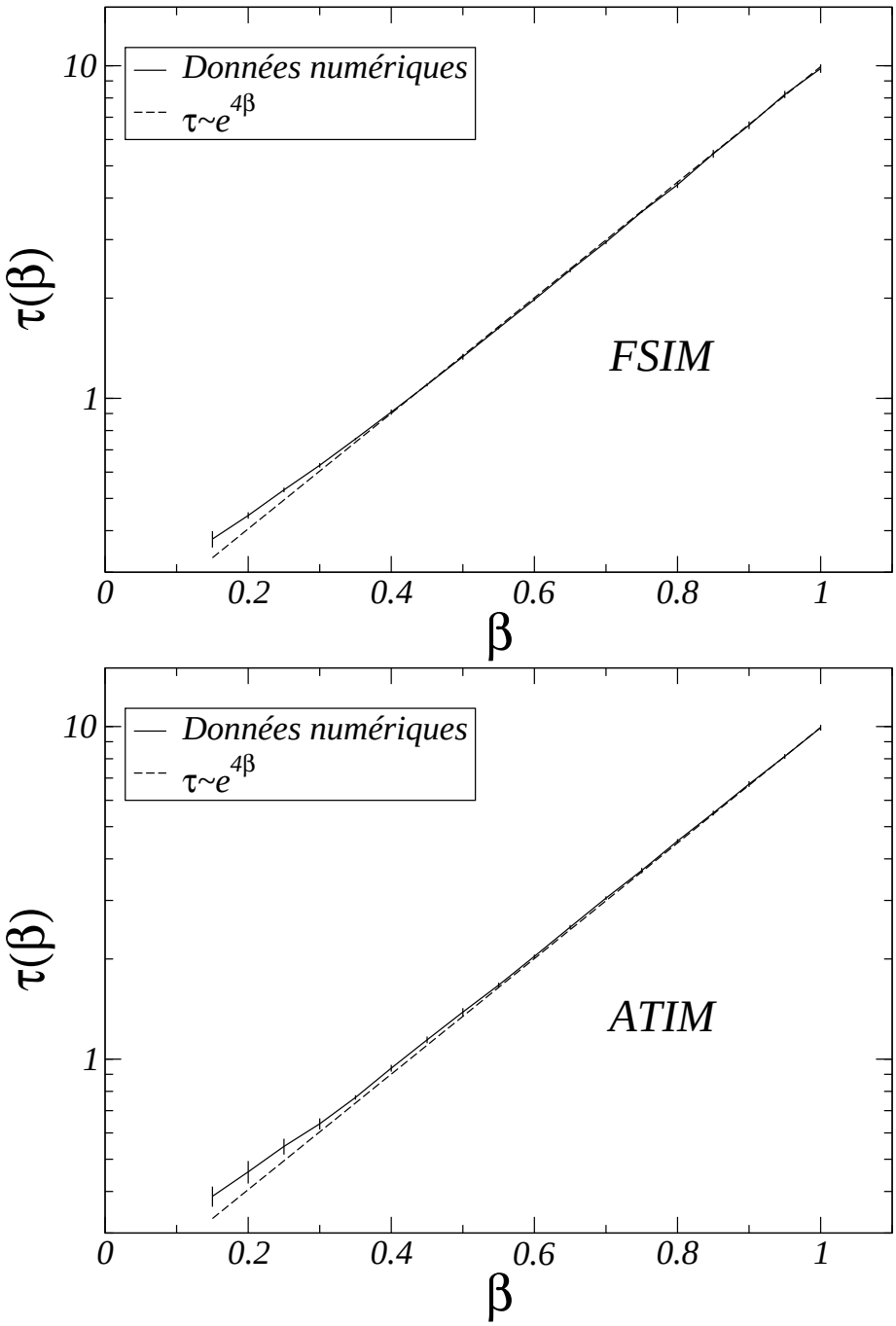


FIG. 5.8 – Nous avons tracé le temps de relaxation τ des courbes exponentielle de la figure 5.7 en fonction de β pour le FSIM (en haut) et le ATIM (en bas). À partir de $\beta = 0.4$, les données sont indistinguables aux barres d'erreur près avec le comportement attendu de la forme $\tau \sim \xi^2 \sim e^{4\beta}$: pas d'anomalie dynamique, mais des corrections logarithmiques.

Ce comportement est reproduit par nos données aux barres d'erreur près, à partir de $\beta = 0.40$, donc après un court régime transitoire comme on peut le constater sur la figure 5.8. Une interpolation plus précise nous permet d'obtenir le comportement asymptotique :

$$\tau_{FSIM} \sim e^{4.02(5)\beta J} \qquad \text{et} \qquad \tau_{ATIM} \sim e^{3.93(7)\beta J}\,, \tag{5.19}$$

et ceci même pour des valeurs de température inférieures à T_p. Cela mène à un exposant dynamique $z = 2.010(25)$ pour le FSIM et $1.965(35)$ pour le ATIM. Ces estimations sont moins précises, mais compatibles avec celle que nous présentons plus bas à la température critique $T_c = 0$. La même analyse effectuée sans tenir compte des corrections logarithmiques dans l'argument de l'exponentielle mène à $z_{eff} \approx 2.3$.
Pour conclure, le comportement dynamique du FFIM à l'équilibre dans la phase haute température est similaire à celui d'un ferromagnétique simple mais avec des corrections logarithmiques des variables temporelles qui manifestent la présence de défauts topologiques libres. On a notamment une divergence du temps de relaxation suivant $\tau \sim \xi_c^z$ où l'exposant dynamique est compatible avec $z_c = 2$. La présence d'une anomalie dynamique en-dessous de la température de percolation [Fier97-99] pourrait être liée à une d'analyse erronée des résultats.

5.2.2 Dynamique critique

Thermalisation

À l'équilibre, la fonction d'autocorrélation spin-spin à $T_c = 0$ est décrite par :

$$C_0(t,s) \underset{t-s\gg 1}{\sim} (t-s)^{-a_c}\,, \tag{5.20}$$

où $a_c = 2\beta/(\nu z_c) = (d-2+\eta)/z_c$ soit, en dimension $d = 2$, $a_c = \eta/z_c$. Puisque l'exposant $\eta = 1/2$ est connu exactement, la détermination de a_c permet d'obtenir l'exposant dynamique critique z_c. La détermination est faite à l'équilibre et au point critique de manière à s'affranchir de l'influence des défauts topologiques qui sont alors appariés par paires, contrairement à la phase haute température à l'équilibre ou lors d'une trempe à T_c depuis la phase haute température. Dans un premier temps, nous thermalisons les deux modèles FSIM et ATIM à la température critique $T_c = 0$ avec un algorithme d'amas mis au point pour le FSIM [Kand92] et qui peut être adapté au ATIM [Zhan94]. Puis nous effectuons les mesures sur ces systèmes équilibrés avec la dynamique locale de Glauber.
La première étape de l'algorithme [Kand92] consiste à séparer les plaquettes, à la façon d'un damier, en cases noires et blanches comme sur la figure 5.9. Durant la seconde étape, on choisit une couleur de plaquette alátoirement et on forme des liaisons entre les spins. La procédure est décrite sur la figure 5.10. Les liaisons de plaquettes dans l'état fondamental sont gelées de manière à ne pas augmenter l'énergie du réseau lorsque, dans la troisième étape, on inverse le signe des spins de chaque amas avec une probabilité $1/2$. Si une plaquette n'est pas dans l'état fondamental, aucune liaison n'est gelée. Si une plaquette carrée est dans l'état fondamental, elle possède trois liaisons

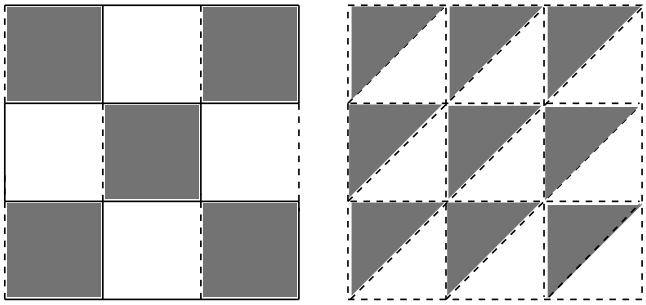


FIG. 5.9 – Première étape de l'algorithme d'amas pour le FFIM : on sépare les plaquettes du réseau comme un damier en cases noires et blanches. À chaque étape l'un des deux choix équivalents est choisi de manière aléatoire. Les lignes continues et pointillées représentent respectivement des liaisons ferro et antiferromagnétiques.

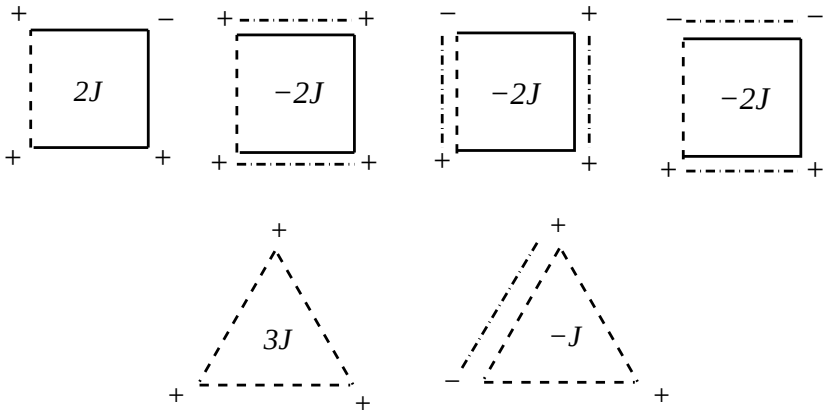


FIG. 5.10 – Une plaquette ne peut prendre que deux valeurs d'énergie : $E = -2J$ ou $E = 2J$ pour le FSIM et $E = 3J$ ou $E = -J$ pour le ATIM. On gèle les liaisons entre les spins pour les plaquettes dans l'état fondamental : pour la plaquette carrée, on gèle les deux liaisons satisfaites qui se font face tandis que pour la plaquette triangulaire, on gèle l'une des deux liaisons satisfaites de manière aléatoire. Ces liaisons gelées sont représentées par les lignes pointillées avec des points.

satisfaites : on gèle alors les deux liaisons satisfaites parallèles. Cet algorithme satisfait l'équation du bilan détaillé et permet de réaliser des mises à jour non triviales en séparant toujours le réseau en deux amas au minimum [Kand92]. Il peut facilement être adapté à une température non nulle [Kand92]. Si une plaquette triangulaire dans l'état fondamental possède deux liaisons satisfaites, alors on gèle l'une de ces deux liaisons

choisie de manière aléatoire [Zhan94]. De manière à assurer l'ergodicité à température nulle, on réalise également une étape Monte Carlo locale pour chaque réseau. L'application à des systèmes désordonnés de type Edwards-Anderson bimodal est simple, mais se révèle inefficace car le réseau entier est gelé en un seul amas du fait de l'existence de plaquettes non frustrées [Codd94].
L'algorithme d'amas pour le FFIM réduit de manière significative le ralentissement critique puisque $z_c \approx 0.55$ pour le FSIM [Kand92] et $z_c = 0.64(2)$ pour le ATIM [Zhan94]. Nous avons thermalisé 1000 configurations initiales à la température critique $T_c = 0$ en partant d'un état initial désordonné sur un réseau de dimensions 192×192. Nous avons tracé sur la figure 5.11 l'énergie moyenne par plaquette E_p/J pour le FSIM en configuration zigzag (en haut) et pour le ATIM (en bas). Avec le FSIM, l'état fondamental est atteint pour toutes les histoires thermiques après environ 110 itérations d'amas. Il n'y a alors aucune fluctuation autour de l'énergie de l'état fondamental. La durée des simulations est modeste, donc nous avons thermalisé chaque réalisation pendant 1000 itérations d'amas. Le temps nécessaire est de 6h30 sur un processeur *Pentium IV* de fréquence 3.2GHz. Le temps par itération d'amas est de 23ms environ soit 0.63μs par spin. Pour le ATIM, la thermalisation est nettement moins efficace puisqu'il faut environ 70000 itérations pour que chaque configuration atteigne l'état fondamental. Les résultats montrent que certaines configurations sont piégées durant un certain temps dans des états métastables. Le temps de calcul reste cependant raisonnable et nous avons thermalisé jusqu'à un temps final de 10^5 itérations. Cela nécessite environ 26 jours sur un processeur *Pentium IV* de fréquence 3.2GHz.

Mesure de l'exposant dynamique

Après la thermalisation, chacune des 1000 configurations évolue avec la dynamique locale de Glauber pendant 10000 itérations. La dynamique de Glauber à température nulle se résume à une minimisation de l'énergie du système. On choisit un spin au hasard. Si le changement d'orientation du spin augmente l'énergie, il est refusé et s'il abaisse l'énergie, il est accepté. Le changement est accepté avec une probabilité $1/2$ si la différence d'énergie est nulle. Pour le FSIM, le temps de calcul total de mesure s'élève à $30h$ soit 10.7ms par itération ou encore $0.3\mu s$ par spin environ.
L'autocorrélation spin-spin, mesurée suivant la définition (5.17), est présentée sur la figure 5.12. Nous effectuons les mesures à tous les temps afin d'obtenir les valeurs d'exposants les plus précises possibles. Cependant, les points tracés sur la figure 5.12 sont répartis logarithmiquement afin d'alléger les figures. Une interpolation donne $a_c = 0.2495(11)$ pour le FSIM et $a_c = 0.251(2)$ pour le ATIM. Nous obtenons l'exposant dynamique $z_c = 2.004(9)$ pour le FSIM et $z_c = 1.992(16)$ pour le ATIM. Les résultats sont en bon accord avec la valeur $z = 2$ du modèle XY dans la phase basse température.
Notre estimation est en accord avec une étude plus récente où les auteurs utilisent la même méthode [Kars09]. Ce résultat est aussi en accord avec l'étude de Kim *et al* [Kim03-07] qui considère la relaxation en partant d'un état initial fondamental dominant qui apporte une forte contribution à l'entropie. Cependant, comme nous l'avons déjà mentionné précédemment ces auteurs supposent que ce résultat dépend de la configuration initiale et déterminent un exposant $z'_c = 2.33(5)$ en partant d'une

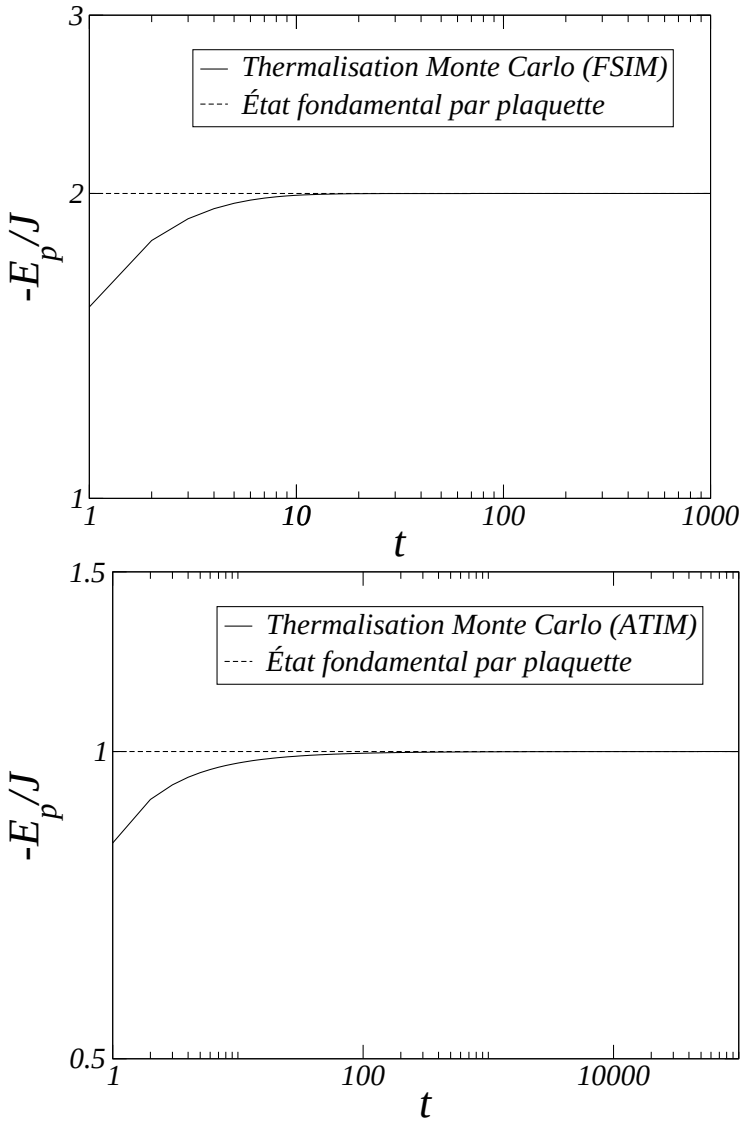


FIG. 5.11 – L'énergie moyenne par plaquette E_p en unité J pour les 1000 configurations initiales thermalisées à $T_c = 0$ en partant d'un état initial désordonné est tracée en fonction du nombre d'itérations de l'algorithme d'amas pour le FSIM (en haut) et le ATIM (en bas).

configuration initiale désordonnée. Or l'exposant dynamique est une grandeur universelle [Jans89] qui ne doit pas dépendre de l'état initial. À partir de nos résultats obtenus pour le vieillissement du FFIM, nous expliquons comment il est possible de réconcilier

les exposants dynamiques différents de Kim *et al* en tenant compte de l'influence des défauts topologiques.

5.3 Vieillissement lors d'une trempe à $T_c = 0$

Afin d'étudier la dynamique hors de l'équilibre du FFIM et mettre en évidence le régime de vieillissement, on effectue une trempe depuis une température infinie jusqu'à la température critique $T_c = 0$ avec une dynamique Monte Carlo locale de type Glauber. Il est alors possible de mettre clairement en évidence l'influence des défauts topologiques à partir de la croissance de la longueur caractéristique qui présente des corrections logarithmiques.

5.3.1 Les fonctions de corrélation spin-spin

Dans un premier temps, nous mettons en évidence de façon directe la croissance d'une longueur caractéristique dans le système en mesurant la fonction de corrélation spin-spin spatiale à temps égaux $C(r,t)$:

$$C(r,t) = \langle S_i(t) S_j(t) \rangle \,, \tag{5.21}$$

où t est le temps écoulé depuis la trempe et $r = |i-j|$. Comme nous l'avons vu dans la sous-section 4.1.2, la croissance de domaines corrélés justifie l'hypothèse d'échelle dynamique [Bray94] qui permet d'écrire la corrélation à temps égaux selon l'expression (4.5) que nous rappelons :

$$C(r,t) \sim \frac{\mathcal{C}_c^{sp}(r/\xi(t))}{r^\eta} \,, \tag{5.22}$$

où $\mathcal{C}_c^{sp}(x)$ est une fonction d'échelle. La longueur $\xi(t)$ est la taille caractéristique des domaines corrélés. Il est alors possible d'obtenir des informations sur la croissance de $\xi(t)$ en mesurant $C(r,t)$. Nous avons utilisé une méthode Monte Carlo locale avec un réseau de dimensions 400×400 suffisamment large pour éviter les effets de bords et un temps final de 10240. Le réseau carré possède une frustration de type zigzag. Les mesures de la fonction de corrélation spatiale sont faites aux temps $t = 10$, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280, 2560 et 5120 et nous avons moyenné sur 5000 histoires thermiques. La corrélation est une fonction oscillante comme nous l'avons vu dans la section 5.1.1. Nous effectuons les mesures sur les sites équivalents des axes horizontaux de la figure 5.2 obtenus par une translation de deux pas de réseau pour le FSIM en configuration de frustration de type zigzag et trois pas de réseau pour le ATIM. Le temps moyen par spin est environ de 0.30μs pour les deux réseaux sur un processeur *Xeon quad-core* de 2GHz. Il a fallu environ 6 jours sur un processeur pour d'obtenir les résultats. Afin de distinguer entre les deux scénarios de croissance possibles, nous traçons nos résultats pour $\mathcal{C}_c^{sp}(r/\xi(t)) = r^\eta C(r,t)$ en fonction des deux choix possibles pour $\xi(t)$ sur la figure 5.13 pour le FSIM et sur la figure 5.14 pour le ATIM. Les corrections logarithmiques de $\xi(t)$ permettent une superposition des courbes aux barres d'erreur près à partir de $t = 160$ pour le FSIM et à partir de $t = 320$ pour le ATIM. Lorsqu'on ne considère pas de corrections logarithmiques, on ne constate aucune superposition. Ces

données suggèrent une croissance de la longueur caractéristique semblable au modèle XY. Dans un second temps, nous avons calculé la fonction d'autocorrélation spin-spin suivant le même protocole. On suppose un comportement similaire au modèle d'Ising donné par l'expression (4.9) :

$$C(t,s) \sim s^{-a_c}\tilde{\mathcal{C}}\left(\frac{\xi(t)}{\xi(s)}\right) , \tag{5.23}$$

où $\tilde{\mathcal{C}}(x)$ est une fonction d'échelle. Il est possible de mettre en évidence la croissance de la longueur caractéristique à travers la variable d'échelle $\xi(t)/\xi(s)$. Il faut alors distinguer entre la qualité des fonctions d'échelle avec et sans corrections logarithmiques de la variable d'échelle :

$$C(t,s) \sim s^{-a_c}\mathcal{C}\left(\frac{t\ln s}{s\ln t}\right) , \tag{5.24}$$

et

$$C(t,s) \sim s^{-a_c}\mathcal{C}\left(\frac{t}{s}\right) , \tag{5.25}$$

où $\mathcal{C}(x)$ est une fonction d'échelle qui possède un comportement asymptotique algébrique :

$$\mathcal{C}(x) \underset{x\gg 1}{\sim} x^{-\lambda_c/z_c} . \tag{5.26}$$

Ces comparaisons sont faites à partir de données obtenues par simulation Monte Carlo locale en utilisant la définition (5.17). Le réseau est de dimensions 192×192, le temps de mesure final est $t_f = 10^4$, et la moyenne est faite sur 10^4 configurations initiales. On a choisi une configuration de frustration de type zigzag pour le réseau carré (un test avec la configuration domino en effectuant les moyennes sur un nombre moins important d'histoires thermiques donne des résultats compatibles). Les calculs ont été réalisés avec des processeurs *Pentium IV* de fréquence 3.2GHz. Le temps moyen par spin est environ de 0.30μs pour les deux réseaux. Il faut environ 12 jours sur un processeur afin d'obtenir les résultats. Nous avons mesuré l'autocorrélation à tous les temps afin que l'estimation des exposants présentée plus bas soit la plus précise possible. Cependant, afin d'alléger les points sur les figures sont répartis logarithmiquement. Dans un premier temps, nous traçons les données en fonction de $t - s$ sur la figure 5.15. On constate sur cette figure que l'autocorrélation présente une brisure de l'invariance par translation temporelle qui constitue une caractéristique des systèmes vieillissants comme nous l'avons discuté dans la sous-section 4.1.1.
Il est possible d'obtenir l'exposant a_c à partir de la fonction d'autocorrélation spin-spin dans le régime de vieillissement présentée sur la figure 5.15 en utilisant les expressions (5.24) et (5.25). Pour cela, on définit un exposant effectif entre deux valeurs de temps d'attente s_1 et s_2 :

$$a_{eff} = -\frac{\ln C(t_2,s_2) - \ln C(t_1,s_1)}{\ln s_2 - \ln s_1} , \tag{5.27}$$

pour une valeur fixée des variables d'échelle $\kappa = t/s$ ou $\kappa_{\ln} = \frac{t\ln s}{s\ln t}$. Le résultat est tracé pour le FSIM sur la figure 5.16 et pour le ATIM sur la figure 5.17 en fonction de κ^{-1} et $\kappa_{\ln}^{-1}$ de sorte que la valeur asymptotique obtenue lorsque $\kappa \to \infty$ et

$\kappa_{\ln} \to \infty$ pour $t \to \infty$ à s fixe se lit à gauche du graphe. On obtient la valeur attendue $a_{eff} = 0.25$ en utilisant la variable contenant les corrections logarithmiques. Cette valeur est obtenue pour les plus grands temps d'attente car la fonction d'échelle est définie dans le régime t puis $s \to \infty$.
Ce résultat assure la cohérence de la forme d'échelle (5.24). Cela nous permet de tracer pour comparaison les fonctions d'échelle intervenant dans les expressions (5.24) et (5.25). Les résultats sont présentés pour le FSIM sur la figure 5.18 et pour le ATIM sur la figure 5.19. Lorsque $s \geq 160$, les courbes sont indistinguables aux barres d'erreur près avec la variable d'échelle avec corrections logarithmiques et permet d'obtenir une fonction d'échelle universelle pour ces deux modèles. La forme d'échelle (5.24) est donc la plus appropriée pour décrire le vieillissement de l'autocorrélation spin-spin. On constate qu'aucune correction logarithmique n'intervient dans le préfacteur s^{-a_c} car ce terme provient de la contribution de quasi-équilibre à l'intérieur des domaines où les spins sont thermalisés à la température critique. Les défauts topologiques sont donc appariés par paires et écrantent leurs interactions (voir la discussion de la sous-section 4.2.1). Notons que notre résultat de forme d'échelle est confirmé par un article récent [Kars09] qui généralise notre étude par l'application d'un champ magnétique.
L'exposant λ_c/z_c est obtenu en effectuant une régression algébrique des données présentées sur les figures 5.18 pour le FSIM et 5.19 pour le ATIM. Pour un temps d'attente s donné, nous faisons varier la borne inférieure $x_{min-\ln}$ et x_{min} de l'intervalle de régression des variables d'échelle avec et sans corrections logarithmiques respectivement de façon à observer la convergence vers le comportement asymptotique. Les résultats sont présentés sur les figures 5.20 pour le FSIM et 5.21 pour le ATIM. En considérant les corrections logarithmiques, nous trouvons un exposant asymptotique $\lambda_c/z_c = 1.02(2)$ soit $\lambda_c = 2.04(5)$ pour le ATIM et le FSIM. De manière intéressante, on trouve un exposant effectif $\lambda_c/z_c = 0.91(2)$ sans les corrections logarithmiques, ce qui explique le résultat erroné $\lambda_c/z_c = 0.86$ de Kim *et al* [Kim03-07]. Cela montre que les valeurs obtenues par ces auteurs peuvent être réanalysées par l'ajout de corrections logarithmiques.

5.3.2 Le rapport fluctuation-dissipation

Le rapport fluctuation-dissipation $X(t,s)$ lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique présente une valeur asymptotique universelle X_∞ comme nous l'avons présenté dans la sous-section 4.2.3. De plus, il est intéressant d'étudier son comportement en fonction de différentes variables d'échelle afin de mettre en évidence les corrections logarithmiques. Rappelons le protocole de mesure. On couple les spins au temps s à un champ h par un terme Zeeman de la forme :

$$-\sum_{i=1}^{N} h_i S_i \,. \tag{5.28}$$

Ce couplage permet la définition de la fonction de réponse selon l'expression (4.17) :

$$R(t,s) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{\delta\langle S_i(t)\rangle}{\delta h_i(s)}\bigg|_{h=0} \,. \tag{5.29}$$

Techniquement, nous avons évalué cette quantité à partir de la méthode sans champ présentée dans la sous-section 4.2.2. Nous pouvons alors évaluer le RFD en utilisant la dérivée de l'autocorrélation obtenue numériquement par la différence $\partial_s C(t,s) \approx \langle S_i(t)(S_i(s+1) - S_i(s))\rangle$:

$$X(t,s) = \frac{k_B T R(t,s)}{\partial_s C(t,s)} \,. \tag{5.30}$$

La fonction de réponse et *a fortiori* le RFD sont des quantités fluctuantes. Nous avons donc adapté les paramètres de simulation afin de moyenner sur un nombre suffisant de configurations initiales. Un système de dimensions 128×128 et un temps final $t_f = 2000$ nous ont permis de moyenner sur 10^6 configurations initiales. Nous avons choisi une configuration de frustration de type domino pour le réseau carré. Puisque aucun exposant n'est associé au RFD, il n'était pas nécessaire de réaliser des mesures à tous les temps pour réaliser des interpolations précises. Nous avons effectué des mesures à tous les temps entre $t = s$ et $t = 100$ puis un temps sur 10 entre $t = 100$ et $t = 1000$ et finalement un temps sur 100 entre $t = 1000$ et $t_f = 2000$. Le temps par spin est approximativement le même que pour l'autocorrélation, ce qui mène à un temps de calcul de 180 jours par modèle sur un processeur *Pentium IV* de fréquence 3.2GHz. Nos résultats sont tracés sur la figure 5.22 pour le FSIM et sur la figure 5.23 pour le ATIM. L'évidence de corrections logarithmiques est nettement visible sur ces figures. La variable d'échelle incluant les corrections logarithmiques permet une superposition des courbes, même pour les plus petits temps d'attente. De plus, on donne une estimation de la valeur asymptotique universelle $X_\infty = 0.33(1)$ pour les deux réseaux, qui est compatible avec la valeur du modèle d'Ising ferromagnétique sans que l'on n'y voie d'explications (voir les valeurs résumées dans la table 4.2).

Il a été suggéré dans le contexte du vieillissement des modèles de champ moyen de verres de spins [Cugl94] que la dépendance du RFD intervient uniquement à travers l'autocorrélation. Sur la figure 5.24, nous avons tracé le RFD en fonction de l'autocorrélation sans constater de superposition des courbes, ce qui invalide, pour le choix de nos paramètres, l'hypothèse selon laquelle le RFD est uniquement une fonction de l'autocorrélation.

Afin de confirmer la valeur asymptotique du RFD, nous avons calculé la réponse intégrée ZFC et TRM pour le ATIM uniquement. Nous les avons tracées en fonction de l'autocorrélation. Il est possible d'obtenir le RFD à partir de la pente de ces courbes puisque dans le régime de vieillissement (voir la sous-section 4.2.3 pour les détails) :

$$\lim_{t,s\to\infty} \rho_{ZFC}(t,s) = X_\infty(1 - C(t,s)) \,, \tag{5.31}$$

et

$$\lim_{t,s\to\infty} \rho_{TRM}(t,s) = X_\infty C(t,s) \,. \tag{5.32}$$

Tandis que dans le régime de quasi-équilibre, on obtient :

$$\rho_{ZFC}(t,s) = 1 - C(t,s) \,, \tag{5.33}$$

et

$$\rho_{TRM}(t,s) \approx C(t,s) \,. \tag{5.34}$$

Les simulations ont été effectuées avec un réseau de dimensions 192×192. Le temps final est $t_f = 10000$ et les moyennes sont réalisées sur 80000 histoires thermiques. Les résultats sont tracés sur la figure 5.25 pour la réponse intégrée ZFC (en haut) et la réponse TRM (en bas). Pour les deux réponses intégrées, la pente dans le régime de vieillissement est en accord avec l'estimation directe $X_\infty = 0.33(1)$, confirmant ainsi cette valeur.

Nous avons étudié la dynamique du modèle d'Ising complètement frustré bidimensionnel lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique par simulation Monte Carlo locale. Puisque le modèle donne lieu à l'équilibre à une transition de type Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless gouvernée par les défauts topologiques qui sont libres dans la phase haute température et liés par paires de charges opposées dans la phase basse température, la dynamique depuis un état initial désordonné vers la température critique devrait être ralentie par les interactions de ces défauts comme pour le modèle XY. Ce ralentissement se manifeste par des corrections logarithmiques. Or la littérature ne fournit pas d'évidence numérique claire de telles corrections logarithmiques, ce qui a donné lieu à un débat.
Nous avons commencé par une étude préalable de la dynamique à l'équilibre. Dans la phase haute température, nous avons extrait le temps de relaxation τ lors de la décroissance exponentielle de la fonction d'autocorrélation spin-spin. La relation habituelle qui relie la croissance de la longueur de corrélation ξ à τ sous la forme $\xi \sim \tau^{1/z_c}$ est bien vérifiée avec l'exposant attendu $z_c = 2$ à condition de prendre en compte des corrections logarithmiques dans la fonction d'échelle de l'autocorrélation, afin de prendre en compte l'influence des défauts topologiques qui sont libres à haute température. Ce fait permet d'expliquer l'anomalie dynamique observée pour l'autocorrélation de l'énergie. La dynamique à la température critique où les effets des défauts topologiques sont écrantés se prête bien à une estimation précise de l'exposant dynamique en bon accord avec la valeur $z_c = 2$ du modèle XY. Dans un second temps, nous effectuons une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique. Nous estimons les grandeurs universelles : l'exposant de décroissance de la fonction d'autocorrélation $\lambda_c = 2.04(5)$ et la valeur asymptotique du rapport fluctuation-dissipation $X_\infty = 0.33(1)$. L'analyse des fonctions de corrélation spin-spin et du rapport fluctuation-dissipation met clairement en évidence des corrections logarithmiques des variables d'échelle, et donc une croissance de la longueur caractéristique selon $\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/z_c}$. Ces évidences numériques claires suggèrent qu'une description cohérente de la relaxation du FFIM lors d'une trempe critique depuis la phase haute température n'est possible qu'en tenant compte de l'effet des défauts topologiques.

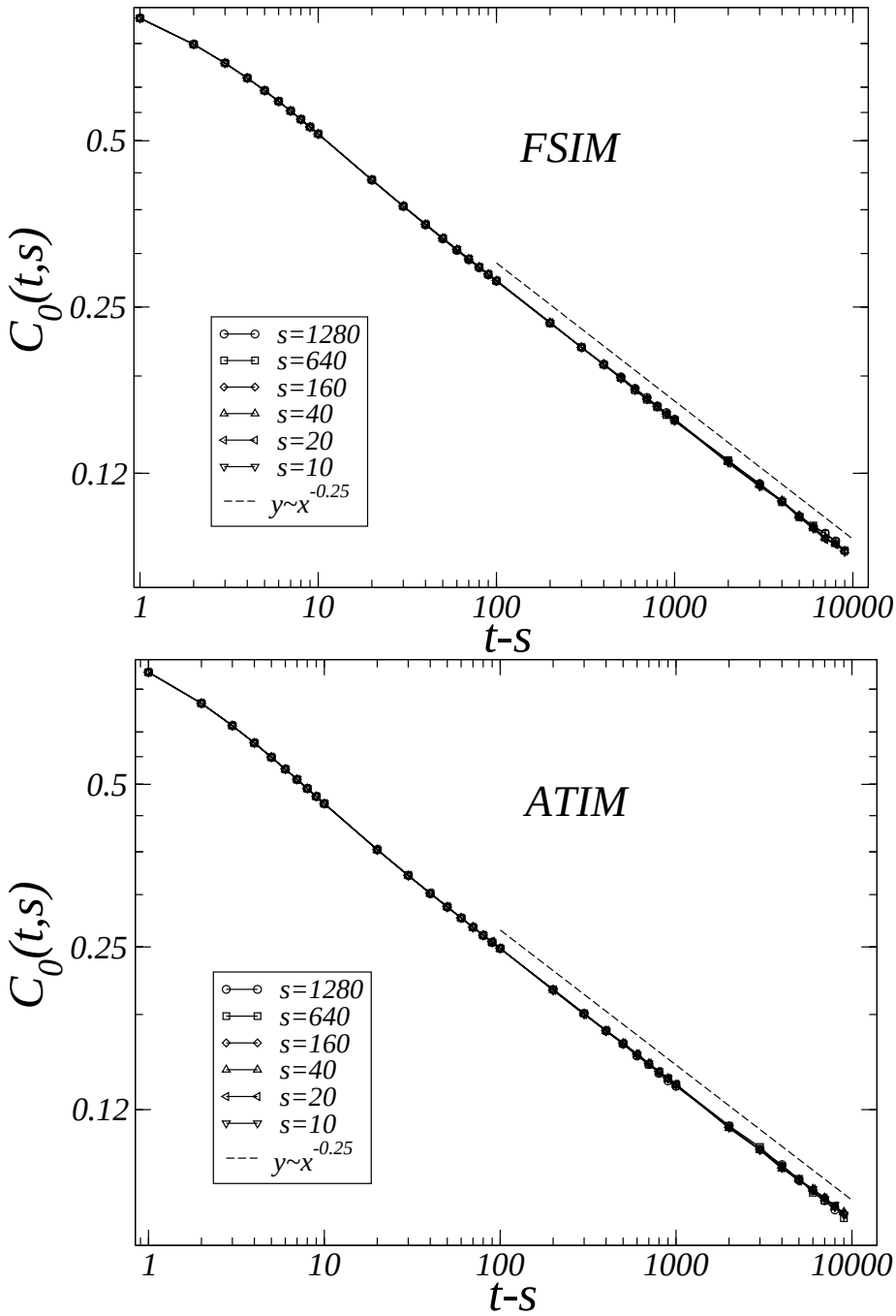


FIG. 5.12 – Fonction d'autocorrélation spin-spin à $T = 0$ dans le régime d'équilibre pour le FSIM (en haut) et le ATIM (en bas) tracée en fonction de $t - s$ pour différents temps d'attente s écoulés depuis la fin de la thermalisation. On constate l'invariance par translation temporelle car toutes les courbes se superposent, comme on s'y attend à l'équilibre. La décroissance s'effectue selon (5.20) avec un exposant compatible avec $a_c = 0.25$, ce qui mène à un exposant dynamique z_c en bon accord avec la valeur $z = 2$ du modèle XY.

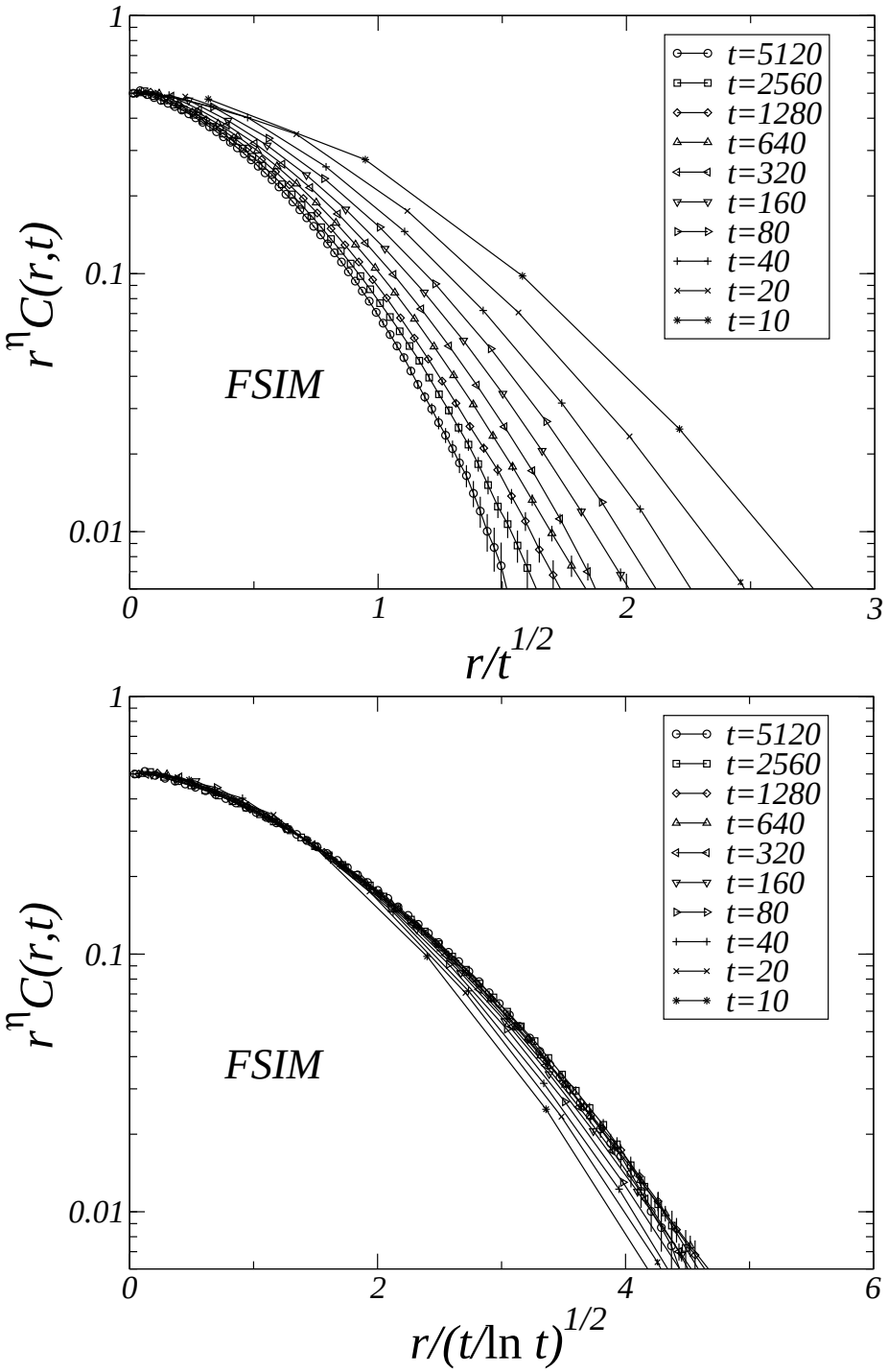


FIG. 5.13 – La fonction d'échelle $\mathcal{C}_c^{sp}(r/\xi(t)) = r^\eta C(r,t)$ de la corrélation spatiale spin-spin à temps égaux du FSIM trempé depuis un état désordonné jusqu'à la température critique est tracée en en fonction de $r/\xi(t)$ où $\xi(t) \sim t^{1/2}$ (en haut) et $\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/2}$ (en bas). Le temps t représente le temps écoulé depuis la trempe. Les corrections logarithmiques de la variable d'échelle permettent d'obtenir une superposition des courbes à partir de $t = 160$ aux barres d'erreur près. On ne constate aucune superposition lorsqu'on utilise la variable d'échelle sans correction logarithmique.

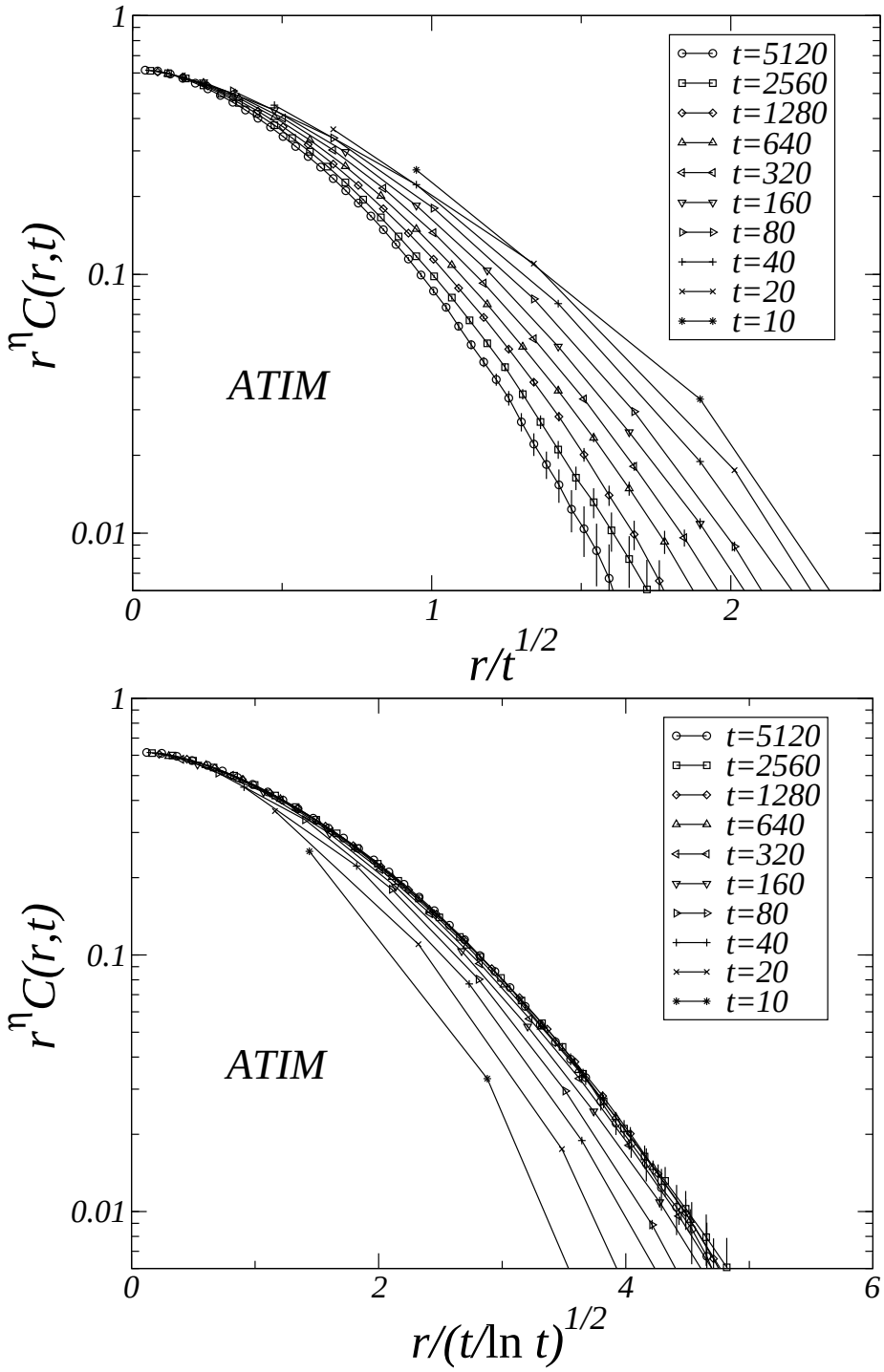


FIG. 5.14 – La fonction d'échelle $\mathcal{C}_c^{sp}(r/\xi(t)) = r^{\eta}C(r,t)$ de la corrélation spatiale spin-spin à temps égaux du ATIM trempé depuis un état désordonné jusqu'à la température critique est tracée en en fonction de $r/\xi(t)$ où $\xi(t) \sim t^{1/2}$ (en haut) et $\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/2}$ (en bas). Le temps t représente le temps écoulé depuis la trempe. Les corrections logarithmiques de la variable d'échelle permettent d'obtenir une superposition des courbes à partir de $t = 320$ aux barres d'erreur près. On ne constate aucune superposition lorsqu'on utilise la variable d'échelle sans correction logarithmique.

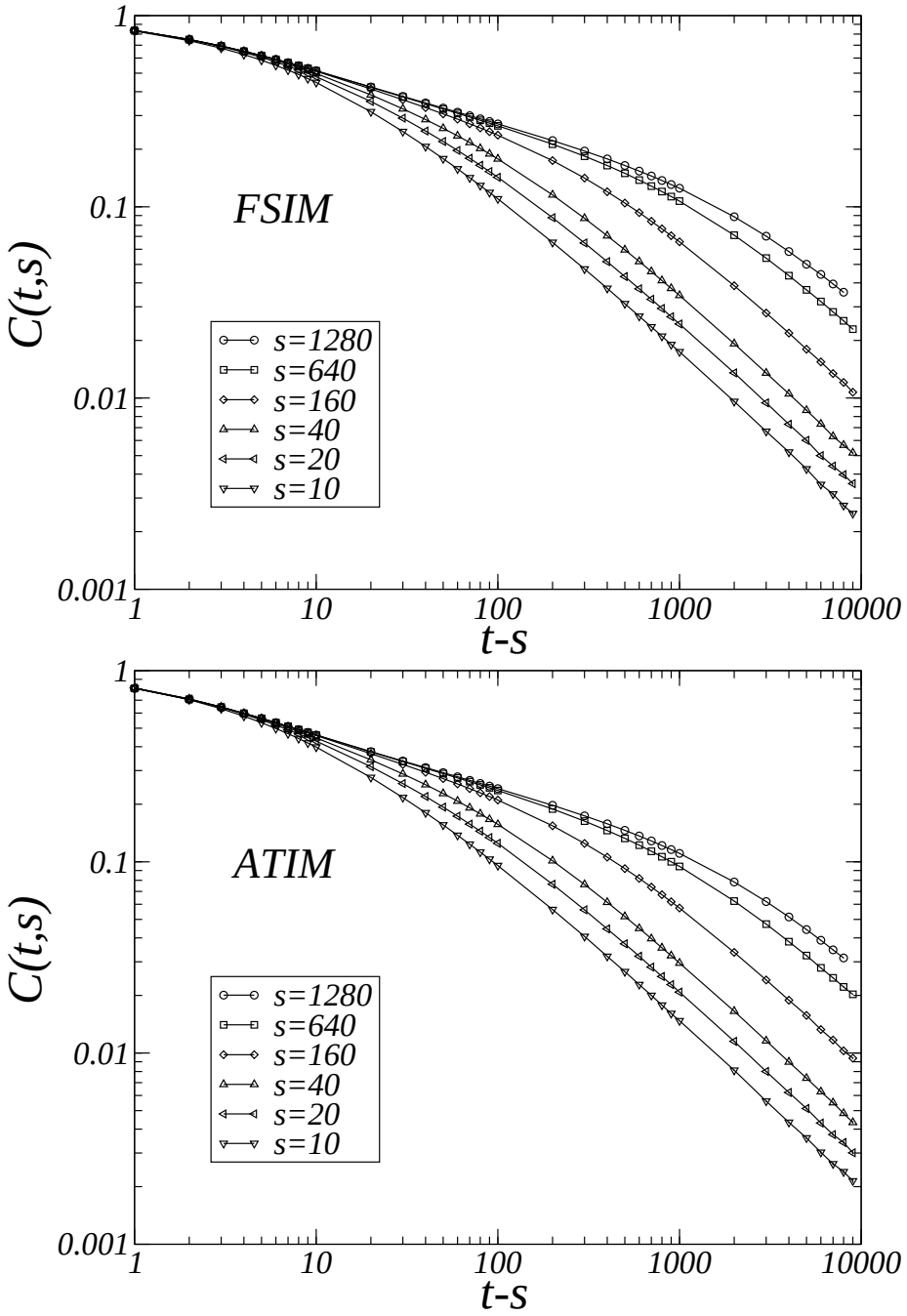


FIG. 5.15 – L'autocorrélation spin-spin du FSIM (en haut) et du ATIM (en bas) est tracée en fonction de $t - s$ après une trempe depuis un état désordonné jusqu'à la température critique $T_c = 0$. Le temps s représente l'âge du système. Les courbes se séparent après un régime de quasi-équilibre, indiquant une brisure de l'invariance par translation temporelle, une des caractéristiques du régime de vieillissement.

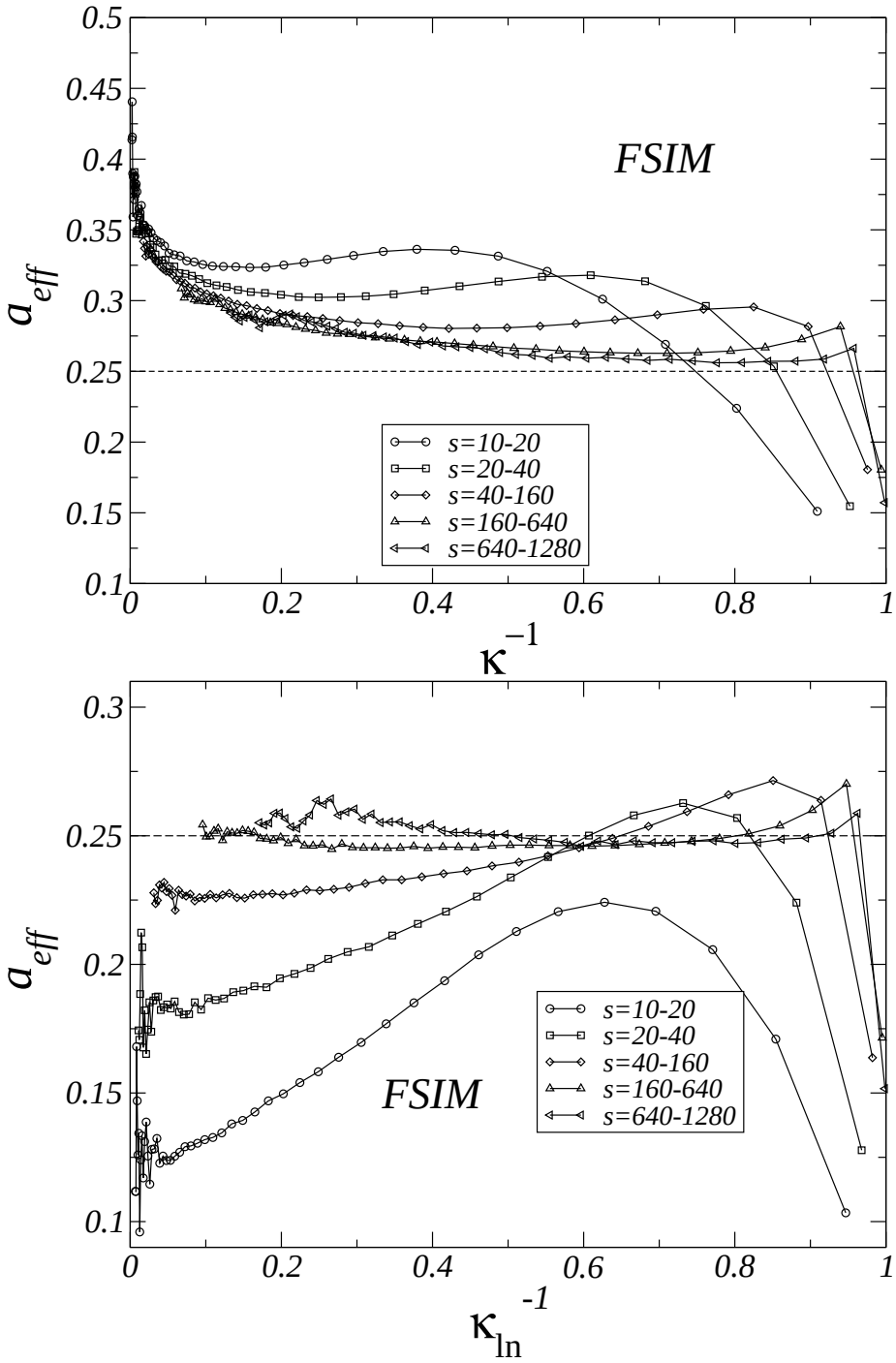


FIG. 5.16 – L'exposant effectif a_{eff} de l'autocorrélation spin-spin dans le régime de vieillissement pour le FSIM est obtenu à partir de couples de temps d'attente en fixant la valeur des variables d'échelle (voir le texte pour les détails). Les données sont tracées en fonction de l'inverse des variables d'échelle $\kappa = t/s$ (en haut) et $\kappa_{\ln} = (t/\ln t)/(s/\ln s)$ (en bas). Un plateau se forme autour de la valeur attendue $a_{eff} = 0.25$ pour les plus grands temps d'attente lorsqu'on tient compte les corrections logarithmiques.

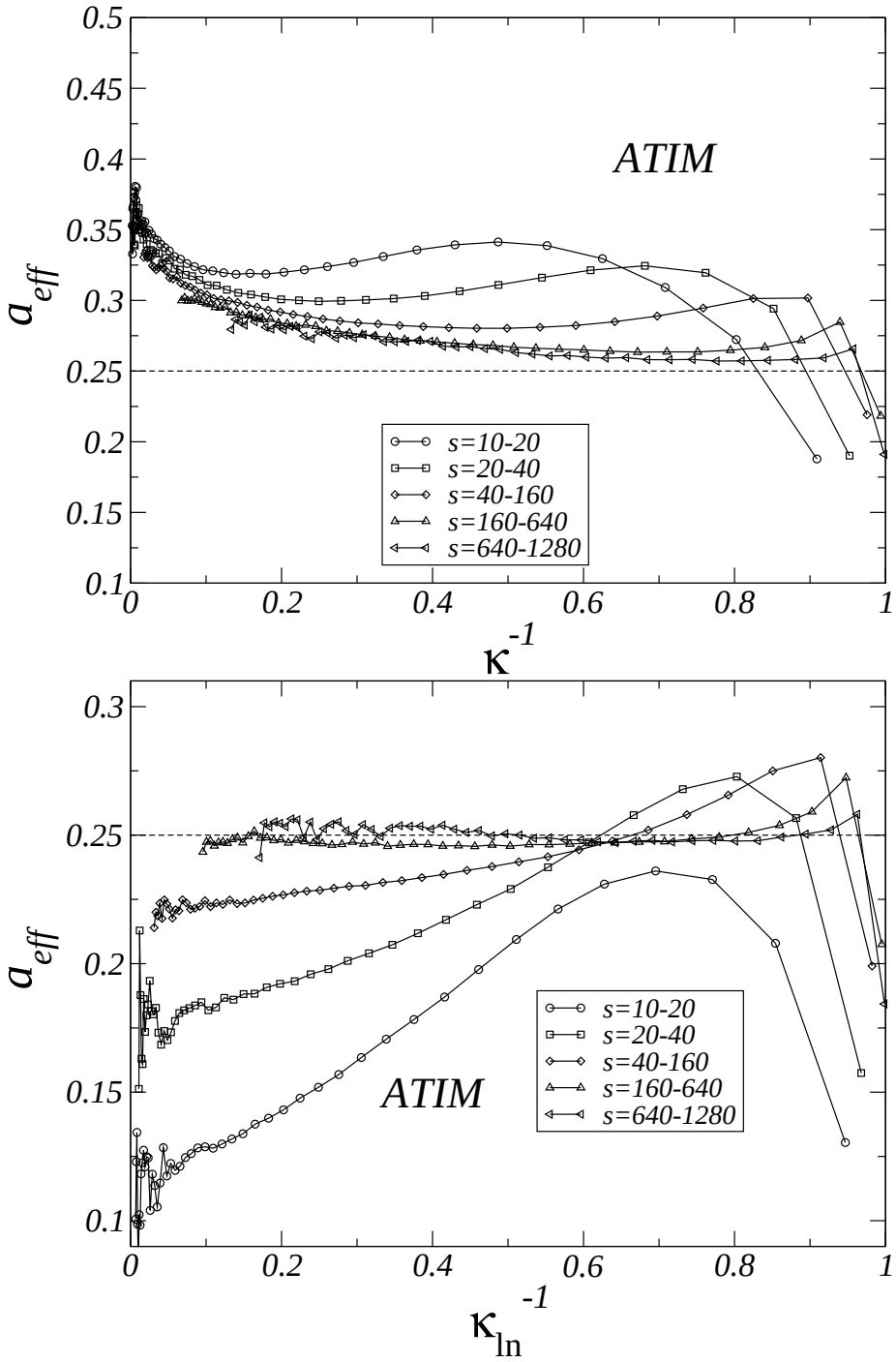


FIG. 5.17 – L'exposant effectif a_{eff} de l'autocorrélation spin-spin dans le régime de vieillissement pour le ATIM est obtenu à partir de couples de temps d'attente en fixant la valeur des variables d'échelle (voir le texte pour les détails). Les données sont tracées en fonction de l'inverse des variables d'échelle $\kappa = t/s$ (en haut) et $\kappa_{log} = (t/\ln t)/(s/\ln s)$ (en bas). Un plateau se forme autour de la valeur attendue $a_{eff} = 0.25$ pour les plus grands temps d'attente lorsqu'on tient compte les corrections logarithmiques.

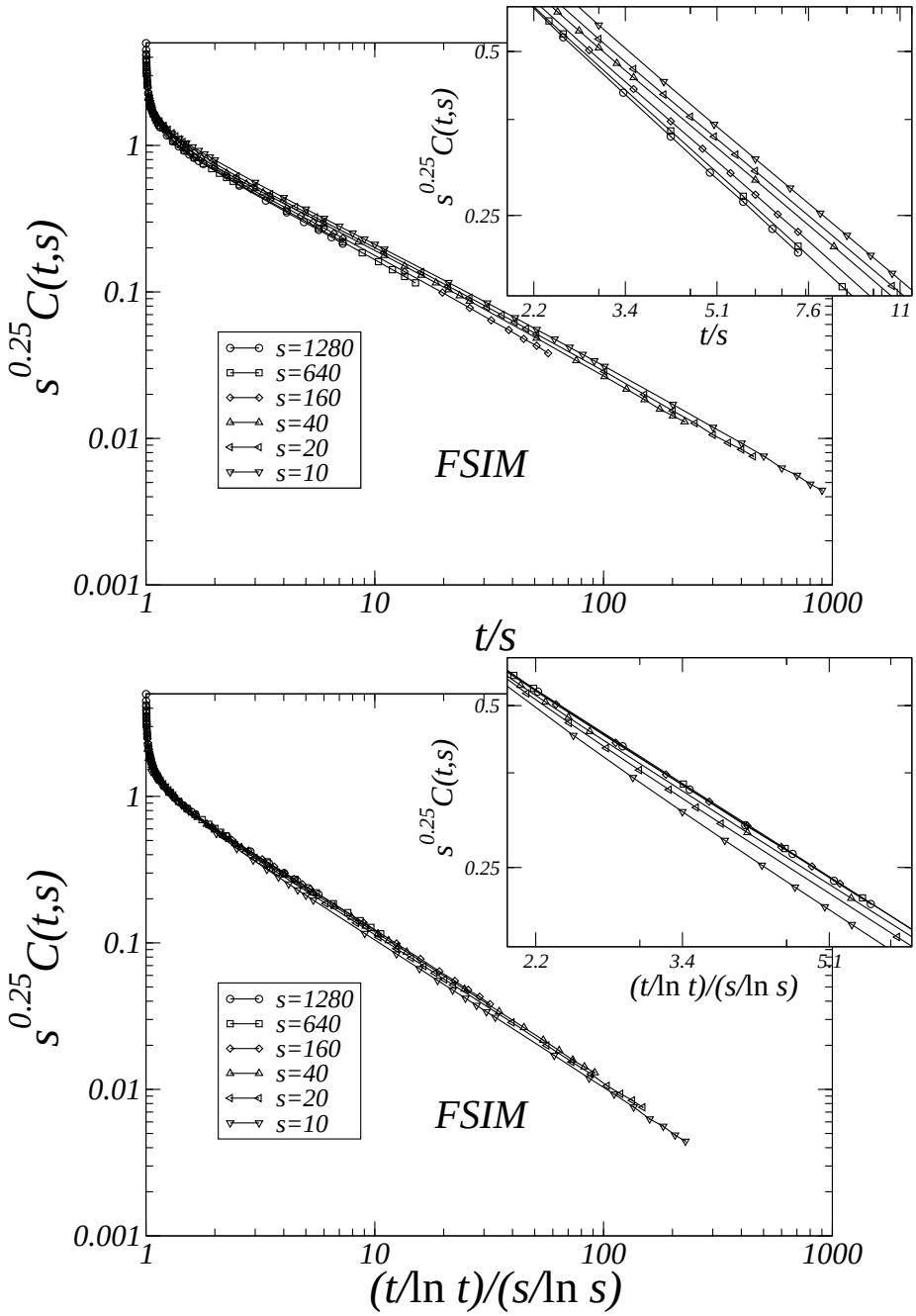


FIG. 5.18 – La fonction d'échelle de l'autocorrélation spin-spin dans le régime de vieillissement pour le FSIM après une trempe depuis un état initial désordonné jusqu'à la température critique est tracée en fonction de la variable d'échelle t/s (en haut) et $(t/\ln t)/(s/\ln s)$ (en bas) pour différents temps d'attente s. On ne constate aucune superposition sur la figure du haut. En revanche, sur la figure du bas, et en particulier dans l'insert, les courbes sont indistinguables aux barres d'erreur près à partir de $s = 160$.

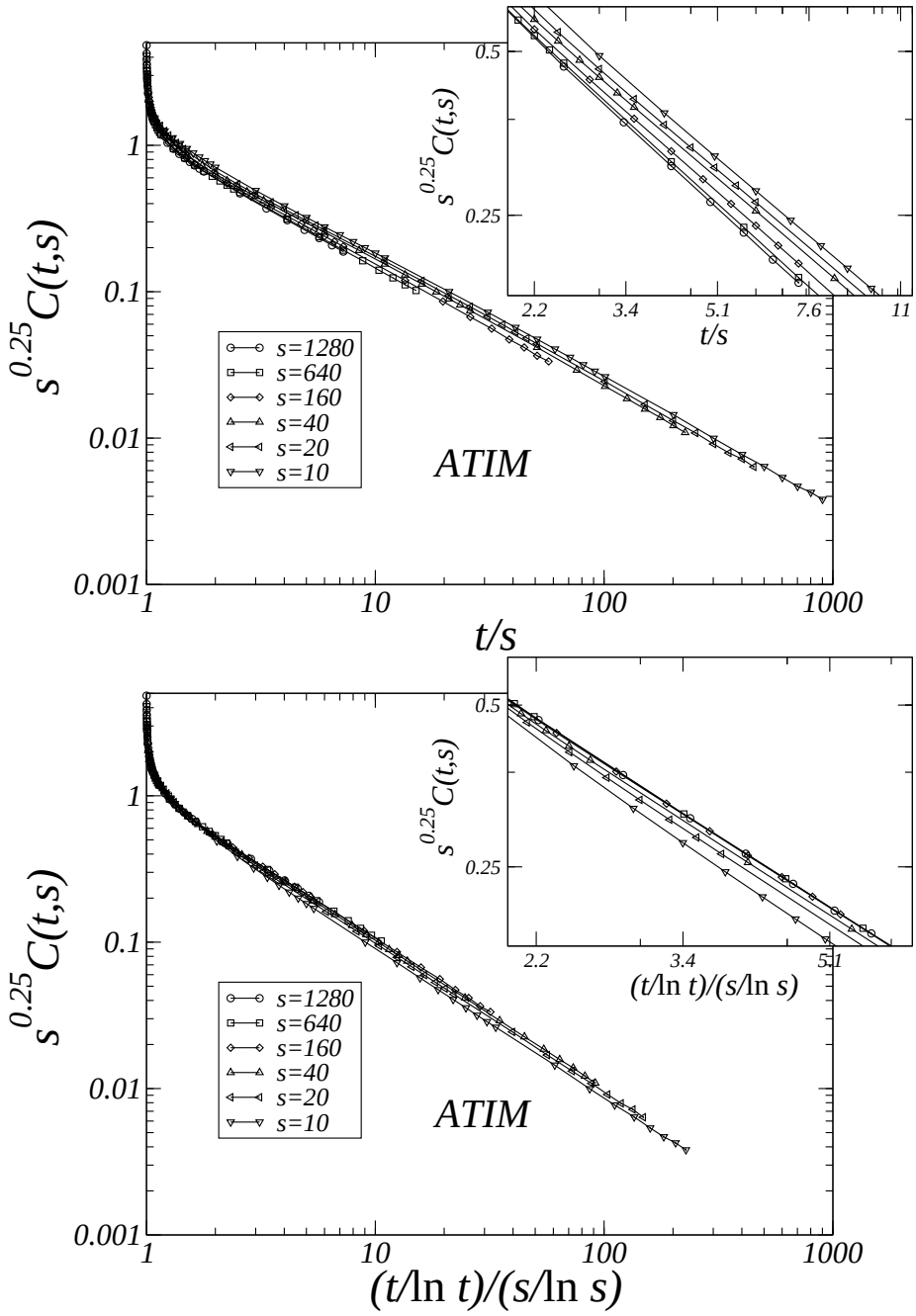


FIG. 5.19 – La fonction d'échelle de l'autocorrélation spin-spin dans le régime de vieillissement pour le ATIM après une trempe depuis un état initial désordonné jusqu'à la température critique est tracée en fonction de la variable d'échelle t/s (en haut) et $(t/\ln t)/(s/\ln s)$ (en bas) pour différents temps d'attente s. On ne constate aucune superposition sur la figure du haut. En revanche, comme pour le FSIM, on constate sur la figure du bas que les courbes sont indistinguables aux barres d'erreur près à partir de $s = 160$.

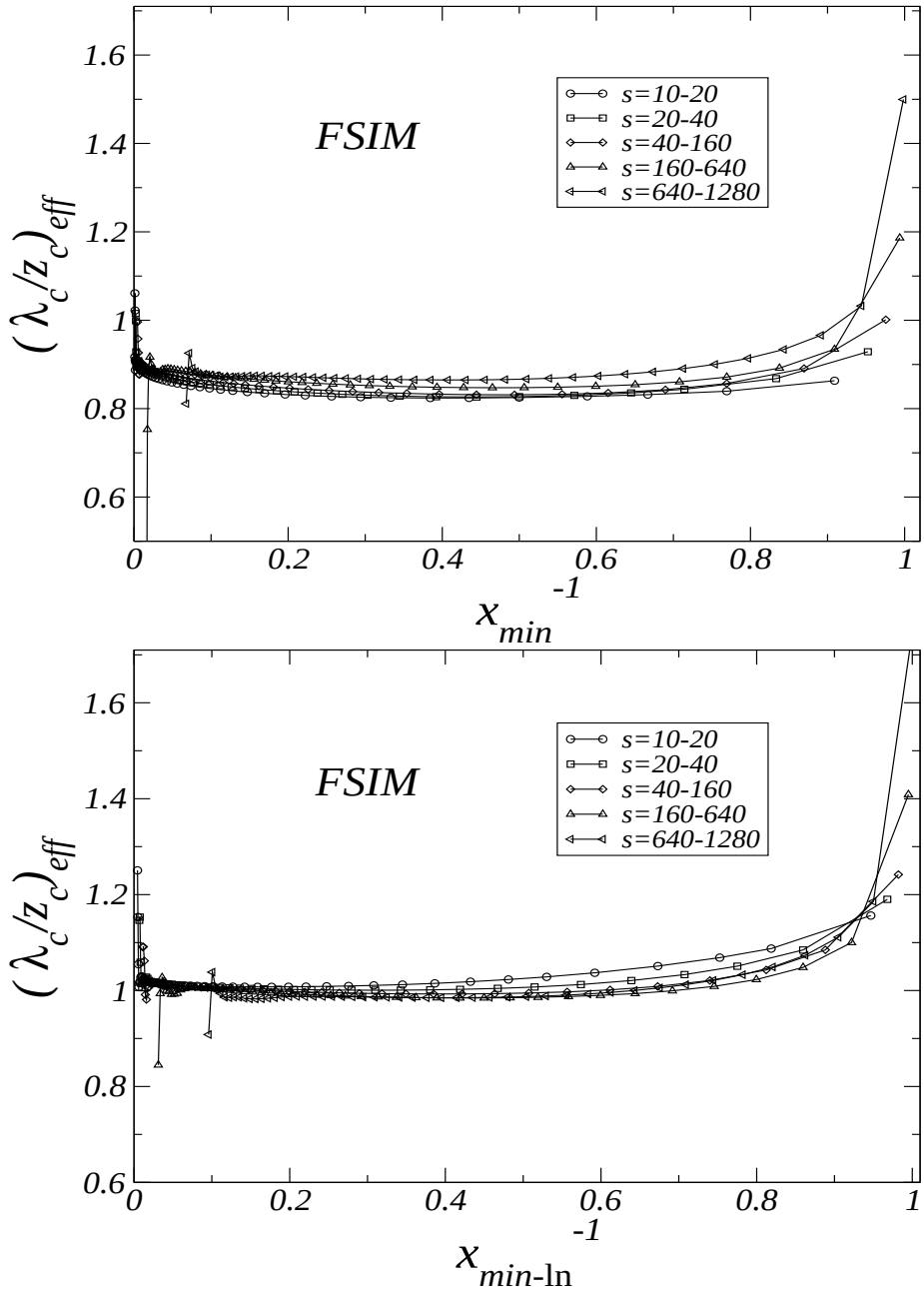


FIG. 5.20 – L'exposant effectif $(\lambda_c/z_c)_{eff}$ de l'autocorrélation spin-spin dans le régime de vieillissement pour le FSIM est obtenu par régression algébrique des courbes 5.18. Les résultats sont tracés en fonction de l'inverse x_{min} (en haut) et $x_{min-\ln}$ (en bas) qui correspondent à la borne inférieure de l'intervalle de régression sans et avec corrections logarithmiques. La valeur asymptotique se lit par extrapolation sur l'axe des ordonnées. On retient les valeurs $\lambda_c/z_c = 0.91(2)$ (en haut) et $\lambda_c/z_c = 1.02(2)$ (en bas).

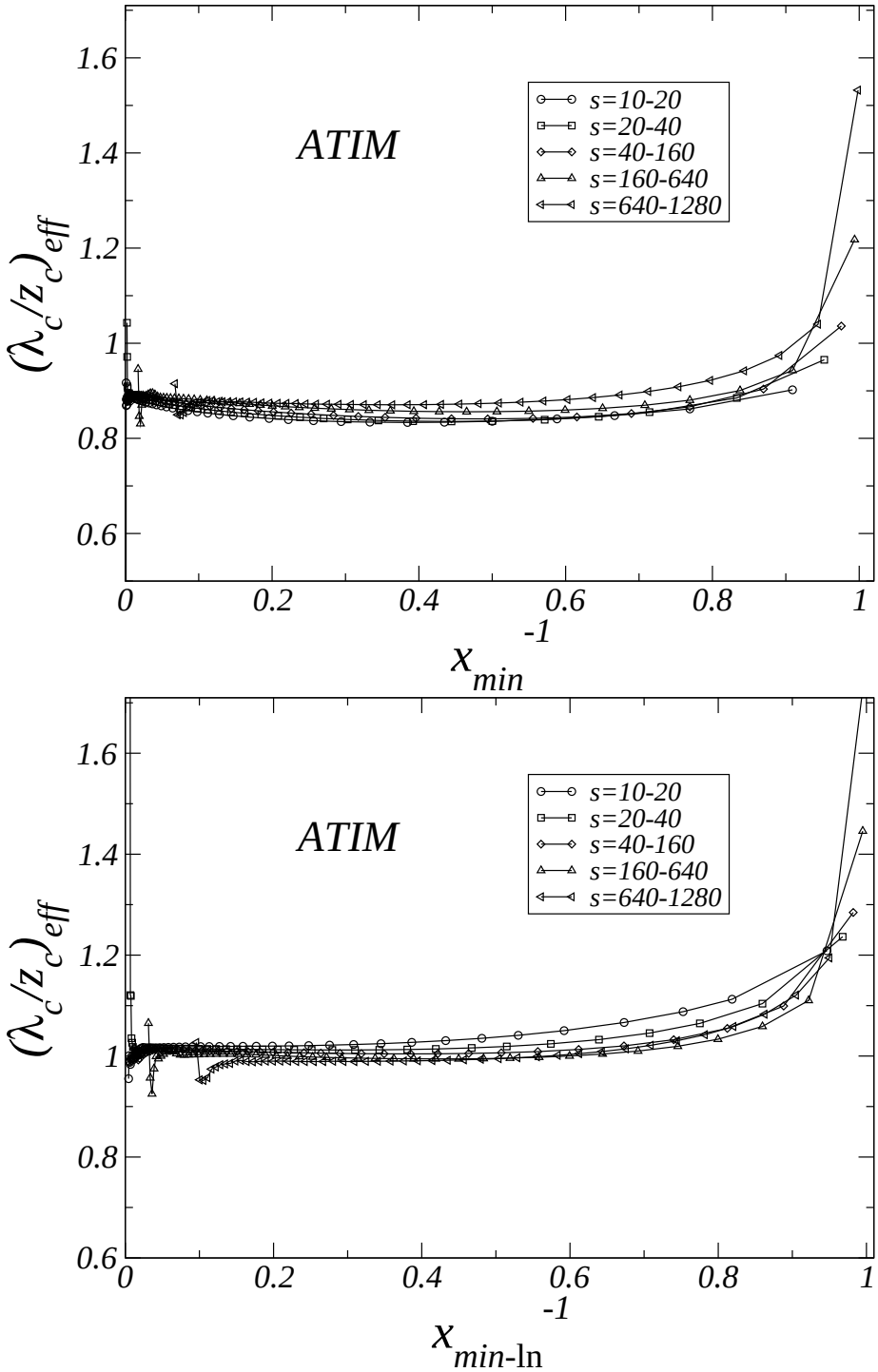


FIG. 5.21 – L'exposant effectif $(\lambda_c/z_c)_{eff}$ de l'autocorrélation spin-spin dans le régime de vieillissement pour le ATIM est obtenu par régression algébrique des courbes 5.19. Les résultats sont tracés en fonction de l'inverse x_{min} (en haut) et $x_{min-\ln}$ (en bas) qui correspondent à la borne inférieure de l'intervalle de régression sans et avec corrections logarithmiques. La valeur asymptotique se lit par extrapolation sur l'axe des ordonnées. On retient des valeurs identiques à celle du FSIM $\lambda_c/z_c = 0.91(2)$ (en haut) et $\lambda_c/z_c = 1.02(2)$ (en bas).

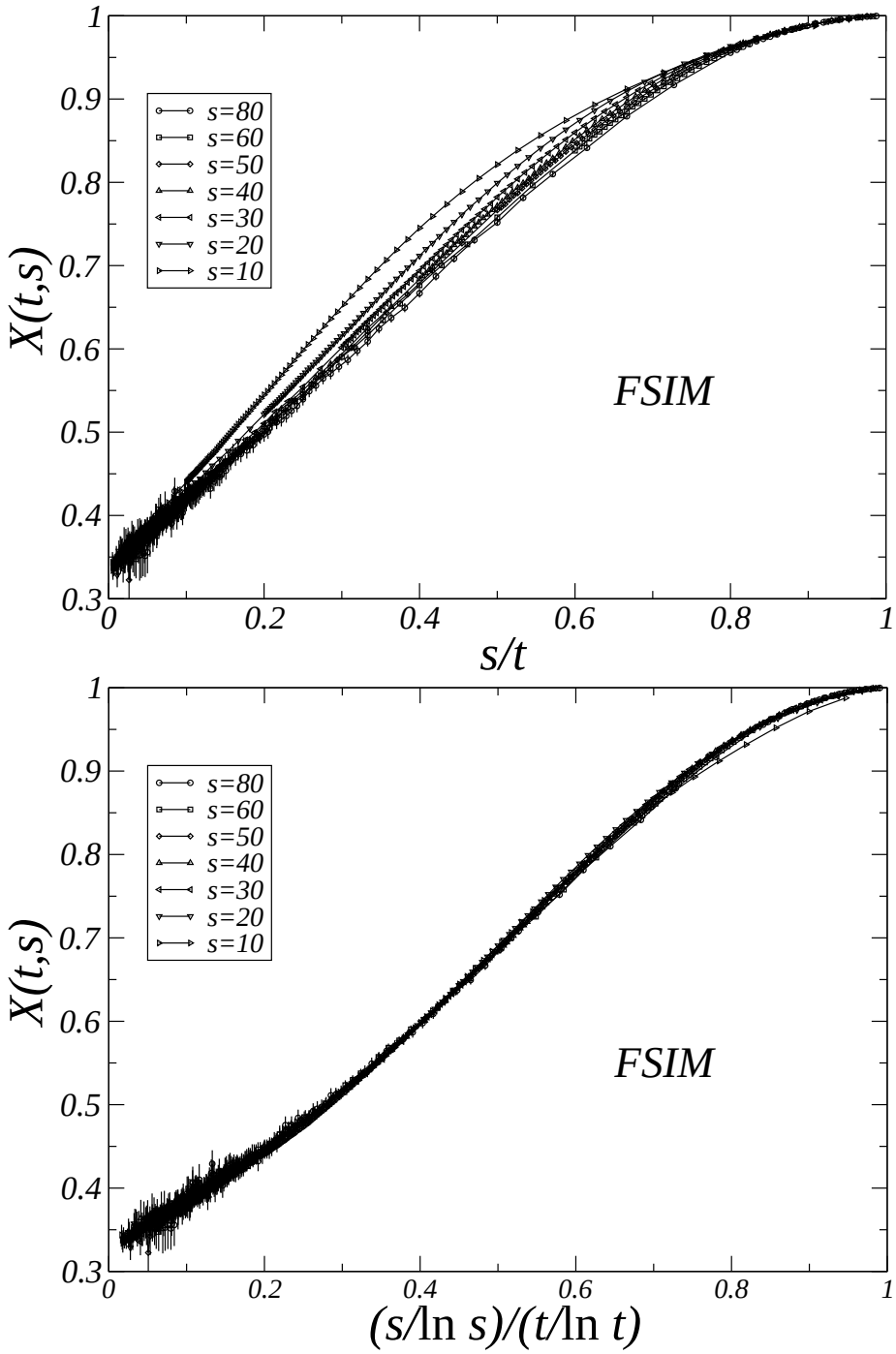


FIG. 5.22 – Le RFD dans le régime de vieillissement lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique est tracé pour le FSIM en fonction de l'inverse des variables d'échelle t/s (en haut) et $(t/\ln t)/(s/\ln s)$ (en bas) pour différents temps d'attente s. Les corrections logarithmiques permettent d'obtenir une superposition des courbes. L'extrapolation de ces courbes sur l'axe des ordonnées mène à la valeur asymptotique $X_\infty = 0.33(1)$.

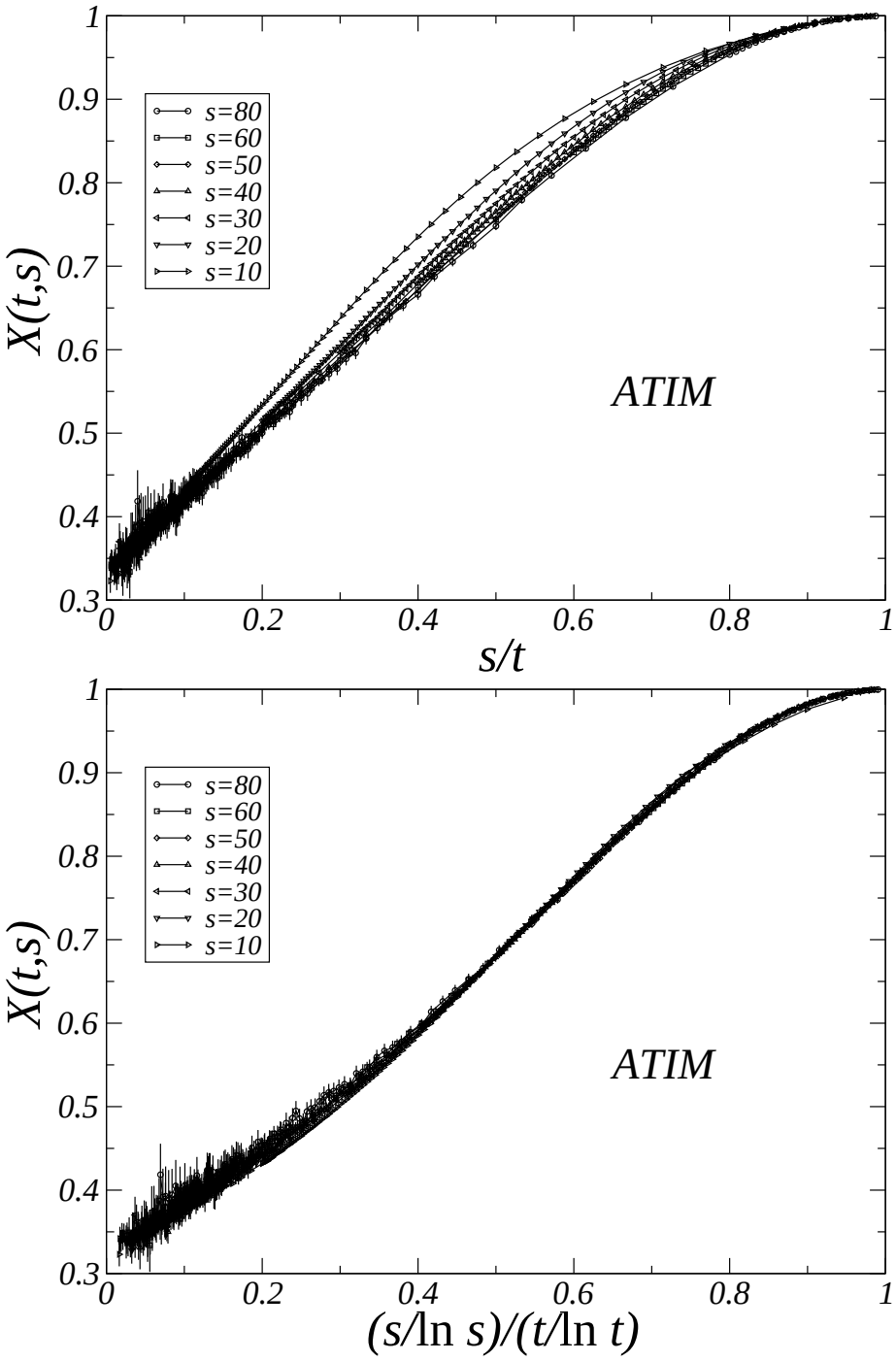


FIG. 5.23 – Le RFD dans le régime de vieillissement lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique est tracé pour le ATIM en fonction de l'inverse des variables d'échelle t/s (en haut) et $(t/\ln t)/(s/\ln s)$ (en bas) pour différents temps d'attente s. Les corrections logarithmiques permettent d'obtenir une superposition des courbes. L'extrapolation de ces courbes sur l'axe des ordonnées mène à la valeur asymptotique $X_\infty = 0.33(1)$, identique au résultat obtenu pour le FSIM.

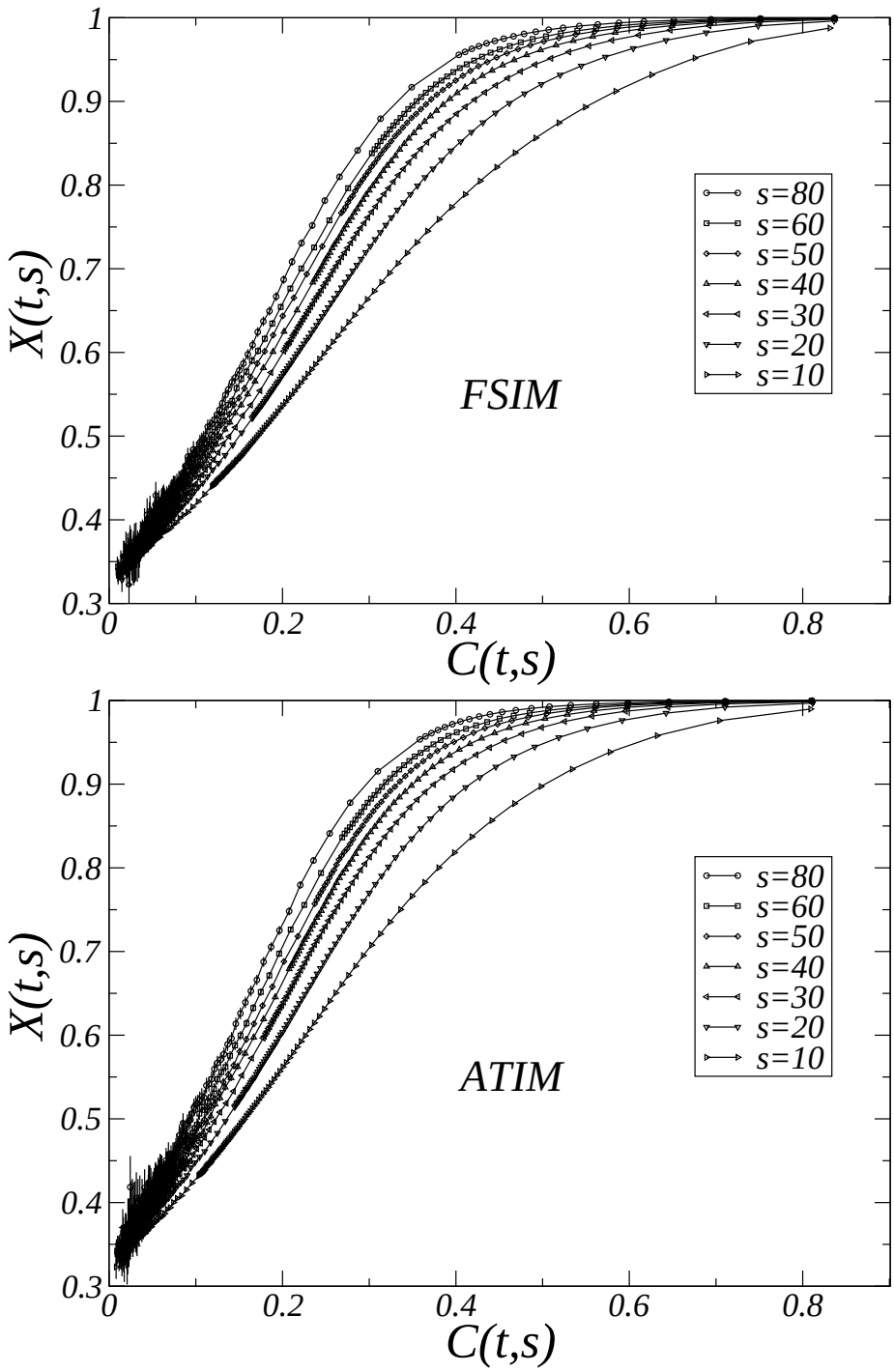


FIG. 5.24 – Le RFD $X(t,s)$ est tracé en fonction de l'autocorrélation $C(t,s)$. L'absence de superposition siginifie que le RFD n'est pas une fonction de $C(t,s)$ pour les paramètres qu'on considère, comme cela fut suggéré dans le contexte du vieillissement des modèles de champ moyen de verres de spins [Cugl94].

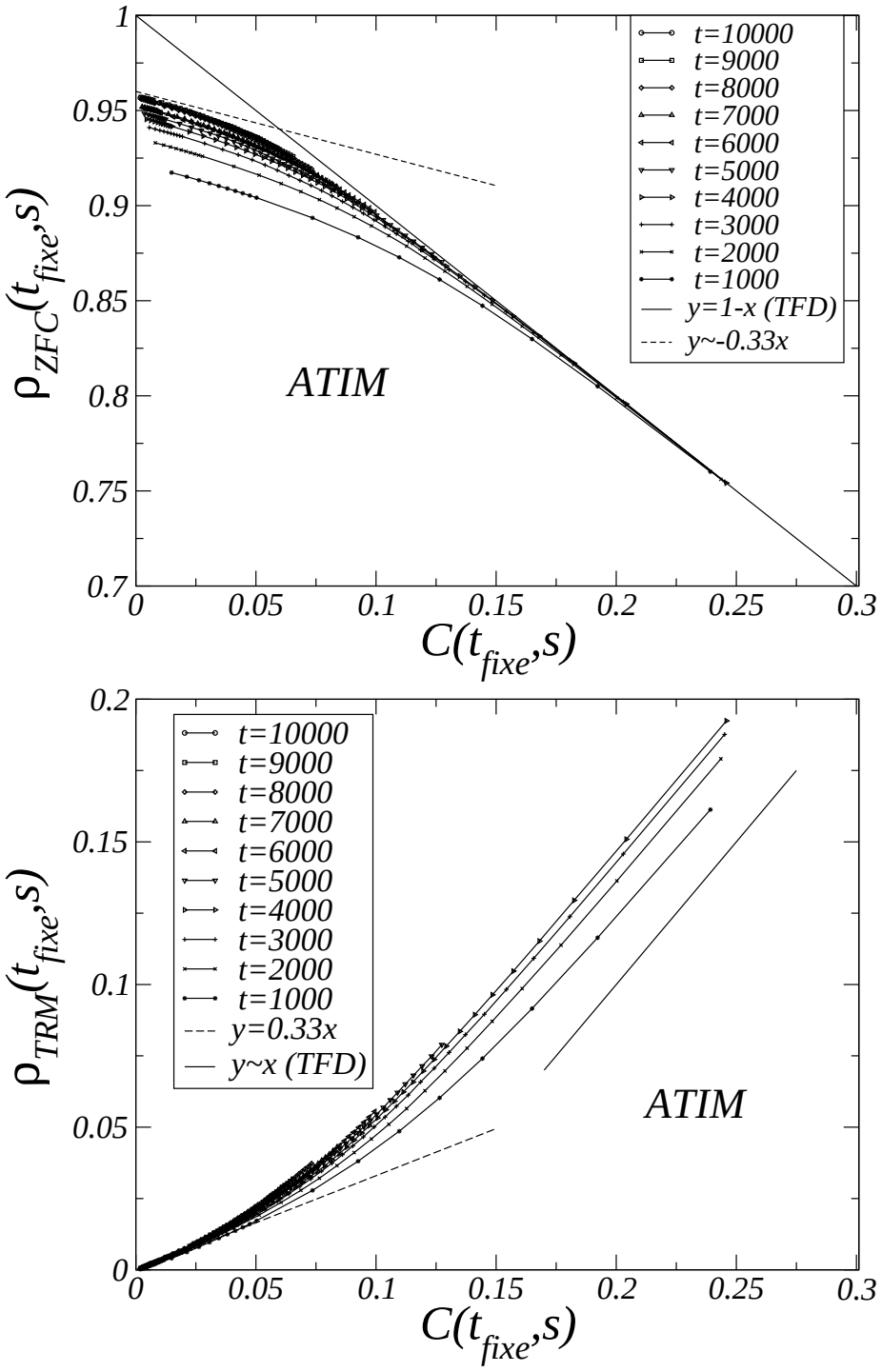


FIG. 5.25 – Ces résultats ont été obtenus pour une trempe du ATIM depuis la phase haute température jusqu'à la température critique. Nous avons tracé la réponse intégrée ZFC (en haut) et TRM (en bas) en fonction de l'autocorrélation pour un temps t fixé et un temps d'attente s qui varie (voir la discussion dans la sous-section 4.2.3). Dans les deux cas, la pente asymptotique dans le régime de vieillissement en pointillés est bien compatible avec l'estimation directe $X_\infty = 0.33(1)$. Nous avons également tracé en ligne pleine le théorème fluctuation-dissipation dans le régime de quasi-équilibre d'après les expressions (5.33) pour le protocole ZFC et (5.34) pour le protocole TRM.

Chapitre 6

Le vieillissement du modèle XY complètement frustré $2d$

Le but de ce chapitre est d'étudier le vieillissement du modèle XY bidimensionnel complètement frustré. Dans une première section, nous présentons les caractéristiques du modèle à l'équilibre : un état fondamental de symétrie particulière dont la description nécessite la définition d'une variable additionnelle, la chiralité, qui est définie comme le signe de la circulation des spins autour d'une plaquette [Vill77b]. L'état fondamental possède une symétrie continue associée à la rotation globale des spins comme pour le modèle XY et une symétrie discrète associée à l'inversion du signe de toutes les chiralités. Il est désormais établi que le système donne lieu à deux transitions pour chacune des symétries à des températures proches mais distinctes [Hase05]. Ce fait est soutenu par la présence de défauts topologiques de charges demi-entières sur les parois de domaines de la chiralité [Kors02]. La transition associée aux angles est sans ambiguïté de type Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless (BKT) *i.e.* gouvernée par l'appariement de défauts topologiques de charges opposées. En revanche, la transition de la chiralité a donné lieu à des débats dans la littérature. Des articles traitant de cette symétrie à l'équilibre apportent des arguments convaincants en faveur de l'appartenance de la transition chirale à la classe d'universalité d'Ising [Hase05]. Dans une deuxième section, nous présentons nos résultats concernant le vieillissement du modèle. L'objectif consiste tout d'abord à caractériser la dynamique lors de la brisure de deux symétries qui sont bien connues séparément : une transition de type BKT et une transition du second ordre dans la classe d'universalité du modèle d'Ising bidimensionnel. Puis nous souhaiterions caractériser l'effet des défauts topologiques sur la dynamique de chacunes des variables. Dans un premier temps, on s'intéresse au vieillissement des angles. Après une trempe du système depuis l'état fondamental jusque dans la phase basse température, le système donne lieu à du vieillissement. Les fonctions à deux temps sont décrites de façon semblable au modèle XY dans l'approximation des ondes de spin. Ce fait assure que l'exposant dynamique prend la valeur $z = 2$ dans toute la phase basse température. De plus, nous obtenons l'exposant η en bon accord avec les prédictions théoriques. Pour une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température

de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless, la forme d'échelle de l'autocorrélation est là aussi identique à celle du modèle XY avec notamment des corrections logarithmiques de la variable d'échelle qui manifestent la présence de défauts topologiques. Les estimations des quantités universelles qui caractérisent le vieillissement se révèlent différentes du modèle XY. Dans un deuxième temps, on s'intéresse au vieillissement de la chiralité pour une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique. Nous mettons en évidence la présence de corrections logarithmiques dans les variables d'échelle qui montrent l'influence des défauts topologiques dans la dynamique. Les grandeurs universelles sont incompatibles avec la classe d'universalité d'Ising.

6.1 Comportement critique à l'équilibre

6.1.1 L'état fondamental : deux symétries

Le modèle XY complètement frustré $2d$ (FFXY) a pour hamiltonien [Vill77a] :

$$\mathcal{H}_{FFXY} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \cos(\theta_i - \theta_j) \,, \tag{6.1}$$

où $\vec{S}_i$ est un spin à deux composantes de norme unité et défini dans le plan par un angle θ_i. Les constantes de couplage J_{ij} sont choisies de la même manière que le FFIM afin d'assurer la frustration complète du réseau carré. On a représenté sur la figure 6.1 deux plaquettes du FFXY dans l'état fondamental [Vill77b, Diep04]. Lorsqu'on varie l'intensité du couplage d'échange négatif par un préfacteur ω, il existe une valeur critique $\omega_c = 1/3$ en-dessous de laquelle l'état fondamental est ferromagnétique et au-dessus de laquelle l'état fondamental est constitué de spins qui tournent autour de la plaquette, ce qui conduit à une dégénérescence supplémentaire due au sens de rotation [Berg86]. Le sens de la rotation autour d'une plaquette p est défini à partir de la chiralité K_p :

$$K_p = \text{sign}\left(\sum_C J_{ij} \sin(\theta_i - \theta_j)\right) = \text{sign}\left(\sum_C J_{ij} (\vec{S}_i \wedge \vec{S}_j) \cdot \vec{u}_z\right) \,, \tag{6.2}$$

où la somme orientée s'étend au contour C de la plaquette p et $\vec{u}_z$ est le vecteur unitaire perpendiculaire au plan des spins. L'état fondamental du FFXY est obtenu en juxtaposant des plaquettes fondamentales. Sur la figure 6.2, on présente un exemple d'état fondamental pour une réalisation de frustration de type zigzag et domino. L'état fondamental est caractérisé par un arrangement de la chiralité similaire au modèle d'Ising antiferromagnétique. L'état fondamental est invariant par rotation globale des spins par le même angle (symétrie $U(1)$) et par inversion du signe de la chiralité de chaque plaquette (symétrie Z_2).
L'hamiltonien (6.1) peut s'écrire comme :

$$\mathcal{H}_{FFXY} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j + A_{ij}) \,, \tag{6.3}$$

où $A_{ij} = \pi$ ou 0 pour les couplages antiferro ou ferromagnétiques respectivement. On définit alors la quantité $U_p = \sum_C A_{ij} \quad [2\pi]$. On a $U_p = \pi$ pour le FFXY soit

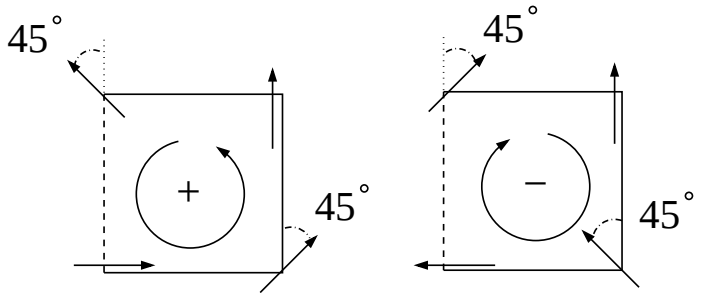


FIG. 6.1 – Deux plaquettes du FFXY dans l'état fondamental [Vill77b]. Les lignes continues et pointillées représentent des liaisons ferro et antiferromagnétiques. Les flèches circulaires représentent le sens de rotation des spins lorsqu'on parcourt une plaquette dans le sens trigonométrique. Les signes plus et moins correspondent aux signes des chiralités, qu'on définit positivement lorsque les spins tournent dans le sens trigonométrique.

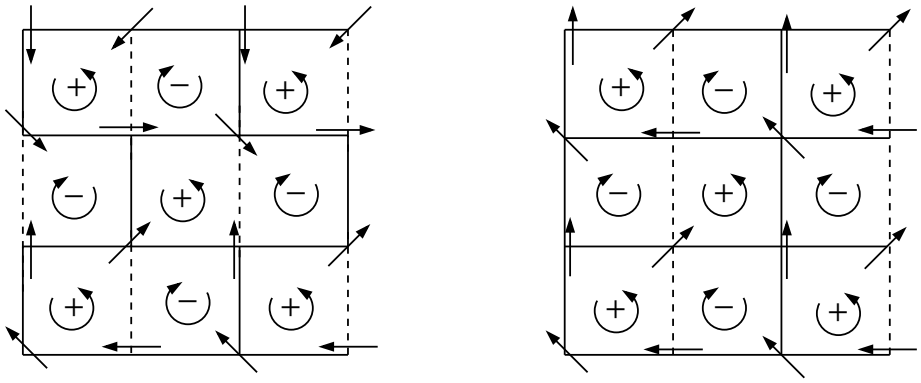


FIG. 6.2 – La juxtaposition de plaquettes fondamentales décrites sur la figure 6.1 permet d'obtenir des exemples d'états fondamentaux du FFXY sur un réseau frustré de type zigzag (à gauche) et domino (à droite).

$U_p = f2\pi$ où $f = 1/2$. Il existe de la frustration dès lors que $U_p \neq 0$. Il est possible de généraliser le modèle XY frustré pour différentes valeurs de f [Alba08, Choi85a, Kors95, Fran95, Hatt95, Lee95a, Stra97, Choi85b, Park00]. Il existe aussi d'autre façons de généraliser le FFXY [Minn07]. Notons que le FFXY possède le même hamiltonien qu'un réseau bidimensionnel de jonctions Josephson sous champ transverse (voir [Mart00] pour une revue).

6.1.2 Deux transitions

Le comportement critique du FFXY a donné lieu à des controverses dans la littérature portant sur l'existence d'une transition double ou unique pour les angles et la chiralité et sur l'appartenance de la chiralité à la classe d'universalité du modèle d'Ising (voir [Hase05] pour une revue avant 2005).

Les *kinks* de Korshunov

On appele T_{BKT}^{FF} la température de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless (BKT) des angles et T_{Ch} la température critique de la chiralité. Outre des preuves numériques notamment en étudiant le module d'hélicité et la susceptibilité, il existe des confirmations analytiques. En considérant les excitations de l'état fondamental du FFXY, Korshunov [Kors02] a apporté des arguments convaincants en faveur de transitions à des températures distinctes pour les angles et la chiralité telles que $T_{BKT}^{FF} < T_{Ch}$. À partir de l'état fondamental 6.2, il est possible de définir des excitations représentées par des parois entre plaquettes de même chiralité. Ces parois ont une énergie par unité de longueur qui est finie. Puisqu'elles sont créées par activation thermique, elles apparaissent sous forme de boucles à faible température. Des exemples de telles parois sont présentés sur la figure 6.3. Pour un type d'état fondamental fixé à gauche de la paroi, l'état fondamental de droite varie d'une phase globale π si la paroi se décale d'un pas de réseau [Hals85, Kors86b, Kors86a, Kors02]. Ces parois présentent des

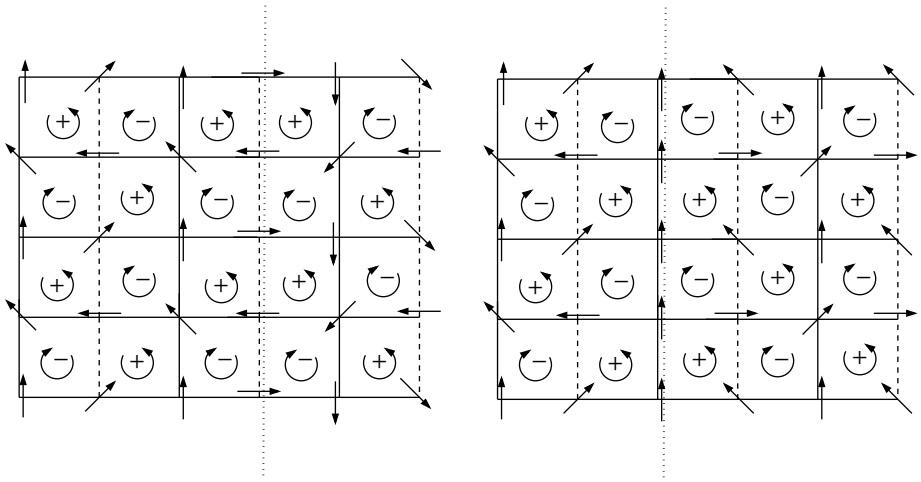


FIG. 6.3 – Les parois de domaines verticales en pointillés séparent les plaquettes qui possèdent la même chiralité. Pour un type d'état fondamental fixé à gauche des parois, le type d'état fondamental à droite varie d'une phase globale π si la paroi est décalée d'un nombre impair de pas de réseau [Hals85, Kors86b, Kors86a].

coudes (de l'anglais *kinks*). Les exemples d'un coude de hauteur unité et de hauteur

double sont représentés sur la figure 6.4. Ces coudes possèdent une charge topologique

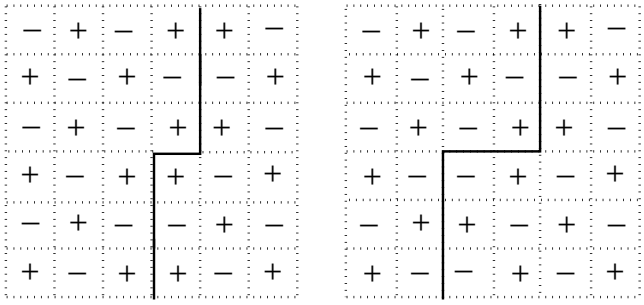


FIG. 6.4 – Exemple d'excitations du FFXY. Les lignes en pointillés représentent le réseau. La chiralité est représentée par les signes plus et moins. Les parois de domaines en traits pleins séparent les plaquettes de même chiralité. Les parois peuvent contenir des coudes (de l'anglais *kinks*) de hauteur unité à gauche et de hauteur double à droite auxquels sont associés de charges topologiques $\pm 1/2$. Pour des coudes simples, l'énergie diverge tandis que pour des coudes doubles, les charges qui sont de signes opposés s'écrantent, par analogie avec le modèle XY.

$\pm 1/2$ qui contient l'ensemble du déphasage. Par analogie avec les charges topologiques du modèle XY, l'énergie d'un coude de hauteur impaire diverge avec la taille du système, tandis que l'énergie d'un coude de hauteur paire reste finie car les charges sont écrantées. La situation peut être représentée par un gaz unidimensionnel de coudes de charges $1/2$. Les arguments du groupe de renormalisation mènent à une température de transition $T_{BKT}^{FF} < T_{Ch}$ [Kors02]. L'écart est cependant très faible comme on peut le constater en lisant les estimations numériques de ces températures dans la table 6.1.

Les classes d'universalité des deux transitions

La transition associée aux angles est sans ambiguïté de type Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless. Cependant, bien que le mécanisme d'appariement des défauts topologiques est identique au modèle XY, la classe d'universalité n'est pas nécessairement la même. Nous avons déjà abordé cette distinction avec le FFIM qui donne lieu également à une transition de type BKT mais avec $\eta = 1/2$ au lieu de $\eta = 1/4$ pour le modèle XY. En utilisant un formalisme de théorie des champs, on peut écrire le hamiltonien du FFXY (6.1) sous la forme de deux modèles XY couplés par un couplage pertinent sous une renormalisation de Migdal-Kadanoff. Dans la limite d'un couplage fort, le FFXY se réduit au modèle Ising-XY [Choi85a]. Cependant, à température suffisamment basse, on peut considérer que les deux modèles XY sont découplés. La fonction de partition correspondant au hamiltonien (6.1) peut se réécrire après une transformation de

Hubbard-Stratanovitch [Hubb59] à l'aide d'une action $\mathcal{S}$ définie par :

$$\mathcal{S} = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{k_B}{2\sqrt{2}J}(T - T^0_{FFXY}) + \frac{k_B T}{8\sqrt{2}J}|\vec{k}|^2 \right) \left(|\psi_1(\vec{k})|^2 + |\psi_2(\vec{k})|^2 \right) + \mathcal{O}(\psi^4)\,, \tag{6.4}$$

où $\psi_1(\vec{k})$ et $\psi_2(\vec{k})$ sont des champs complexes qui sont découplés à l'ordre ψ^2 et $T^0_{FFXY} = \sqrt{2}J/k_B$ est la température à laquelle s'annule le terme de masse $\frac{k_B}{2\sqrt{2}J}(T - T_0)$ et permet de retrouver un hamiltonien de type onde de spin. Un calcul identique pour le modèle XY mène à une action :

$$\mathcal{S}_{XY} = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{k_B}{4J}(T - T^0_{XY}) + \frac{k_B T}{16J}|\vec{k}|^2 \right) |\psi(\vec{k})|^2 + \mathcal{O}(\psi^4)\,, \tag{6.5}$$

où $T^0_{XY} = 2J/k_B$ annule le terme de masse. Ainsi, les résultats du modèle XY dans l'approximation des ondes de spins sont valables pour le FFXY à condition de remplacer J par $J/\sqrt{2}$. Puisque le modèle XY vérifie $\eta^{XY}(T) = k_B T/(2\pi J)$ (voir la section 4.3), on obtient pour le FFXY un exposant :

$$\eta(T) = \frac{k_B T}{\sqrt{2}\pi J}\,. \tag{6.6}$$

L'équivalence entre le FFXY et le modèle Ising-XY peut aussi se réaliser en appliquant le FFXY sur un modèle *19-vertex* [Knop94]. Il est également possible de réaliser une transformation du FFXY en un gaz de Coulomb de particules chargées par une transformation de Villain [Vill77b, Frad78, Olss95]. Le modèle devient un gaz de particules de charges demi-entières $\pm 1/2$ interagissant par un potentiel de Coulomb logarithmique. La classe d'universalité de la chiralité est controversée. La plupart des auteurs trouvent des exposants différents du modèle d'Ising (voir la table 6.1). Olsson [Olss95] a suggéré que la proximité de la transition de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless entraîne la présence de deux longueurs caractéristiques : la taille L du système et la longueur de corrélation ξ_{BKT} associée à la transition de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless. Le comportement d'effet de taille finie avec les exposants du modèle d'Ising $2d$ est valable lorsque $\xi_{ch} \gg \xi_{BKT}$ de telle sorte qu'une seule longueur caractéristique existe dans le système. Dix ans plus tard et avec des capacités informatiques supérieures, Hasenbusch *et al* [Hase05] montrent un changement de comportement critique entre la valeur $\nu \approx 0.8$ reportée dans la littérature et la valeur $\nu = 1$ du modèle d'Ising. Le comportement de type Ising est obtenu pour des réseaux de taille $L \approx 1000$. Ils expliquent aussi ce comportement par le fait que la longueur de corrélation des spins est très grande à la transition et perturbe la chiralité. Ce changement de comportement entre la valeur $\nu \approx 0.8$ et $\nu = 1$ est observée d'autres modèles reliés au FFXY : le modèle Ising-XY et une version du modèle ϕ^4 sur réseau.

Références	Méthode	T_{BKT}^{FF}	T_{Ch}	z	η	ν	β
[Thij90]	MCTM	0.464					$0.20(1)$
[Lee91]	MC	$0.455(2)$	$0.455(2)$		$0.31(3)$	$0.85(3)$	
[Gran93]	MCTM	$0.454(3)$			$0.38(3)$	$0.80(4)$	
[Rami94]	MC	0.446	0.4206			0.875	0.096
[Lee94]	MC	$0.440(2)$	$0.454(2)$			$0.813(5)$	$0.089(8)$
[Olss95]	MC	$0.4460(1)$	$0.452(1)$			1	
[Boub98]	MC	$0.4552(2)$	$0.4552(2)$		≈ 0.2	$0.852(2)$	
[Luo98]	MCHE		$0.4545(2)$	$2.17(4)$	$0.261(5)$	$0.81(2)$	$0.112(6)$
[Chen01]	MCHE		$0.4548(2)$	$2.20(4)$	$0.276(7)$	$0.80(2)$	$0.110(6)$
[Luo02]	MCHE		$0.4544(2)$	$2.24(3)$	$0.265(4)$	$0.813(13)$	$0.108(3)$
[Ozek03]	MCHE	$0.449(1)$	$0.4535(5)$	$2.61(6)$	$0.272(15)$	$0.82(2)$	$0.111(8)$
[Hase05]	MC	$0.4461(1)$	$0.45324(1)$		0.25	1	
[Nie06a]	TDGL		$0.4590(3)$	$2.24(5)$	$0.240(5)$	$0.84(3)$	$0.101(5)$
[Nie06b]	MCHE		$0.4541(2)$	$2.08(4)$	$0.251(3)$	$0.80(2)$	$0.100(4)$

TAB. 6.1 – Différentes estimations de la température critique T_{ch} et des exposants associés à la chiralité pour le FFXY par méthode Monte Carlo à l'équilibre (MCE), par relaxation hors équilibre (MCHE) et par relaxation du modèle de Ginzburg-Landau (TDGL de l'anglais *Time-Dependant Ginzburg-Landau dynamics*). Nous avons aussi indiqué l'estimation de la température critique T_{BKT}^{FF} associée aux spins.

6.2 Vieillissement du FFXY lors d'une trempe

6.2.1 Vieillissement des angles

Vieillissement depuis l'état fondamental jusque $T \leq T_{BKT}^{FF}$

On effectue ici une trempe depuis l'état fondamental jusque dans la ligne critique. Nous avons vu plus haut que le hamiltonien du FFXY peut s'écrire dans l'approximation des ondes de spin comme un modèle XY de couplage effectif $J/\sqrt{2}$. Lors d'un tel protocole, la dynamique du modèle XY est gouvernée par les ondes de spin et les fonctions à deux temps se calculent exactement [Bert01, Bray00, Cug94] comme nous l'avons vu dans la section 4.3. On s'attend à la même forme d'échelle pour l'autocorrélation du FFXY donnée par l'expression (4.67) dont on rappelle la forme :

$$C(t,s) \sim (t-s)^{-\eta/2} \left(\frac{t+s}{\sqrt{ts}} \right)^{\eta/2} , \tag{6.7}$$

avec un exposant $\eta(T)$ donné par (6.6). Pour les simulations, nous avons préparé le système, qui possède une configuration de frustration de type domino, dans l'état fondamental illustré sur la figure 6.2. Puis nous avons mesuré l'autocorrélation spin-spin suivant la définition :

$$C(t,s) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle \vec{S}_i(t) \cdot \vec{S}_i(s) \rangle , \tag{6.8}$$

pour une trempe aux températures $T = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8T_{BKT}^{FF}$ et T_{BKT}^{FF}, en utilisant la valeur $\beta_{BKT}^{FF} = 2.2415(5)$ qui est l'estimation la plus précise de la littérature [Hase05]. Nous avons utilisé une dynamique locale de type Glauber. Le réseau est de dimensions 256×256 avec des conditions de bords périodiques. Les temps d'attente sont $s = 200$, 400, 600, 800, 1200, 1600, 2400, 3200, 4800, 5600 and 6400 et le temps de mesure final est $t_f = 60000$. Chaque température est moyennée sur 12000 configurations initiales. Afin d'optimiser le temps de calcul, nous avons effectué les mesures à toutes les itérations Monte Carlo entre $t = 0$ et $t = 1000$ puis une itération sur 5 entre $t = 1000$ et $t = 10000$ et finalement une itération sur 10 entre $t = 10000$ et $t_f = 60000$. Le temps nécessaire à une itération Monte Carlo est approximativement de 42ms soit 0.64μs par spin sur des processeurs *Xeon quad-core* de fréquence 2GHz. La durée de simulation totale par température est de 8400h, ou encore 350 jours. Nous avons utilisé une dizaine de processeurs pour chaque température, ce qui a ramené le calcul à un mois. Nous obtenons les courbes présentées sur la figure 6.5 pour les différentes températures. Dans la colonne de gauche, les données sont tracées en fonction de $t - s$. Après un régime de quasi-équilibre où les courbes se superposent pour des temps d'attente différents, on entre dans un régime de vieillissement où elles se séparent. Notons aussi que l'autocorrélation décroît d'autant plus rapidement que la température finale est élevée. À partir du régime de quasi-équilibre, il est possible de déterminer l'exposant η comme nous l'expliquons plus bas (nos estimations sont données dans la table 6.2. Cela nous permet de tracer les fonctions d'échelle (6.7) présentées dans la colonne de droite. Pour les plus grands temps d'attente, les courbes sont indistinguables aux barres d'erreur près, ce qui montre que le régime de vieillissement de l'autocorrélation est bien décrit par le calcul dans l'approximation des ondes de spin. Cela implique notamment un exposant dynamique $z = 2$, en accord avec l'étude de dynamique aux temps courts de Luo *et al* [Luo98] et l'étude de la relaxation hors équilibre de Zheng *et al* [Zhen03], toutes deux en partant d'un état initial ordonné. On constate une superposition des courbes jusqu'à T_{BKT}^{FF} pour les paramètres que nous avons utilisés, ce qui implique que la forme d'échelle (6.7) est valide dans toute la ligne critique.
À partir de la forme (6.7), il est possible d'obtenir l'exposant $\eta(T)$ à partir de la contribution de quasi-équilibre $(t-s)^{-\eta/2}$. Pour cela, on considère la fonction de corrélation dans le plan formé par les axes t et s et on fixe l'argument de la contribution au vieillissement *i.e.* on se place sur les courbes :

$$\frac{t+s}{\sqrt{ts}} = \kappa = \text{Cste}\,. \tag{6.9}$$

Le long de ces courbes, l'exposant $\eta(T)/2$ est obtenu par une interpolation linéaire de $\ln C(t,s)$ en fonction de $\ln(t-s)$. Les résultats sont tracés en fonction de $1/\kappa$ sur la figure 6.6. Le régime de quasi-équilibre a lieu pour des valeurs de s et t comparables, donc pour les petites valeurs de κ, à droite de la figure 6.6. Afin de tester la possibilité d'un régime transitoire entre petites et grandes valeurs de s, nous avons réalisé l'interpolation avec différents intervalles de temps d'attente : toutes les valeurs de s (cercles), $s \geq 400$ (carré), $s \geq 600$ (diamants) et $s \geq 5600$ (étoiles). On constate que toutes les courbes se superposent, même si les fluctuations augmentent lorsque le nombre de temps d'attente est réduit. L'estimation de $\eta(T)$ à T_{BKT}^{FF} se révèle très bruitée et nous n'avons pas tracé la régression. Nous obtenons $\eta(T_{BKT}^{FF}) = 0.27(2)$.

Des estimations plus précises pour la gamme de températures autour de T_{BKT}^{FF} ont été obtenues dans la littérature, notamment par relaxation hors équilibre [Zhen03]. Nos résultats pour l'exposant η sont résumés dans la table 6.2 et tracés en fonction de T sur la figure 6.7. Ces estimations sont en bon accord avec de précédentes études et

T	$\eta/2$ (MC)	$\eta/2$ (SW)
$0.2T_{BKT}^{FF}$	$0.0106(6)$	0.0100
$0.4T_{BKT}^{FF}$	$0.0225(9)$	0.0201
$0.6T_{BKT}^{FF}$	$0.0358(8)$	0.0301
$0.8T_{BKT}^{FF}$	$0.0536(20)$	0.0402
T_{BKT}^{FF}	$0.135(10)$	0.0502

TAB. 6.2 – Nous présentons nos estimations Monte Carlo (MC) de l'exposant $\eta(T)/2$ obtenues par interpolation de l'autocorrélation dans le régime de quasi-équilibre. Pour comparaison, nous présentons aussi les valeurs prédites dans l'approximation des ondes de spin (SW) d'après l'expression (6.6).

avec la prédiction dans l'approximation des ondes de spins pour des températures suffisamment basses. À notre connaissance, la seule estimation numérique de $\eta(T)$ dans la littérature dans le régime de l'approximation des ondes de spin [Lee95b] est effectuée à partir de la superposition des fonctions de corrélation spatiales lors d'une trempe depuis la phase haute température. Ces auteurs ne considèrent pas de corrections logarithmiques des variables temporelles. Il obtiennent un exposant effectif $z \neq 2$ qui dépend de la température, ce qui n'est visiblement pas le cas ici, puisque la validité de la fonction d'échelle obtenue dans l'approximation des ondes de spin certifie que $z = 2$ pour $0 < T \leq T_{BKT}^{FF}$.

Il est également possible d'extraire l'exposant $\eta(T)$ en utilisant la partie de vieillissement de la fonction d'autocorrélation. Pour cela, on réalise une interpolation de $\log((t-s)^{\eta/2}C(t,s))$ en fonction de $\log((t+s)/\sqrt{ts})$ afin d'obtenir l'exposant associé aux courbes tracées dans la colonne de droite de la figure 6.5. Puisque le régime de vieillissement est obtenu pour des temps t et s distants, on est contraint d'utiliser des valeurs faibles et donc bruitées de l'autocorrélation. Afin d'observer les corrections au comportement asymptotique, on fait varier la borne inférieure $t_{min} \in [s+1; 60.000]$ sur lequel l'interpolation est réalisée. Les résultats sont tracés sur la figure 6.8 en fonction de $1/t_{min}$. Les valeurs à droite de la figure sont obtenues en réalisant une interpolation sur tous les points disponibles $t \in [s+1; 60.000]$ ($t_{min} = 1$) tandis que les valeurs à gauche sont obtenues avec les trois derniers points $t \in [59.998; 60.000]$ ($t_{min} = 59.998$). La convergence vers le régime asymptotique s'effectue donc à gauche de la figure. Les différents symboles correspondent aux différentes valeurs de temps d'attente. Les résultats sont de qualité inférieure par rapport à ceux obtenus à partir du régime de quasi-équilibre. On se contente de noter la compatibilité des deux estimations.

Dans l'approximation des ondes de spin, le RFD présente une divergence pour $t_0/s_0 = 2 + \sqrt{5}$ comme pour le modèle XY [Bert01, Abri04b], en accord avec l'expression

(4.69) :

$$X(t,s) = \frac{k_B T R(t,s)}{\partial_s C(t,s)} \sim \frac{s(t+s)}{t^2 - 4ts - s^2} \,. \tag{6.10}$$

Afin de tester ce comportement pour les spins du FFXY, nous avons calculé le RFD à l'aide de la fonction d'autoréponse qui nécessite l'introduction d'un terme Zeeman dans le hamiltonien sous la forme :

$$-\sum_i \vec{h}_i \vec{S}_i \,, \tag{6.11}$$

où le champ $\vec{h}_i = (h_i^1, h_i^2)$ et les spins $\vec{S}_i = (S_i^1, S_i^2)$ possèdent deux composantes. La réponse est la somme des contributions de chaque composante :

$$R(t,s) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} \sum_{\mu=1}^{2} \left. \frac{\delta \langle S_i^\mu(t) \rangle}{\delta h_i^\mu(s)} \right|_{h^\mu \to 0} \,. \tag{6.12}$$

Nous évaluons la fonction de réponse par la méthode sans champ présentée dans la sous-section 4.2.2. L'état initial fondamental et les températures de trempe finales sont les mêmes que pour les simulations de l'autocorrélation. Nous ne présentons pas ici les résultats pour T_{BKT}^{FF} qui sont trop bruités. Les paramètres ont été ajustés afin de moyenner sur un nombre suffisant d'histoires thermiques. Nous avons choisi un réseau de taille 192×192, un temps final $t_f = 4000$ et les temps d'attente $s = 60$, 80, 100, 120, 140 et 160. Ces paramètres nous ont permis de moyenner sur 25000 configurations initiales pour une trempe à 0.2 et $0.4T_{BKT}^{FF}$ et 45000 pour 0.6 et $0.8T_{BKT}^{FF}$. Plus la température finale est élevée et plus les fluctuations sont importantes, et donc plus le nombre d'histoires requis pour avoir des données correctes est important. Nous avons effectué les mesures à tous les temps entre $t = s$ et $t = 100$, un temps sur deux entre $t = 100$ et $t = 1000$ et un temps sur vingt entre $t = 1000$ et $t_f = 4000$. La durée totale des calculs cumulée pour toutes les températures est approximativement de 153 jours en partant sur une base de 0.64μs par spin, sur un processeur *Xeon quad-core* de fréquence 2GHz. Pour illustration, le RFD pour une trempe depuis l'état fondamental jusquà $0.2T_{BKT}^{FF}$ est tracé sur la figure 6.9 en fonction de t/s. On constate que pour des temps d'attente finis, des corrections à la forme d'échelle (4.69) entraînent un décalage de l'endroit de la divergence par rapport à la valeur prédite dans l'approximation des ondes de spin. Sur la figure 6.10, l'endroit de la divergence t_0/s_0 est tracée en fonction de s pour chaque température de trempe. On observe une dépendance linéaire en fonction de $1/s$ dont la limite est consistante avec la prédiction de l'approximation des ondes de spin (4.69) lorsque s tend vers l'infini.

Trempe depuis un état initial désordonné jusqu'à T_{BKT}^{FF}

Nous avons réalisé une trempe du FFXY depuis un état désordonné jusqu'à la température $T_{BKT}^{FF} = 0.4461(2)$ ($\beta_{BKT}^{FF} = 2.2416(10)$) [Hase05]. Dans un premier temps, nous calculons le rapport fluctuation-dissipation du FFXY. Parallèlement, pour comparaison, nous avons aussi calculé le rapport fluctuation-dissipation du modèle XY trempé à la température de Berezinskiĭ-Kosterlitz-Thouless $T_{BKT}^{XY} = 0.8929(1)$

($\beta_{BKT}^{XY} = 1.1199(1)$) [Hase97, Hase05a]. L'intérêt de ce calcul est double. Premièrement, on s'attend à une modification de la variable d'échelle dans les expressions obtenues dans l'approximation des ondes de spins. Cette modification est due à la présence de défauts topologiques libres dans la phase haute température [Yurk93, Rute95b, Bray94, Bray00] comme nous l'avons discuté dans la section 4.3. Deuxièmement, le RFD mène asymptotiquement à un rapport d'amplitude universel qui permet de comparer les classes d'universalité des deux modèles. Le RFD est calculé suivant le protocole décrit dans la sous-section précédente. Lors des simulations du FFXY, nous avons utilisé un réseau de dimensions 192, un temps final $t_f = 4000$, une moyenne sur 500000 histoires thermiques et des temps d'attente $s = 60$, 80, 100, 120, 140, 160 et 180. Ce calcul a nécessité environ 546 jours sur des proceseurs *Xeon quad-core* de fréquence 2GHz. Pour le modèle XY, nous avons choisi des paramètres plus modestes : le réseau est de dimension 128×128, le temps final est aussi $t_f = 4000$ et les temps d'attente sont $s = 10$, 20, 40, 80, 100 et 200, et une moyenne sur 100000 histoires thermiques s'est révélée suffisante. Les résultats sont présentés sur la figure 6.11. On estime les valeurs asymptotiques $X_\infty = 0.385(15)$ pour le FFXY et $X_\infty = 0.215(15)$ pour le modèle XY. Ces valeurs sont nettement incompatibles. Cependant, pour les deux modèles, l'utilisation de corrections logarithmiques de la variable d'échelle permet une superposition des courbes ce qui met en évidence le rôle des vortex dans la relaxation. On note que la valeur obtenue pour le modèle XY $X_\infty = 0.215(15)$ est en contradiction avec une estimation précédente dans la littérature $X_\infty \approx 0.5$ [Abri04b] qui fut obtenue en calculant la pente de la réponse intégrée TRM $\rho_{TRM}(t,s)$ en fonction de l'autocorrélation $C(t,s)$ par la méthode erronée à s fixé et t qui varie (voir la discussion dans la sous-section 4.2.3 pour le modèle d'Ising). Nous rappelons comment il est possible d'obtenir X_∞ à partir de ce type de courbes :

$$\lim_{t,s\to\infty} \rho_{ZFC}(t,s) = X_\infty(1 - C(t,s))\,, \tag{6.13}$$

tandis que dans le régime de quasi-équilibre :

$$\rho_{ZFC}(t,s) = 1 - C(t,s)\,. \tag{6.14}$$

Afin de confirmer notre estimation directe pour le modèle XY, nous avons tracé sur la figure 6.12 $\rho_{ZFC}(t,s)$ en fonction de $C(t,s)$ pour une valeur t fixée et s qui varie. Nous obtenons une valeur en accord avec l'estimation directe $X_\infty = 0.215(15)$.
Suivant le même protocole, nous calculons l'autocorrélation afin de tester la forme d'échelle (voir la section 4.3 pour l'apparition des corrections logarithmiques de la variable d'échelle à partir de l'expression (6.8)) :

$$C(t,s) \underset{t,s\to\infty}{\sim} (t-s)^{-\eta/2} \left(\frac{t\ln s}{s\ln t}\right)^{-\phi}\,. \tag{6.15}$$

Nous calculons l'autocorrélation suivant la définition (6.8). Les paramètres de simulations sont modifiés. Le réseau est de dimensions 256×256, le temps final est $t_f = 120000$ et la moyenne est réalisée sur 5000 histoires thermiques. Les temps d'attente sont $s = 500$, 1000, 2000, 4000, 8000 et 12000. Ces calculs nécessitent environ 390 jours de calcul sur un processeur *Xeon quad-core* de fréquence 2GHz. Les résultats

sont tracés sur la figure 6.13. À gauche, l'autocorrélation est tracée en fonction de $t-s$ et nous permet de constater l'apparition d'une brisure de l'invariance par translation temporelle après un régime de quasi-équilibre. À droite, nous avons tracé la fonction d'échelle. Pour des valeurs suffisamment grandes de la variables d'échelle, il existe un régime de vieillissement puisqu'on observe une superposition des courbes. La fonction d'échelle décroît algébriquement avec un exposant $\phi = 0.74(3)$, ce qui mène à un exposant $\lambda/z = \phi + \eta/2 = 0.87(3)$ (voir la discussion de la sous-section 4.2.1 pour les conventions d'exposants). Cette valeur est légèrement supérieure à celle obtenue dans le régime de temps court $\lambda/z = d/z - \theta = 0.808(3)$ [Luo98] à partir de l'exposant θ définit dans la sous-section 4.2.1. Le modèle XY présente une valeur inférieure : $\lambda/z = 0.625(4)$ dans [Luo98] (où les corrections logarithmiques n'ont pas été envisagées), $\lambda/z = 0.738(4)$ dans [Zhen03] et $\lambda/z = 0.738(5)$ dans [Lei07].

6.2.2 Vieillissement de la chiralité

Nous avons finalement réalisé une trempe du système depuis un état désordonné jusqu'à la température critique de la chiralité T_{Ch}. Nous avons commencé par calculer le rapport fluctuation-dissipation de la chiralité :

$$X(t,s) = \frac{k_B T R(t,s)}{\partial_s C(t,s)} \,. \tag{6.16}$$

La fonction d'autoréponse $R(t,s)$ de la chiralité est obtenue en couplant chaque plaquette p à un terme Zeeman :

$$-\sum_p h_p K_p \,, \tag{6.17}$$

ce qui permet la définition d'une fonction de réponse :

$$R(t,s) = \frac{1}{N}\sum_{p=0}^{N} \frac{\delta\langle K_p(t)\rangle}{\delta h_p(s)}\bigg|_{h\to 0} \,. \tag{6.18}$$

Cette quantité peut alors être déterminée par la méthode sans champ présentée dans la sous-section 4.2.2. L'autocorrélation est définie par :

$$C(t,s) = \frac{1}{N}\sum_{p=0}^{N} \langle K_p(t) K_p(s)\rangle \,, \tag{6.19}$$

dont la dérivée par rapport au temps s combinée à l'autoréponse permet le calcul du RFD (6.16). Lors d'un tel protocole, on s'attend à une décroissance du RFD vers une valeur universelle X_∞ (voir la sous-section 4.2.3). Là encore, l'intérêt de ce calcul est double : examiner s'il existe des corrections à la variable d'échelle liées aux défauts topologiques et estimer la valeur asymptotique afin de la comparer à celle du modèle d'Ising. La littérature offre une large gamme d'estimation pour T_{Ch} comme on peut le voir dans la table 6.1. Nous avons effectué les mêmes simulations à deux températures différentes : $T_{Ch}^{(1)} = 0.45324(1)$ [Hase05] qui est la valeur la plus précise

de la littérature et $T_{Ch}^{(2)} = 0.4545(2)$ qui fait partie des estimations les plus précises obtenues par simulations Monte Carlo hors équilibre *i.e.* une méthode semblable à celle que nous utilisons. On a choisi un réseau de dimensions 192×192, un temps final $t_f = 2000$ et la moyenne est effectuée sur 10^6 histoires thermiques. Le temps de calcul par chiralité est du même ordre que pour les spins ce qui mène à un calcul de 546 jours sur un processeur. Les temps d'attente sont $s = 10$, 20, 30, 40, 50, 60, et 80. Les résultats sont tracés sur la figure 6.14 pour $T_{Ch}^{(1)}$ et sur la figure 6.15 pour $T_{Ch}^{(2)}$ en fonction de $(s/\ln s)/(t/\ln t)$ (en haut) et s/t (en bas) de sorte que la valeur asymptotique X_∞ est extrapolée sur l'axe des ordonnées. La superposition des courbes est améliorée avec les corrections logarithmiques de la variable d'échelle, ce qui donne une évidence de l'influence des défauts topologiques sur la dynamique de la chiralité. Nos estimations des valeurs X_∞ aux températures $T_{Ch}^{(1)}$ et $T_{Ch}^{(2)}$ sont respectivement $X_\infty^{(1)} = 0.410(10)$ et $X_\infty^{(2)} = 0.405(5)$ avec des corrections logarithmiques. Puisque ces valeurs sont compatibles, cela signifie qu'une variation faible de température autour du point critique a peu d'influence sur l'estimation du RFD. Notons que l'absence de corrections logarithmiques mène à des valeurs asymptotiques compatibles. Dans tous les cas, l'estimation du RFD est clairement incompatible avec la valeur obtenue pour le modèle d'Ising ferromagnétique $X_\infty = 0.330(5)$ [Chat04].
Nous souhaitons désormais caractériser le comportement de l'autocorrélation. On s'attend à la forme :

$$C(t,s) \underset{t,s\to\infty}{\sim} s^{-a_c}\tilde{\mathcal{C}}\left(\frac{\xi(t)}{\xi(s)}\right) , \tag{6.20}$$

où $\tilde{\mathcal{C}}$ est une fonction d'échelle. Puisque des logarithmes sont attendus dans la croissance de la longueur caractéristique, on peut réécrire (6.20) :

$$C(t,s) \underset{t,s\to\infty}{\sim} s^{-a_c}\mathcal{C}\left(\frac{t\ln s}{s\ln t}\right) , \tag{6.21}$$

où $\mathcal{C}(x)$ est une fonction d'échelle qui se comporte asymptotiquement selon :

$$\mathcal{C}(x) \underset{x\to\infty}{\sim} x^{-\lambda_c/z_c} . \tag{6.22}$$

Ainsi, la fonction de corrélation permet de comparer les quantités universelles a_c et λ_c/z_c avec les valeurs connues du modèle d'Ising. Nous avons aussi mesuré l'autocorrélation de la chiralité suivant la définition (6.19) en suivant le même protocole que lors des simulations du RFD, mais les paramètres sont différents. Nous avons choisi un réseau de dimensions 256×256, un temps final $t_f = 120000$ et la moyenne est réalisée sur 5000 histoires thermiques. Les temps d'attente sont $s = 500$, 1000, 2000, 4000, 8000 et 12000. Ces calculs ont nécessité environ 390 jours de calcul sur un processeur *Xeon quad-core* de fréquence 2GHz. Les résultats sont présentés sur la figure 6.16 pour la température $T_{Ch}^{(1)}$ et sur la figure 6.17 pour la température $T_{Ch}^{(2)}$. En haut, pour les deux températures, les données sont tracées en fonction de $t - s$. Après un régime de quasi-équilibre, les courbes se séparent et le système présente une brisure d'invariance par translation temporelle. En bas, dans la figure principale, les mêmes données sont tracées selon une fonction d'échelle (6.21). Pour les résultats de

la trempe à la température $T_{Ch}^{(1)}$ sur la figure 6.16, la superposition des courbes est obtenue pour un exposant $a_c = 0.0(1)$, qui est très éloigné de la valeur du modèle d'Ising $a_c \approx 0.115$ ainsi que des valeurs obtenues par simulations Monte Carlo hors équilibre (voir table 6.1). Dans l'insert du graphe de droite, nous avons tracé l'exposant λ_c/z_c obtenu par interpolation de la fonction d'échelle de l'autocorrélation sur l'intervalle $[x_{min}; (t_{max}/\ln t_{max})/(s/\ln s)]$ en faisant varier la borne inférieure de l'intervalle x_{min}. Les données sont tracées en fonction de $1/x_{min}$ de sorte que la valeur asymptotique se lit à gauche. On estime la valeur $\lambda_c/z_c \approx 0.84$ qui n'exclut cependant pas la valeur du modèle d'Ising $\lambda_c/z_c \approx 0.73$ tracée en pointillés car les données évoluent avec le temps d'attente et ne nous permettent pas, pour les paramètres utilisés de fournir des barres d'erreur. La forme d'échelle (6.21) est incohérente et semble manifester un comportement de système trempé dans la phase basse température. Nous avons deux explications : soit le *cross-over* vers la forme d'échelle (6.21) s'effectue à des temps bien plus grands que ceux qui sont accessibles actuellement, soit l'estimation de $T_{Ch}^{(1)}$ obtenue par extrapolation des effets de taille finie est erronée. Pour les résultats de la trempe à la température $T_{Ch}^{(2)}$ en bas de la figure 6.17, la superposition des courbes est obtenue pour un exposant $a_c = 0.10(2)$, qui est compatible avec la valeur du modèle d'Ising $a_c \approx 0.115$ et en bon accord avec les valeurs obtenues par simulations Monte Carlo hors équilibre (voir table 6.1). Cette estimation permet d'obtenir une forme d'échelle (6.21) cohérente. Dans l'insert du graphe de droite, nous avons tracé l'exposant λ_c/z_c obtenu par interpolation de la fonction d'échelle de l'autocorrélation sur l'intervalle $[x_{min}; (t_{max}/\ln t_{max})/(s/\ln s)]$ en faisant varier la borne inférieure de l'intervalle x_{min}. Les données sont tracées en fonction de $1/x_{min}$ de sorte que la valeur asymptotique se lit à gauche. On estime la valeur $\lambda/z \approx 0.98(5)$. La valeur du modèle d'Ising $\lambda_c/z_c \approx 0.73$ tracée en pointillés est exclue car les données sont stables avec le temps d'attente. Notons que l'absence de logarithmes n'affecte pas de façon significative la valeur de l'exposant. Ces résultats montrent que la mesure de l'autocorrélation est plus sensible que le RFD à la valeur de la température de trempe.

Il est possible de mettre plus nettement en évidence les corrections logarithmiques de la chiralité en effectuant une trempe dans la phase basse température depuis un état désordonné. Nous avons calculé la corrélation spatiale chiralité-chiralité à temps égaux $C(r,t)$ afin de mettre en évidence la croissance de la longueur caractéristique. On s'attend à la forme :

$$C(r,t) \sim \mathcal{C}_{sc}^{sp}(r/\xi(t))\,, \tag{6.23}$$

où l'on doit distinguer entre les formes de croissance $\xi(t) \sim t^{1/2}$ et $\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/2}$ puisque pour un tel protocole, l'exposant dynamique est $z = 2$ dans toutes la phase basse température. Les simulations sont effectuées pour une température finale $T_{Ch}/2$, un réseau de dimensions 400×400. Les mesures sont réalisées aux temps $t = 80$, 160, 320, 640, 1280, 2560, 5120, 10240 et 20480. La corrélation est moyennée sur 1000 histoires thermiques. Le nombre de configurations est relativement faible de sorte que les barres d'erreur sont importantes. Les résultats présentés sur la figure 6.18 ont juste une valeur suggestive. En comparant la superposition des courbes pour les variables d'échelle $r/t^{1/2}$ (à gauche) et $r/(t/\ln t)^{1/2}$ (à droite), on s'aperçoit que les corrections logarithmiques améliorent clairement la superposition des courbes lorsque la valeur $z = 2$ est utilisée, ce qui permet de mettre en évidence le rôle des défauts to-

pologiques dans la phase basse température. Des simulations plus précises et à d'autres températures sont requises pour être plus affirmatifs. Notons qu'il a été mesuré par simulation Monte Carlo un exposant dynamique qui dépend de la température [Lee95b]. On a notamment $z(T_{Ch}/2) \approx 2.5$. Les données de cet articles pourraient être réanalysées avec des corrections logarithmiques dans la variable d'échelle.

Le modèle XY complètement frustré $2d$ présente un état fondamental original invariant sous le groupe de symétrie $U(1)$ pour les spins et sous le groupe de symétrie Z_2 pour la chiralité. La littérature est source de débats depuis deux décennies autour de deux questions. La première concerne l'existence ou non de deux températures distinctes pour chaque brisure de symétrie. Les arguments phénoménologiques de Korshunov suggèrent la présence de charges topologiques demi-entières sur les parois de domaines de la chiralité. La présence de ces charges entraîne deux températures distinctes, où la brisure de symétrie de la chiralité intervient à plus haute température que T_{BKT}^{FF} pour les spins. Cependant, la différence est très faible et la détermination numérique précise de ces températures par simulations Monte Carlo demeure un défi technique. La deuxième question concerne l'appartenance ou non de la transition de la chiralité à la classe d'universalité du modèle d'Ising. Un article récent de Hasenbusch *al* utilise à la fois des arguments du groupe de renormalisation et des simulations Monte Carlo extensives à l'équilibre et affirment que la classe d'universalité de la chiralité est bien celle du modèle d'Ising. Nous avons étudié le vieillissement du modèle XY complètement frustré $2d$ par simulations Monte Carlo locales de type Glauber. Les caractéristiques du vieillissement pour le modèle XY et le modèle d'Ising sont bien connues comme nous l'avons vu dans le chapitre 4. Il est intéressant de voir quel est l'effet de la symétrie inhabituelle sur ces dynamiques connues, effets qui se manifestent notamment par la présence de défauts topologiques sur les murs de domaines de la chiralité. Dans un premier temps, nous avons réalisé une trempe du système dans la ligne critique en partant d'un état fondamental. La mesure de la corrélation spin-spin et du rapport fluctuation-dissipation permet de mettre en évidence un régime de vieillissement. Ces fonctions sont décrites par les formes analytiques obtenues par dynamique de Langevin dans l'approximation des ondes de spin, comme pour le modèle XY. Ce résultat est prévisible puisqu'il est possible de réécrire à très basse température le hamiltonien du FFXY comme un modèle XY avec un terme de couplage effectif $J/\sqrt{2}$. Par ailleurs, nos mesures de l'autocorrélation permettent une estimation de l'exposant $\eta(T)$. Puisque la dynamique est décrite par une équation de Langevin, nos résultats assurent que l'exposant dynamique est $z = 2$ dans toute la ligne critique, en accord avec des études Monte Carlo antérieures. Puis, toujours pour les variables angulaires, nous effectuons une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température de Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless T_{BKT}^{FF} [Bere71, Kost73, Kost74] du FFXY. Pour ce protocole, on s'attend à des corrections logarithmiques de la variable d'échelle dues à la présence de vortex libres dans l'état initial. Ces corrections sont mises en évidence pour la corrélation spin-spin et le RFD. De plus, nous mettons en évidence un régime de vieillissement pour ces fonctions et nous estimons les grandeurs universelles telles que l'exposant de décroissance de l'autocorrélation $\phi = 0.74(3)$ et la valeur asymptotique du RFD $X_\infty = 0.385(15)$. Nous comparons ces valeurs avec celles du modèle XY. Elles se révèlent incompatibles. Finalement, nous réalisons une

trempe de la chiralité depuis la phase haute température jusqu'à la température critique T_{Ch}. Puisque les estimations de T_{Ch} dans la littérature sont éloignées, nous faisons les mêmes simulations à deux températures différentes. L'une correspond à l'estimation la plus précise de la littérature qui est obtenue à l'équilibre. L'autre correspond à l'une des estimations les plus précises obtenue par relaxation hors équilibre. Les corrections logarithmiques se manisfestent pour le RFD dont la valeur asymptotique est par ailleurs peu sensible aux variations de températures. L'autocorrélation est plus sensible au choix de températures et une forme d'échelle cohérente est obtenue avec la température déterminée par relaxation hors équilibre. Ces fonctions présentent un régime d'échelle où il est possible d'estimer les grandeurs universelles telles que l'exposant de décroissance de l'autocorrélation $\lambda_c/z_c = 0.98(5)$ et la valeur asymptotique du rapport fluctuation-dissipation $X_\infty = 0.405(5)$ qui sont incompatibles avec les valeurs correspondantes pour le modèle d'Ising $2d$. Bien que nos valeurs semblent stables en fonction du temps d'attente, nous n'excluons pas un *cross-over* pour des valeurs plus grandes de temps d'attente qui sont inaccessibles avec les capacités informatiques à notre disposition. Notons finalement que les corrections logarithmiques dans la croissance de la longueur caractéristique sont mises en évidence avec la corrélation chiralité-chiralité spatiale à un temps lors d'une trempe depuis la phase haute température jusque dans la phase basse température.

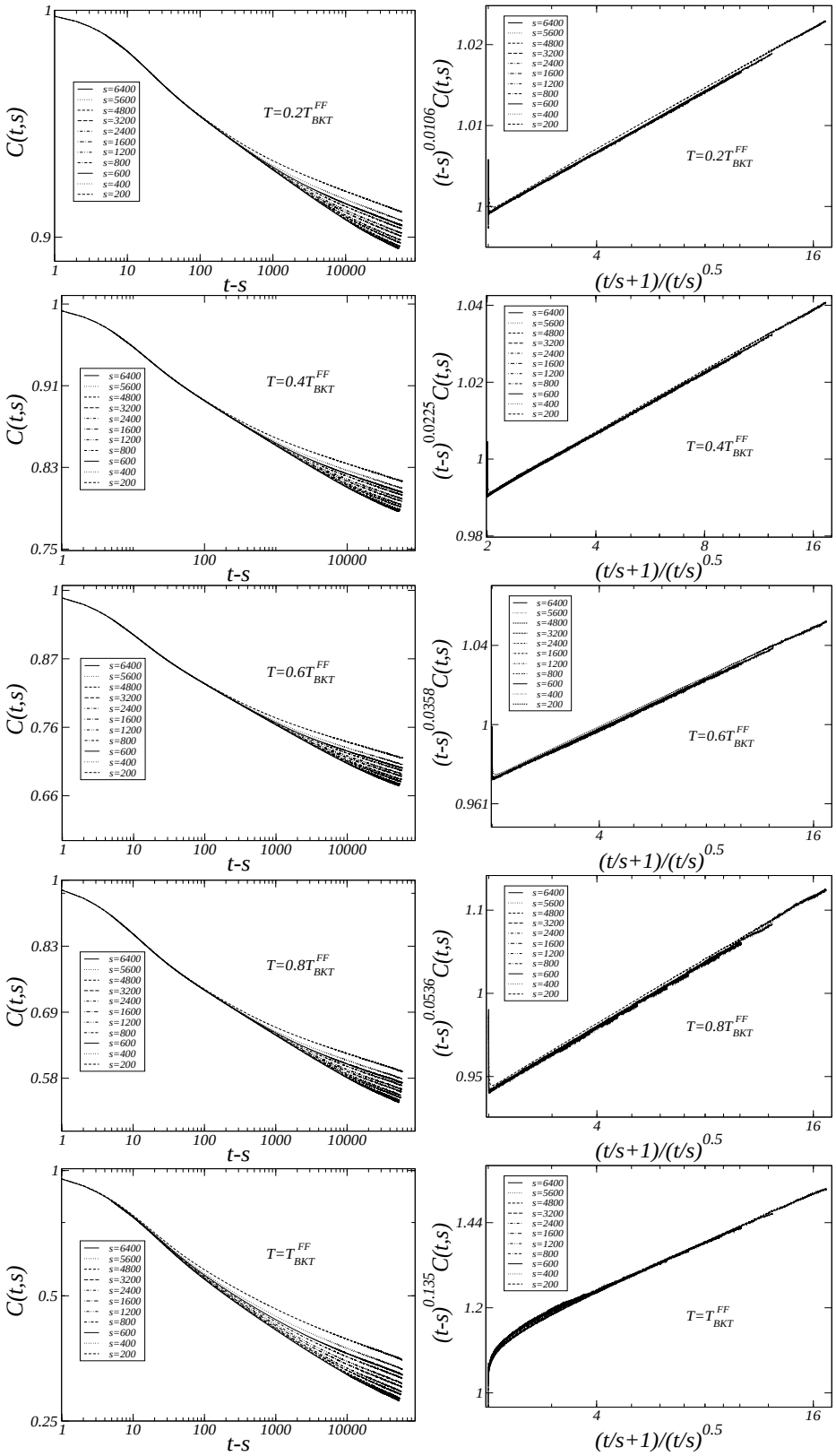


FIG. 6.5 – Nous avons tracé les données obtenues pour l'autocorrélation spin-spin $C(t,s)$ du FFXY en partant d'un état initial fondamental et en trempant le système aux températures $T = 0.2$, 0.4, 0.6, $0.8T_{BKT}^{FF}$ et T_{BKT}^{FF} (de haut en bas). La colonne de gauche représente la fonction de corrélation en fonction de $t-s$ pour les différentes températures. La colonne de droite représente les fonctions d'échelle d'après la relation (6.7), où on a utilisé les valeurs de $\eta(T)$ déterminées dans le régime de quasi-équilibre. Pour les plus grands temps d'attente, la superposition est bonne.

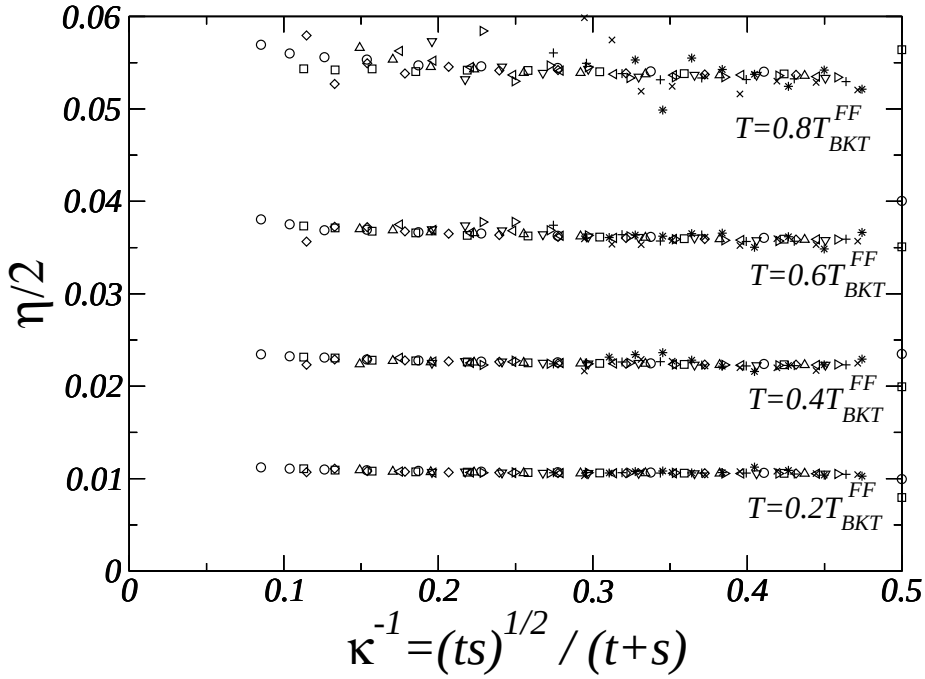


FIG. 6.6 – Estimation de l'exposant $\eta/2$ à partir de la régression algébrique de la contribution du régime de quasi-équilibre de l'expression (6.7). Les résultats sont tracés en fonction de $\kappa^{-1} = \sqrt{ts}/(t+s)$ (voir le texte pour les détails). Ce régime est attendu pour $t \sim s$, donc pour les petites valeurs de κ, à droite de la figure. L'interpolation est réalisée avec différentes valeurs de temps d'attente : toutes les valeurs de s (cercles), $s \geq 400$ (carré), $s \geq 600$ (diamants) et $s \geq 5600$ (étoiles). Pour une température donnée, toutes les courbes sont compatibles et on ne constate aucun régime transitoire.

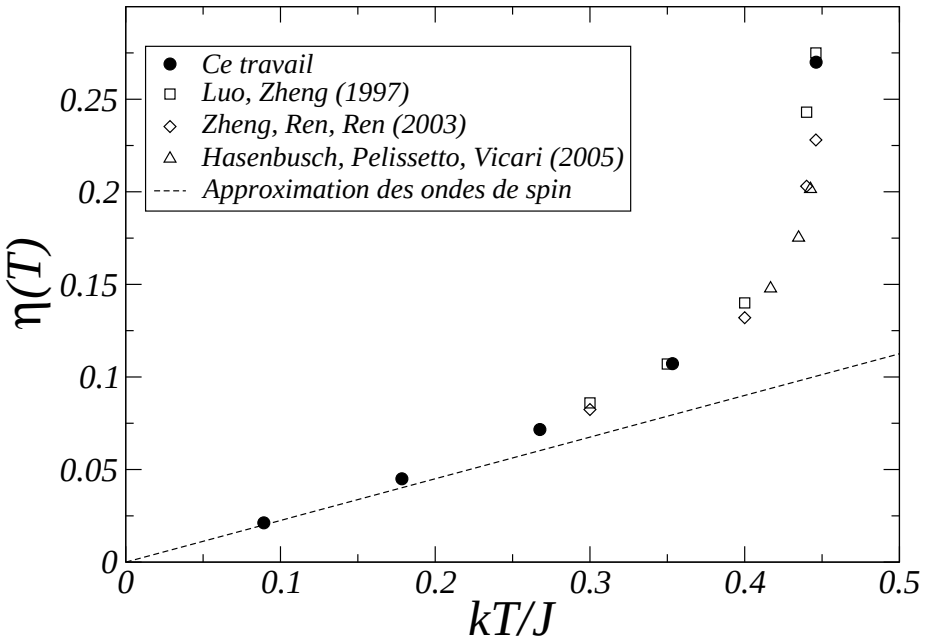


FIG. 6.7 – Nos estimations de $\eta(T)$ obtenues à partir de l'autocorrélation spin-spin par interpolation de l'expression (6.7) sont comparées avec les estimations de la littérature et avec la solution dans l'approximation des ondes de spin valable à basse température. Le bon accord dans les différents régimes justifie la forme d'échelle (6.7)

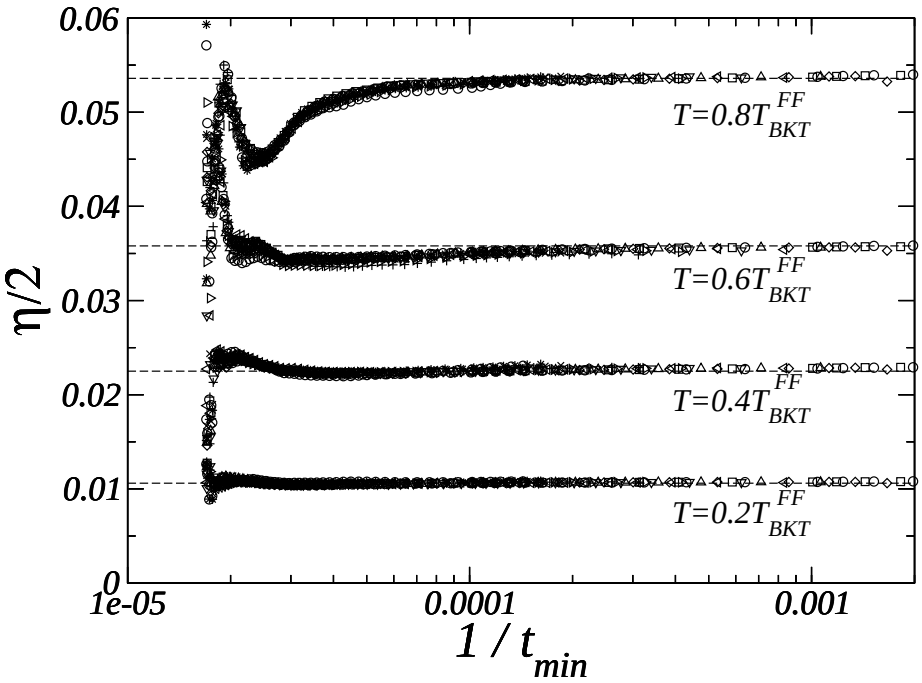


FIG. 6.8 – Détermination de l'exposant $\eta(T)/2$ à partir de la contribution de vieillissement des fonctions d'échelle tracées dans la colonne de droite de la figure 6.5. Nous avons effectué une régression algébrique en faisant varier la borne inférieure t_{min} de l'intervalle de régression (voir le texte pour les détails). Les résultats de l'analyse sont très bruités et on se contente ici de vérifier la compatibilité de cette méthode avec les estimations réalisées à partir de la contribution de quasi-équilibre tracées en lignes pointillées.

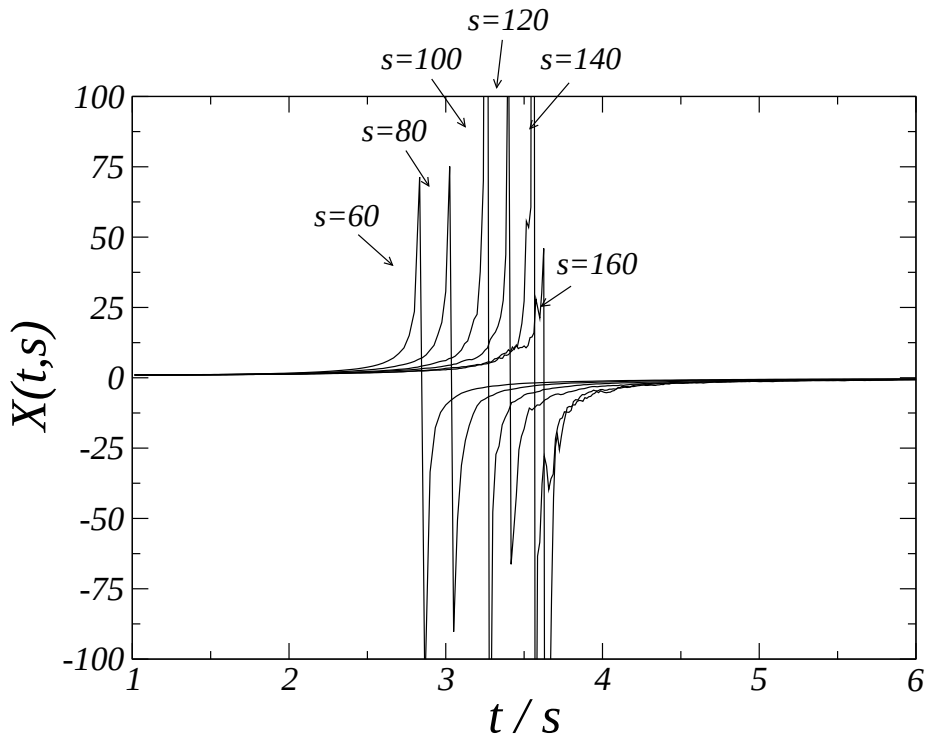


FIG. 6.9 – Le RFD pour une trempe depuis l'état fondamental jusqu'à $0.2T_{BKT}^{FF}$ est tracé en fonction de la variable d'échelle t/s. On observe une discontinuité qui évolue avec le temps d'attente.

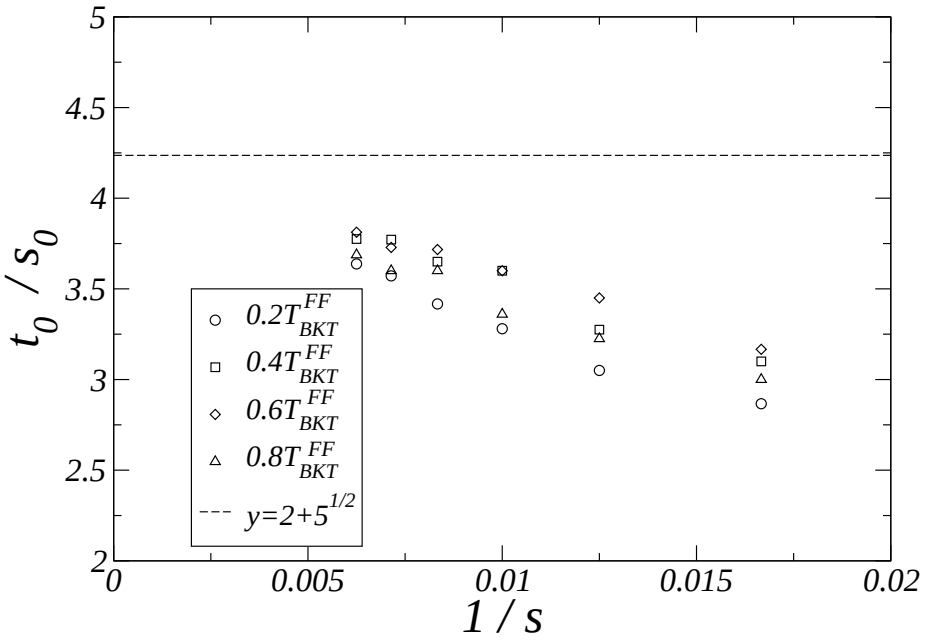


FIG. 6.10 – La valeur du rapport t_0/s_0 pour lequel on observe une discontinuité du RFD est tracée en fonction de l'inverse du temps d'attente. Pour $s \to \infty$, on observe une convergence linéaire vers la valeur théorique $2 + \sqrt{5} \approx 4.24$ prévue dans l'approximation des ondes de spin (6.10).

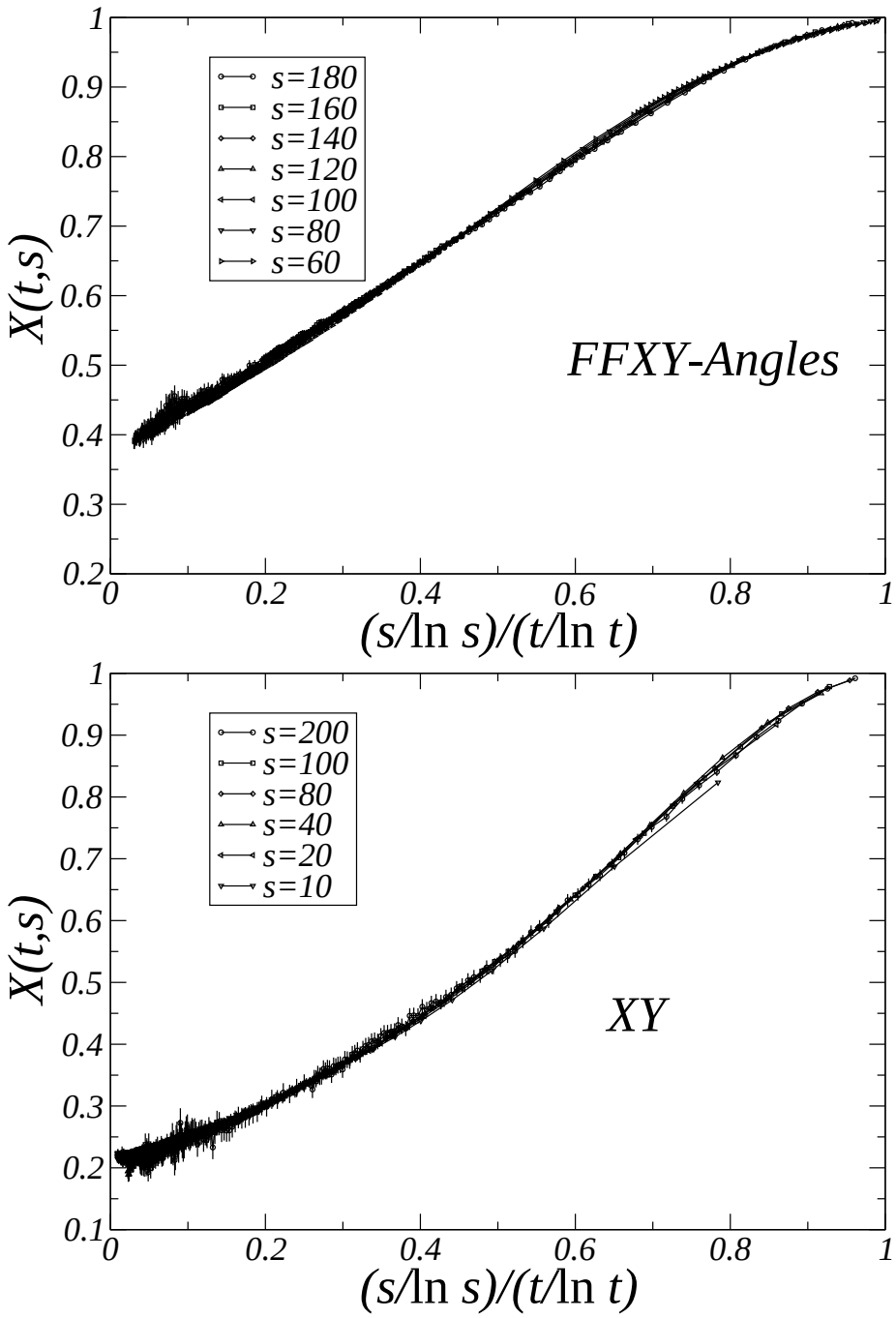


FIG. 6.11 – Le rapport fluctuation-dissipation des variables angulaires pour une trempe depuis la phase haute température jusqu'à T_{BKT}^{FF} pour le FFXY (en haut) et jusqu'à T_{BKT}^{XY} pour le modèle XY (en bas) est tracé en fonction de l'inverse de la variable d'échelle $(t/\ln t)/(s/\ln s)$ de sorte que la valeur asymptotique se lit par extrapolation sur l'axe des ordonnées. Les valeurs asymptotiques sont clairement incompatibles puisqu'on estime respectivement $X_\infty = 0.385(15)$ pour le FFXY et $X_\infty = 0.215(15)$ le modèle XY. Pour les deux modèles, des corrections logarithmiques permettent d'obtenir une superposition des courbes.

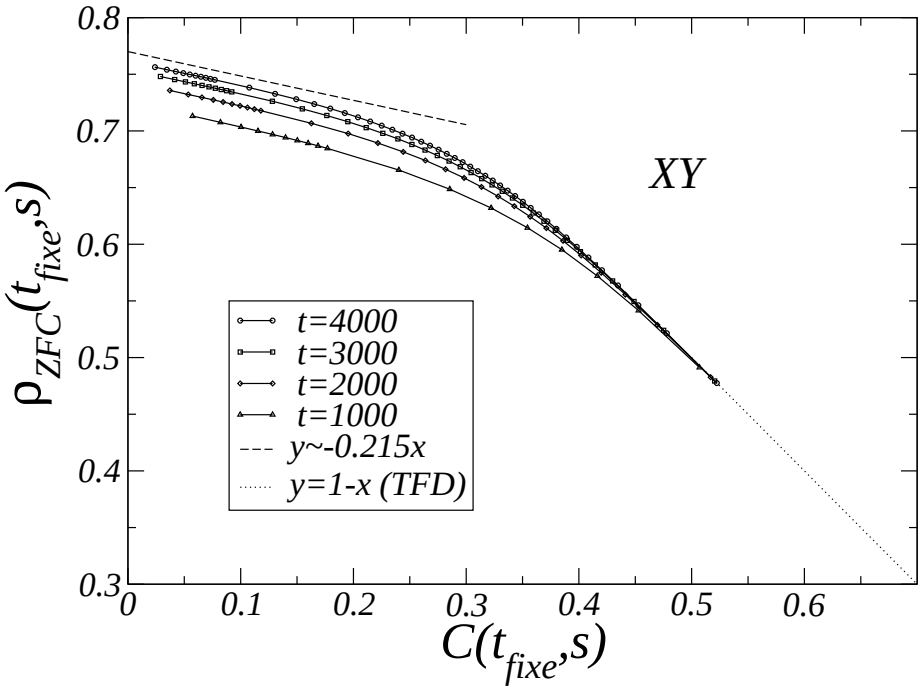


FIG. 6.12 – Nous avons tracé la réponse intégrée ZFC $\rho_{ZFC}(t,s)$ en fonction de l'autocorrélation $C(t,s)$ pour un temps t qui est fixé et un temps s qui varie lors d'une trempe du modèle XY depuis la phase haute température jusqu'à T_{BKT}^{XY}. Dans le régime de quasi-équilibre (à droite de la figure, pour les grandes valeurs de $C(t,s)$), les données sont décrites par le théorème fluctuation-dissipation (TFD) selon l'expression (6.14). Puis, dans le régime de vieillissement, nous obtenons une pente asymptotique $X_\infty \approx 0.215$ qui est en accord avec l'estimation directe $X_\infty = 0.215(15)$ présentée sur la figure 6.11.

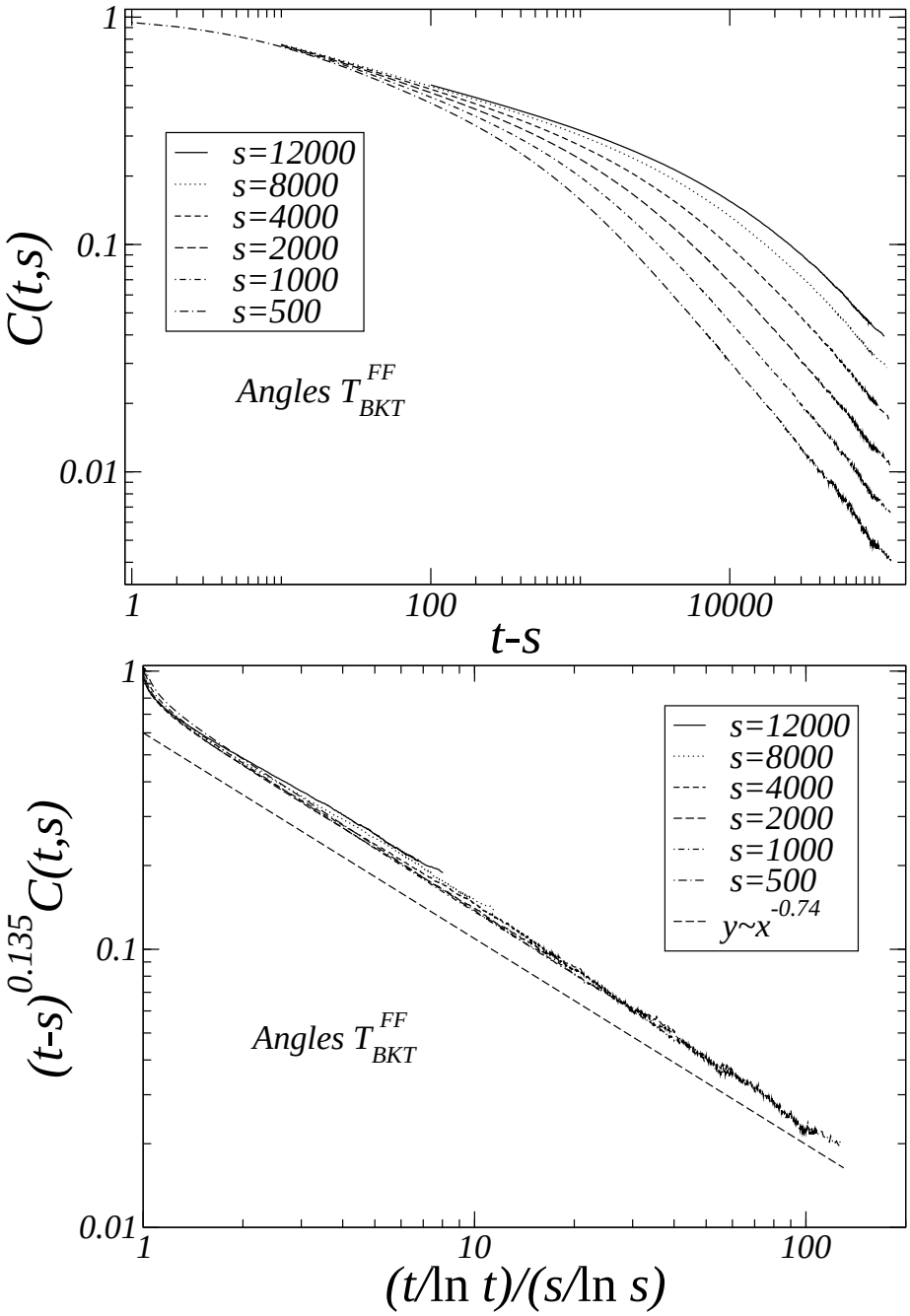


FIG. 6.13 – En haut, l'autocorrélation spin-spin du FFXY pour une trempe depuis un état désordonné jusqu'à la température T_{BKT}^{FF} est tracée en fonction de $t - s$, ce qui permet de constater un régime de quasi-équilibre, puis l'apparition de la brisure d'invariance par translation temporelle. En bas, on a tracé la fonction d'echelle (6.15) de l'autocorrélation. Il existe un régime d'échelle pour lequel les courbes se superposent pour des valeurs suffisamment grandes de la variable d'échelle. La décroissance est algébrique avec un exposant $\phi = 0.74(3)$.

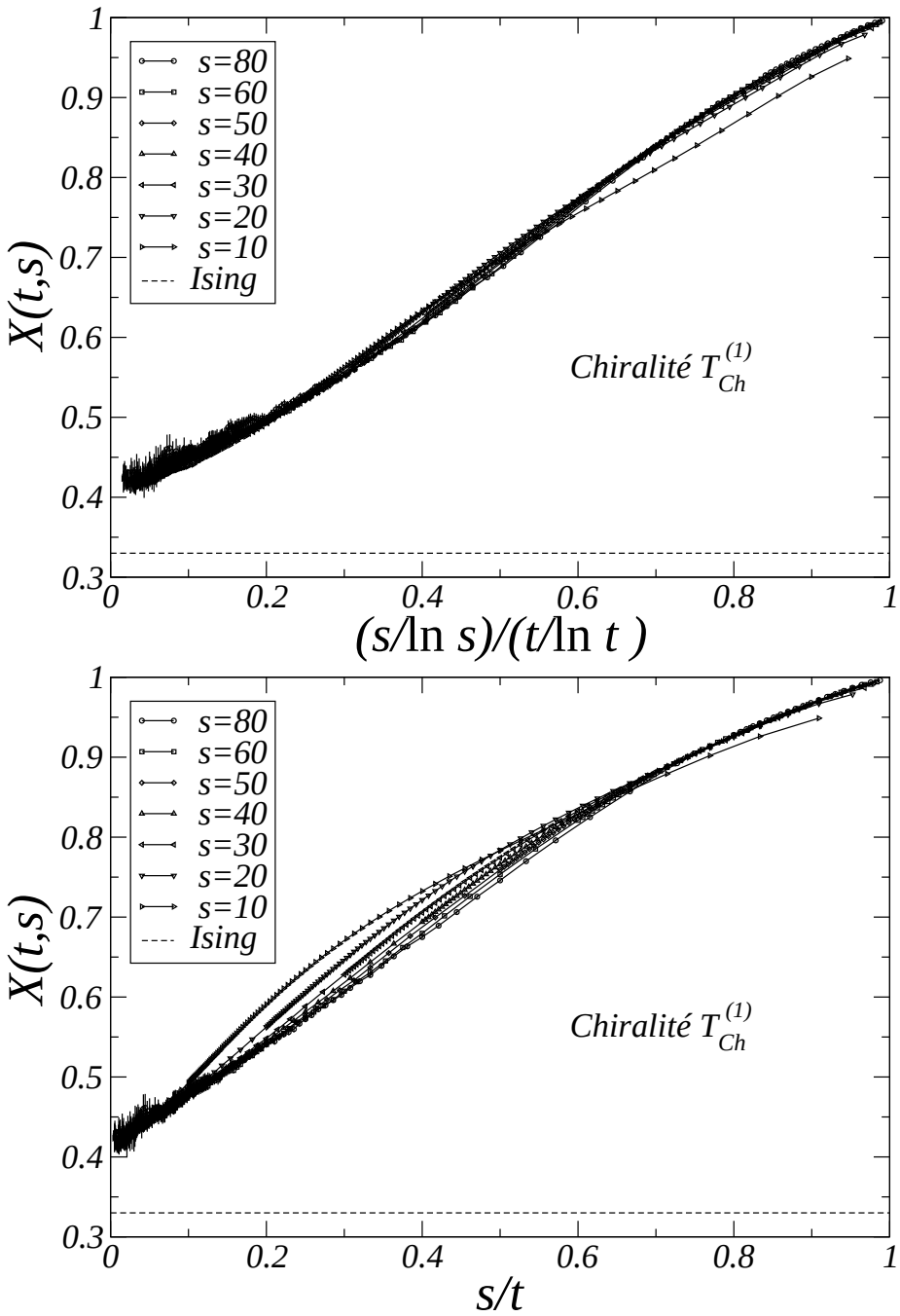


FIG. 6.14 – Le RFD de la chiralité pour une trempe depuis un état désordonné jusqu'à $T_{Ch}^{(1)}$ est tracé en fonction de l'inverse des variables d'échelle de sorte que la valeur asymptotique se lit par extrapolation sur l'axe des ordonnées. L'ajout de corrections logarithmiques dans la variable d'échelle sous la forme $\frac{s \ln t}{t \ln s}$ (en haut) permet d'améliorer la superposition par rapport à la variable $\frac{s}{t}$ (en bas). On estime $X_\infty = 0.410(10)$ avec les corrections logarithmiques. Une valeur compatible est obtenue sans logarithmes. Nos estimations sont incompatibles avec la valeur du modèle d'Ising $X_\infty = 0.330(5)$ [Chat04].

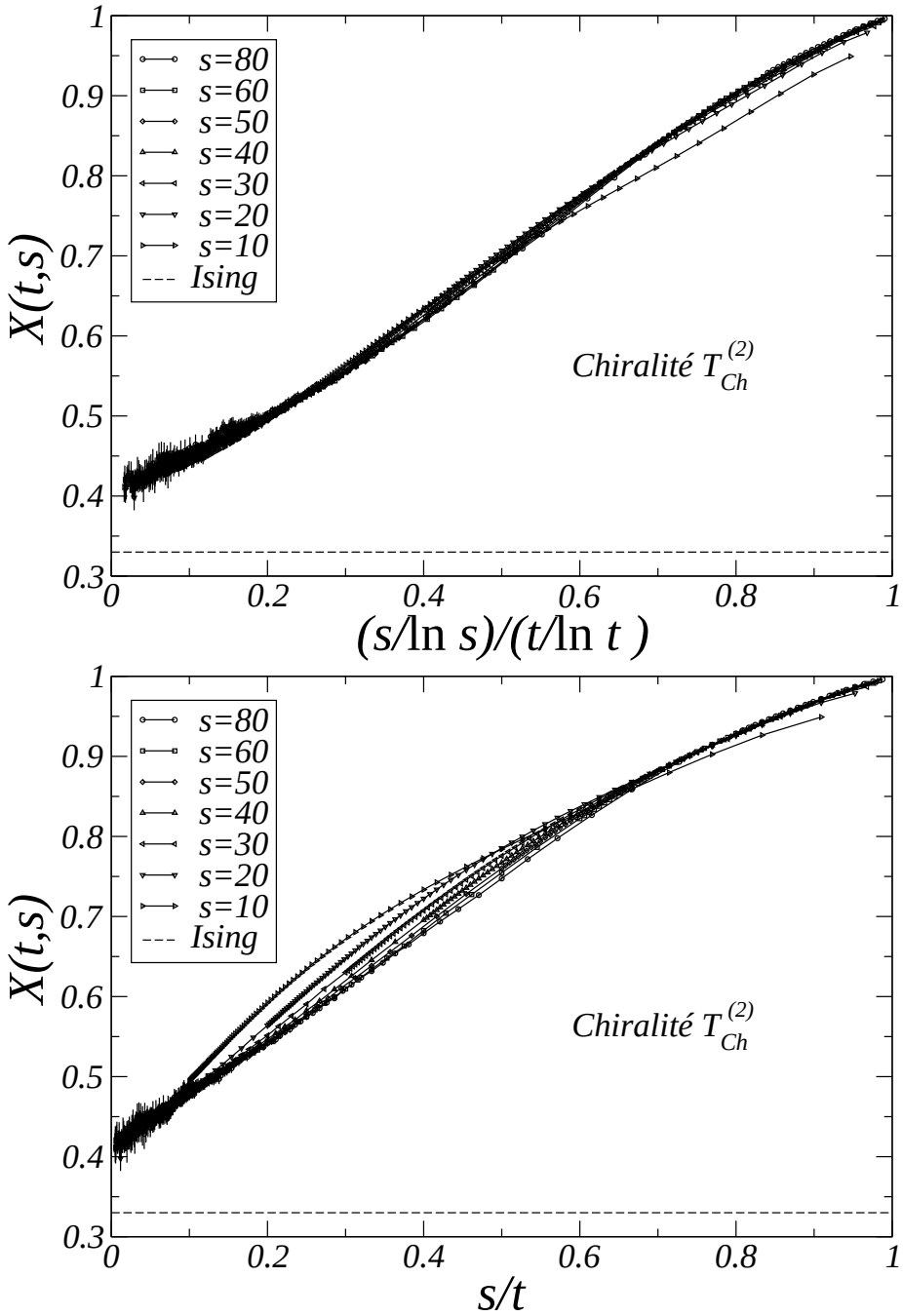


FIG. 6.15 – Le RFD de la chiralité pour une trempe depuis un état désordonné jusqu'à $T_{Ch}^{(2)}$ est tracé en fonction de l'inverse des variables d'échelle de sorte que la valeur asymptotique se lit par extrapolation sur l'axe des ordonnées. L'ajout de corrections logarithmiques dans la variable d'échelle sous la forme $\frac{s \ln t}{t \ln s}$ (en haut) permet d'améliorer la superposition par rapport à la variable $\frac{s}{t}$ (en bas). On estime $X_\infty = 0.405(5)$ en considérant les corrections logarithmiques. Une valeur compatible est obtenue sans logarithmes. Cette estimation est compatible avec la valeur estimée à la température $T_{Ch}^{(1)}$: le RFD est peu sensible à la température autour du point critique.

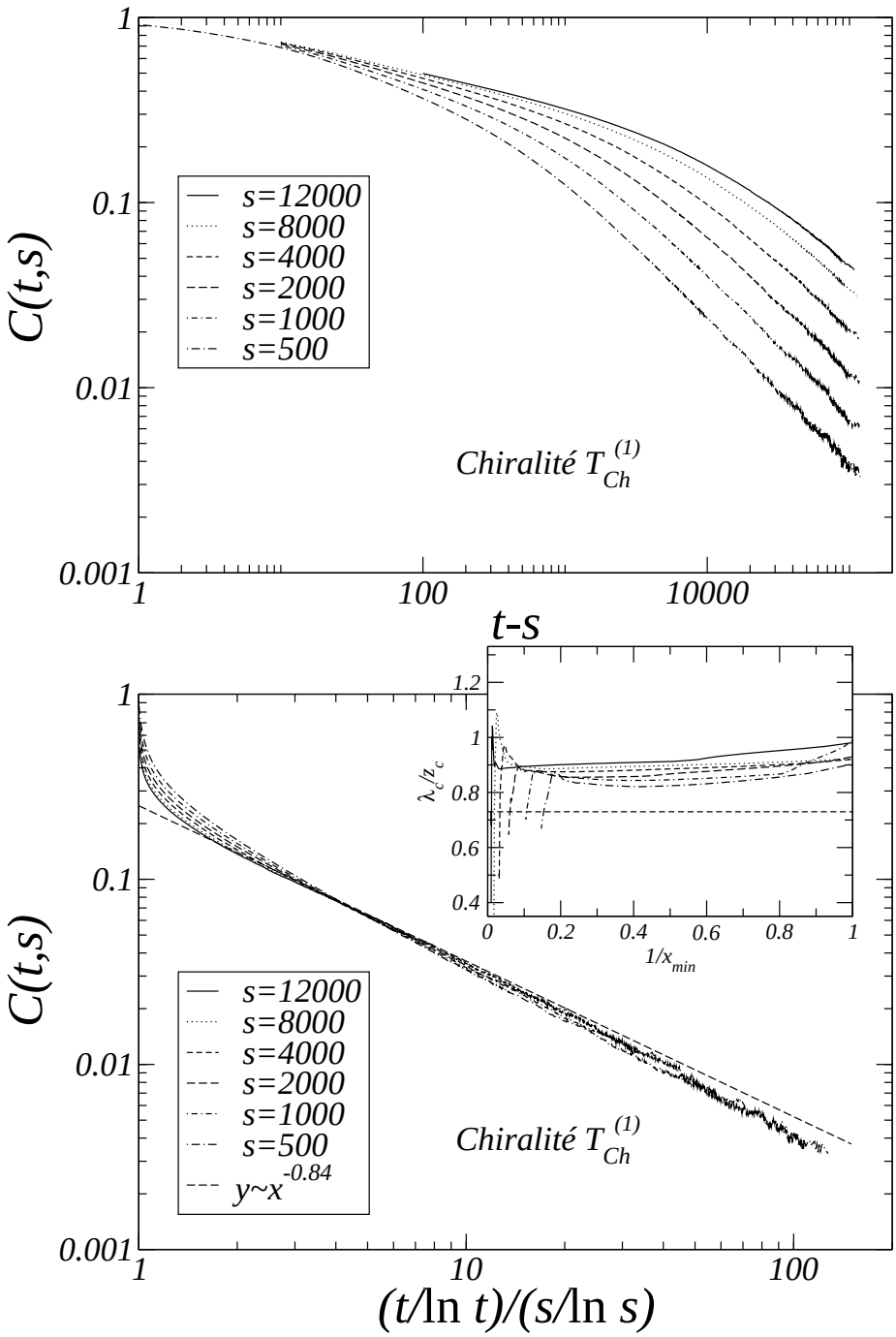


FIG. 6.16 – En haut, l'autocorrélation de la chiralité pour une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température $T_{Ch}^{(1)}$ est tracée en fonction de $t-s$. Après un régime de quasi-équilibre, une brisure de l'invariance par translation temporelle intervient. En bas, les mêmes données sont tracées en fonction de $(t/\ln t)/(s/\ln s)$. On constate un régime d'échelle où les courbes se superposent et décroissent algébriquement avec un exposant $\lambda_c/z_c \approx 0.84$ dont l'évolution en fonction de l'inverse de la borne inférieure d'interpolation x_{min} est présentée dans l'insert. Le préfacteur s^{a_c} (attendu d'après la forme (6.21)) est ici égal à un *i.e.* $a_c \approx 0$ ce qui est très éloigné de la valeur du modèle d'Ising $a_c \approx 0.115$.

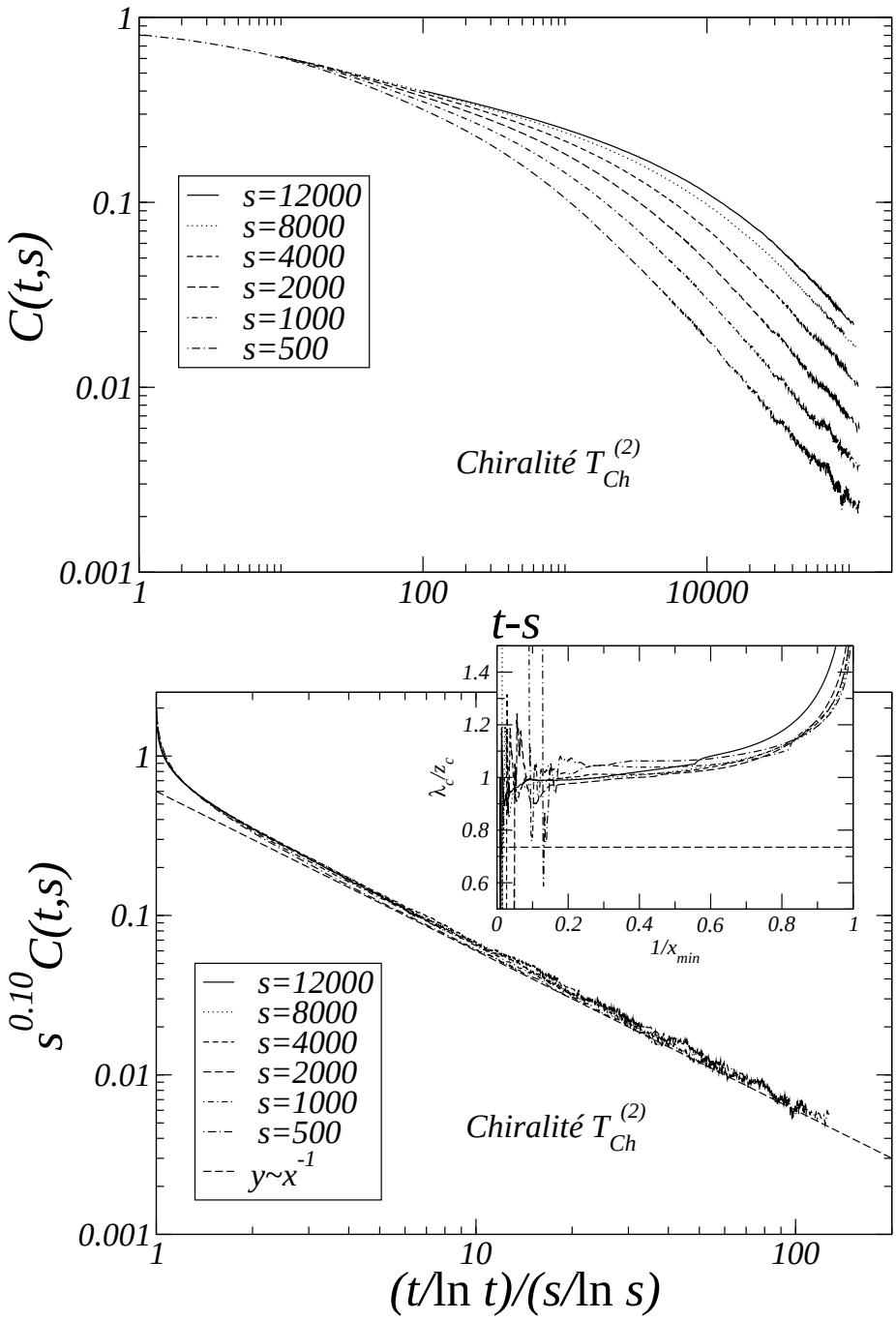


FIG. 6.17 – En haut, l'autocorrélation de la chiralité pour une trempe depuis la phase haute température jusqu'à $T_{Ch}^{(2)}$ est tracée en fonction de $t - s$. Après un régime de quasi-équilibre, une brisure de l'invariance par translation temporelle intervient. En bas, les mêmes données sont tracées en fonction de $(t/\ln t)/(s/\ln s)$. On constate un régime d'échelle où les courbes se superposent et décroissent algébriquement avec un exposant $\lambda/z \approx 0.98(5)$ dont l'évolution en fonction de l'inverse de la borne inférieure d'interpolation x_{min} est présentée dans l'insert. La meilleure superposition est obtenue pour un exposant $a_c \approx 0.10(2)$, en accord avec les estimations obtenues par relaxation hors équilibre.

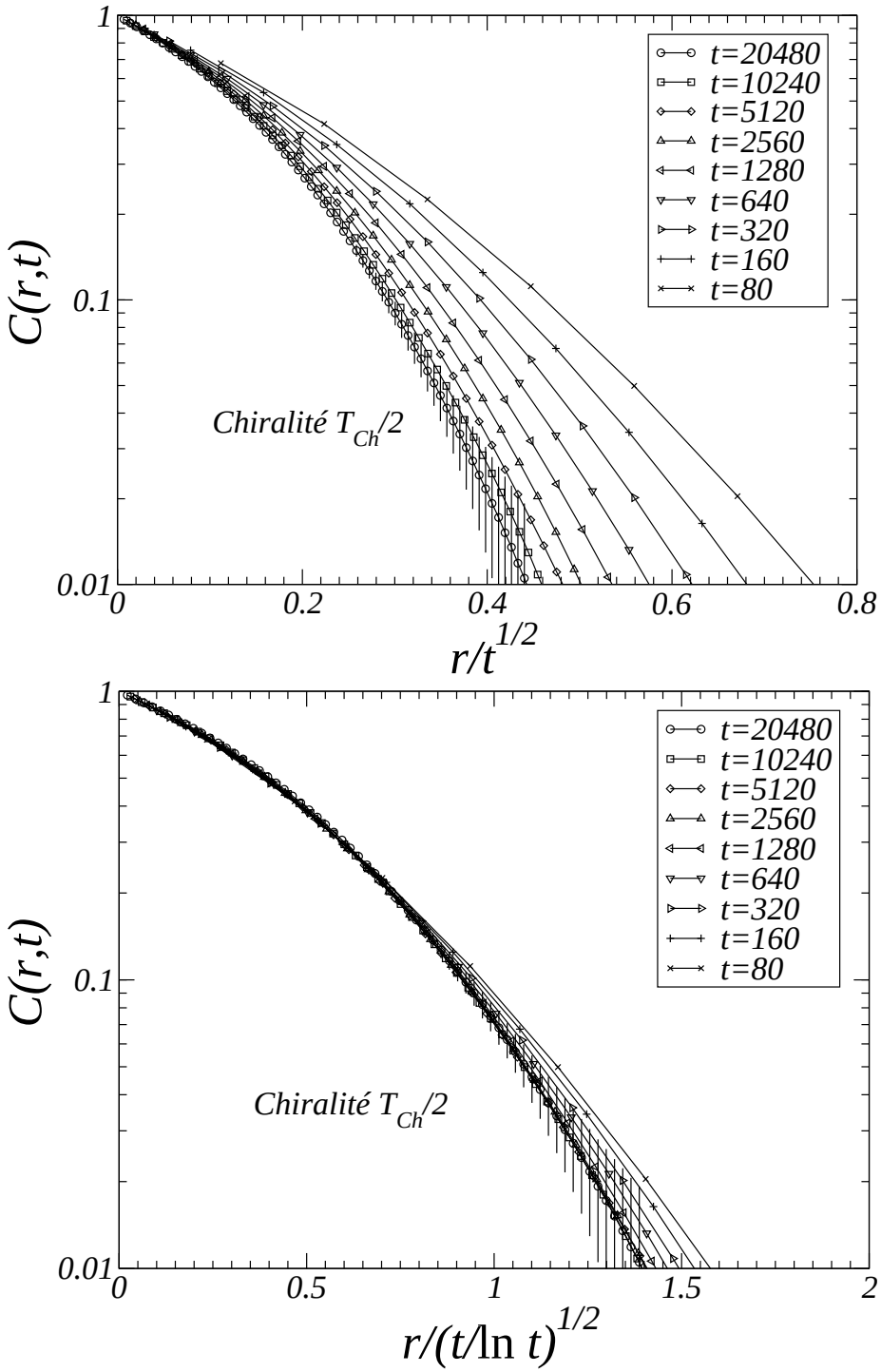


FIG. 6.18 – La corrélation spatiale chiralité-chiralité à temps égaux $C(r,t)$ après une trempe depuis un état désordonné jusqu'à la température $T_{Ch}/2$ est tracée en fonction des variables d'échelle $r/t^{1/2}$ (en haut) et $r/(t/\ln t)^{1/2}$ (en bas). La superposition des courbes du bas suggère un exposant $z = 2$ dans la phase basse température avec des corrections logarithmiques. Ces courbes ont simplement une valeur suggestive puisque les barres d'erreur sont trop importantes pour exclure l'un des scénarios. Par soucis de clarté, nous avons uniquement tracé les barres d'erreur pour le temps d'attente le plus grand donc le plus bruité, ce qui permet d'avoir une idée sur leur amplitude.

Conclusion

Cette thèse s'est attachée à décrire dans une première partie les corrections au comportement d'échelle pour le modèle d'Ising à l'équilibre au-dessus de la dimension critique supérieure. Dans un premier temps, nous avons étudié le comportement thermique de la susceptibilité dans le cadre du comportement d'échelle étendu. Le comportement dominant est identique au champ moyen. Nous avons tenu compte des corrections dominantes qui sont non analytiques jusqu'à six dimensions et analytiques au-delà.

L'interpolation des données numériques obtenues par l'algorithme de ver nous permet d'obtenir les paramètres du développement qui décrit la susceptibilité dans toute la phase haute température, ce qui met en évidence l'efficacité du comportement d'échelle étendu au-delà de la dimension critique supérieure par rapport aux méthodes habituelles pour lesquelles le développement n'est plus valide lorsqu'on s'éloigne du régime critique. De plus, nous avons donné des évidences numériques de logarithmes dans les corrections dominantes en dimension six. Dans un second temps, nous avons présenté des résultats préliminaires des effets de taille finie du modèle d'Ising au-dessus de la dimension critique supérieure. Il est bien établi théoriquement que la longueur de corrélation présente une croissance anormale en fonction de la taille du système au-delà de la dimension critique supérieure selon $\xi \sim L^{d/4}$ *i.e.* la longueur de corrélation croît plus vite que la taille du système. Cette propriété a été vérifiée extensivement par simulation Monte Carlo avec les conditions de bords périodiques. Certains auteurs avancent des arguments fondés sur des calculs analytiques contre un tel comportement pour des conditions de bords libres. Nous avons réalisé des simulations du modèle d'Ising à cinq dimensions avec des conditions de bords libres en utilisant l'algorithme de Wolff combiné à la repondération de l'histogramme afin de mesurer la susceptibilité. Lorsque tous les sites du réseau sontpris en compte, les effets de surface sont trop importants pour établir la croissance anormale. Cependant, une croissance normale *i.e.* $\xi \sim L$ est exclue. Nous avons considéré des réseaux de cœur qui ne possèdent que des sites de volume. Il est alors possible de déterminer clairement le comportement $\chi \sim \xi^2 \sim L^{2.5}$ en bon accord avec le comportement anormal $\xi \sim L^{d/4}$. Ces résultats nécessitent plus d'investigation notamment pour comprendre le comportement du décalage en température qui se comporte de façon normale. Actuellement, nous étudions les effets de taille finie de la fonction de corrélation qui n'ont pas encore été considérés dans la littérature.

Dans une deuxième partie, nous avons étudié l'influence des défauts topologiques dans les systèmes de spins complètement frustrés bidimensionnels. Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés au vieillissement du modèle d'Ising complètement

frustré qui donne lieu à l'équilibre à une transition de type Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless. Cette transition est gouvernée par l'appariement de défauts topologiques de charges opposées dans la phase basse température. Pour le modèle XY, ces défauts topologiques manifestent leur présence lors d'une trempe depuis la phase haute température jusque dans la phase basse température par un ralentissement de la dynamique par des corrections logarithmiques. Cependant, la littérature présentait une controverse car ces corrections logarithmiques n'ont pas pu être clairement mises en évidence numériquement. Tout d'abord, nous avons étudié la dynamique à l'équilibre avec l'autocorrélation spin-spin. Dans la phase haute température, de manière à satisfaire la relation qui relie longueur de corrélation et temps de relaxation sous la forme $\xi \sim \tau^{1/z_c}$, il faut tenir compte de corrections logarithmiques dans la fonction d'échelle de l'autocorrélation dues à la présence de défauts topologiques libres. Ces résultats nous permettent une réinterprétation de l'anomalie dynamique remarquée dans la littérature. À la température critique nulle, les défauts topologiques sont écrantés et ne manifestent aucune influence. De plus, l'absence de fluctuations thermiques permet une détermination précise de l'exposant dynamique qui est compatible sans ambiguïté avec la valeur $z = 2$ d'une dynamique de type BKT. Dans un second temps, nous avons réalisé une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique. Lors d'un tel protocole, le système présente du vieillissement. L'étude des variables d'échelle des fonctions de corrélation et du rapport fluctuation-dissipation permettent de mettre en évidence la croissance de la longueur caractéristique sous la forme $\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/2}$, ce qui montre clairement l'effet des défauts topologiques lors de la relaxation depuis un état désordonné jusqu'à la température critique. De plus, nous estimons les grandeurs universelles qui caractérisent le vieillissement : l'exposant de décroissance de la fonction d'autocorrélation en bon accord avec la valeur $\lambda_c = 2$ et la valeur asymptotique du rapport fluctuation-dissipation $X_\infty = 0.33(1)$. Puis nous avons étudié le vieillissement du modèle XY complètement frustré bidimensionnel. Ce modèle possède un état fondamental original dont la description nécessite la définition d'une variable additionnelle appelée chiralité définie comme le signe de la circulation des spins autour d'une plaquette. L'état fondamental possède une symétrie continue liée aux spins et une symétrie d'inversion liée aux chiralités. Il existe une transition associée à la brisure de chacune des symétries à des températures distinctes. Ce fait est basé sur la présence de défauts topologiques de charges demi-entières sur les parois de domaines de la chiralité. La transitions associée aux spins est sans équivoque de type Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless. Après de longs débats dans la littérature, les auteurs les plus convaincants affirment que la chiralité partage la même classe d'universalité que le modèle d'Ising bidimensionnel. Nous avons tout d'abord réalisé une trempe du système depuis l'état fondamental jusque dans la ligne critique. Puisqu'à températures suffisamment basses, le hamiltonien du FFXY se réduit à un hamiltonien XY avec une constante de couplage effective $J/\sqrt{2}$, on s'attend à un comportement identique pour les deux modèles. Nos résultats numériques pour corrélation spin-spin et le rapport fluctuation-dissipation montrent en effet que ces fonctions sont très bien décrites par les expressions obtenues pour le modèle XY dans l'approximation des ondes de spin, ce qui permet une estimation de l'exposant $\eta(T)$ dans la phase basse température. Puis nous réalisons une trempe du système depuis la phase

haute température jusqu'à la température de Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless. L'autocorrélation spin-spin et le rapport fluctuation-dissipation donnent lieu à un régime d'échelle de vieillissement et des corrections logarithmiques interviennent, comme pour le modèle XY, à cause de la présence de vortex libres dans l'état initial. Nous estimons les grandeurs universelles associées au vieillissement du modèle : l'exposant de décroissance de l'autocorrélation $\phi = 0.74(3)$ ainsi que la valeur asymptotique du RFD $X_\infty = 0.385(15)$ qui se révèlent incompatibles avec le modèle XY. Finalement, nous avons réalisé une trempe du système jusqu'à la température de transition de la chiralité. Les arguments de Korshunov à propos de la présence de charges topologiques demi-entières sur les murs de domaines permettent de supposer que la dynamique est ralentie de la même manière que le modèle XY. Nous constatons en effet des corrections logarithmiques pour les variables d'échelle plus particulièrement visibles pour le rapport fluctuation-dissipation et pour la corrélation spatiale à temps égaux trempée dans la phase basse température. Nous estimons les grandeurs universelles telles que l'exposant de décroissance de l'autocorrélation $\lambda_c/z_c = 0.98(5)$ et la valeur asymptotique du rapport fluctuation-dissipation $X_\infty = 0.405(5)$. Ces estimations sont incompatibles avec le modèle d'Ising. Bien que nos valeurs semblent stables en fonction du temps d'attente, nous n'excluons pas un *cross-over* pour des valeurs plus grandes de temps d'attente qui sont inaccessibles avec les capacités informatiques à notre disposition. Nous souhaitons mettre à contribution notre expérience acquise par l'étude de l'influence des défauts topologiques sur la dynamique pour caractériser les transitions de phase dans les cristaux liquides nématiques. De manière à conserver la symétrie des molècules axiales des cristaux liquides, on définit des modèles qui consistent en des spins à symétrie continue sans sens. Le modèle de Lebwohl-Lasher bidimensionnel présente un intérêt particulier au sujet de l'existence ou non d'une transition topologique. Ce débat pourrait être éclairé par l'étude du vieillissement.

Bibliographie

[Abri04a] S. Abriet (2004) *Dynamique Hors Équilibre dans le Modèle XY et la Chaîne Quantique d'Ising* (Thèse, Université Henri Poincaré, 2004).

[Abri04b] S. Abriet et D. Karevski (2004) *Eur. Phys. J. B* **37**, 47.

[Abri04c] S. Abriet et D. Karevski (2004) *Eur. Phys. J. B* **41**, 79.

[Akte99] N. Aktekin, Ş. Erkoç et M. Kalay (1999) *Int. J. Mod. Phys. C* **10**, 1237 ; M. Kalay et Z. Merdan (2007) *Mod. Phys. Lett. B* **21**, 1923.

[Alba08] V. Alba, A. Pelissetto et E. Vicari (2008) *J. Phys. A* **41**, 175001.

[Alex80] S. Alexander et P. Pincus (1980) *J. Phys. A : Math. Gen.*, **13**, 263.

[Amit84] D.J. Amit, *Field theory, the renormalization group and critical phenomena* (World Scientific, Singapour, 1984).

[Andr1869] T. Andrews (1869) *Phil. Trans. Roy. Soc. Lon.* **159** 575-590.

[Ange95] C.A. Angell (1995) *Science* **267**, 1924 ; C.A. Angell, P.H. Poole et J. Shao (1994) *Il Nuovo Cimento* **16**, 993.

[Andr79] G. André, R. Bidaux, J-P. Carton, R. Conte et L. de Seze (1979) *J. Phys.* (France), **40**, 479.

[Ashc76] N.W. Ashcroft et N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College, Orlando, 1976).

[Barr98] A. Barrat (1998) *Phys. Rev. E* **57**, 3629.

[Baum07a] F. Baumann *Vieillissement et Comportement d'Échelle Dynamique Hors Équilibre* (Thèse, Université Henri Poincaré, 2007).

[Baum07b] F. Baumann, S.B. Dutta et M. Henkel (2007) *J. Phys. A* **40**, 7389.

[Berc09] B. Berche, M. Henkel et R. Kenna *cond-mat/0905.1886.*

[Bere71] V.L. Berezinskiĭ(1971) *Sov. Phys. JETP* **32**, 49.

[Berg86] B. Berge, H.T. Diep, A. Ghazali et P. Lallemand (1986) *Phys. Rev. B* **34**, 3177.

[Bert99] L. Berthier, J.-L. Barrat et J. Kurchan (1999) *Eur. Phys. J. B* **11**, 635.

[Bert00] L. Berthier, J.-L. Barrat et J. Kurchan (2000) *Phys. Rev. E* **61**, 5464.

[Bert01] L. Berthier, P.C.W. Holdsworth et M. Sellitto (2001) *J. Phys. A* **34**, 1805.

[Bind85a] K. Binder (1985) *Z. Phys. B* **61**, 13.

[Bind85b] K. Binder, M. Nauenberg, V. Privman et A.P. Young *Phys. Rev. B* **31**, 1498.

[Binn95] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher et M.E. Newman, *The Theory of Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1995).

[Blöt82] H.W. J. Blöte et H.J. Hilhorst (1982) *J. Phys. A : Math. Gen.* **15**, L631.

[Blöt93] H.W. Blöte et M P. Nightingale (1993) *Phys. Rev. B* **47**, 15046.

[Blöt90] H.W. Blöte, M.P. Nightingale, X.N.Wu et A. Hoogland (1990) *Phys. Rev. B* **43**, 8751.

[Bort75] A.B. Bortz, H. Kalos et J.L. Lebowitz, J. Comp. Phys. **17** (1975) 10.

[Boub98] E.H. Boubcheur et H.T. Diep (1998) *Phys. Rev. B* **58**, 5163.

[Bray94] A.J. Bray (1994) *Adv. Phys.* **43**, 357.

[Bray00] A.J. Bray, A.J. Briant et D.K. Jervis (2000) *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1503.

[Bray94] A.J. Bray et A.D. Rutenberg (1994) *Phys. Rev. E* **49**, R27.

[Brez82] E. Brézin (1982) *J. Physique* **43**, 15.

[Brez85] E. Brézin et J. Zinn-Justin (1985) *Nucl. Phys. B* **257**, 867.

[Buck61] M.J. Buckingham et W.M. Fairbank dans *Progress in Low Temperature Physics* Vol. III, éditeur : C.J. Gorter (North-Holland, Amsterdam, 1961).

[Bute02] P. Butera et M. Comi (2002) *Phys. Rev. B* **65**, 144431 ; (2002) *J. Stat. Phys.* **109** 311.

[Cagn1822] C. Cagniard de la Tour (1822) *Ann. Chim. Phys.* **21** 127-132 ; *Supplément, ibid.*, 178-182.

[Cagn1823] C. Cagniard de la Tour (1823) *Ann. Chim. Phys.* **22**, 410-415.

[Cala02a] P. Calabrese et A. Gambassi (2002) *Phys. Rev. E* **65**, 66120 ; *Acta Phys. Slov.* **52**, 311.

[Cala02b] P. Calabrese et A. Gambassi (2002) *Phys. Rev. E* **66**, 66101.

[Cala02c] P. Calabrese et A. Gambassi (2002) *Phys. Rev. E* **66**, 212407.

[Cala04] P. Calabrese et A. Gambassi (2004) *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.*, P07013.

[Cala05] P. Calabrese et A. Gambassi (2005) *J. Phys. A* **38**, R133.

[Cala06] P. Calabrese, A. Gambassi et F. Krzakala (2006) *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.*, P06016.

[Camp94] I.A. Campbell et L.W. Bernardi (1994) *Phys. Rev. B* **50**, 12643 ; I.A. Campbell (1985) *J. Phys.* (France) **46**, L1159 ; I.A. Campbell, J.M. Flesselles, R. Jullien et R. Botet (1987) *J. Phys. C* **20**, L47 ; (1988) *Phys. Rev. B* **37**, 3825.

[Camp08] I.A. Campbell et P. Butera (2008) *Phys. Rev. B* **78**, 24435.

[Camp06a] I.A. Campbell, K. Hukushima et H. Takayama (2006) *Phys. Rev. Lett.* **97** 117202.

[Camp06b] I.A. Campbell, K. Hukushima et H. Takayama (2007) *Phys. Rev. B* **76**, 134421.

[Card96] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (University Press, Cambridge, 1996).

[Chat03] C. Chatelain (2003) *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, 10739.

[Chat04] C. Chatelain (2004) *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.* P06006.

[Chen01] Q.-H. Chen, M.-B. Luo et Z.-K. Jiao (2001) *Phys. Rev. B* **64**, 212403.

[Choi85a] M.Y. Choi et S. Doniach (1985) *Phys. Rev. B* **31**, 4516.

[Choi85b] M.Y. Choi et D. Stroud (1985) *Phys. Rev. B* **32**, 7532 ; (1987) **35**, 7109.

[Cipe00] L. Cipelletti, S. Manley, R.C. Ball, D.A. Weitz (2000), *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2275.

[Codd92] P.D. Coddington et C. F. Baillie (1992) *Phys. Rev. Lett.* **68**, 962.

[Codd94] P.D. Coddington et L. Han (1994) *Phys. Rev. B* **50**, 3058.

[Coni91] A. Coniglio, F. di Liberto, G. Monroy et F. Peruggi (1991) *Phys. Rev. B* **44**, 12605.

[Coni80] A. Coniglio et W. Klein (1980) *J. Phys. A* **12**, 2775.

[Corb02] F. Corberi, E. Lippiello et M. Zannetti (2002) *Phys. Rev. E* **65**, 46136.

[Corb03] F. Corberi, E. Lippiello et M. Zannetti (2001) *Phys. Rev. E* **68**, 46131.

[Corb05] F. Corberi, E. Lippiello et M. Zannetti (2005) *Phys. Rev. E* **72**, 28103.

[Cris03] A. Crisanti et F. Ritort (2003) *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, R181.

[Cugl93] L.F. Cugliandolo et J. Kurchan (1993) *Phys. Rev. Lett.* **71**, 173.

[Cugl94] L.F. Cugliandolo et J. Kurchan (1994) *J. Phys. A* **27**, 5749.

[Cugl95] L.F. Cugliandolo et J. Kurchan (1995) *Phil. Mag. B* **71**, 50.

[Cug94] L.F. Cugliandolo, J. Kurchan et G. Parisi (1994) *J. Phys. I* (France) **4**, 1641.

[Cug97] L.F. Cugliandolo, J. Kurchan et L. Peliti (1997) *Phys. Rev. E* **55**, 3898.

[Deng03] Y. Deng et H.W.J. Blöte (2003) *Phys. Rev. E* **68**, 036125.

[Deng07] Y. Deng, T.M. Garoni, et A.D. Sokal (2007) Phys. Rev. Lett. **99**, 110601.

[Diep04] H.T. Diep et H. Giacomini dans *Frustrated Spin Systems*, éditeur : H. T. Diep (World Scientific, Singapour, 2004).

[Domb] C. Domb, *The Critical Point : A Historical Introduction to the Modern Theory of Critical Phenomena* (Taylor & Francis, London, 1996).

[Du06] J. Du, B. Zheng et J.-S. Wang (2006) *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.*, P05004

[Edwa75] S.F. Edwards et P.W. Anderson (1975) *J. Phys. F* **5**, 965.

[Essa63] J.W. Essam et M.E. Fisher (1963) *J. Chem. Phys.* **38**, 802.

[Fern06] H.A. Fernandes, R. de Silva et J.R. Drugovitch de Felício (2006) *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.*, P10002.

[Ferr88] A.M. Ferrenberg et R.H. Swendsen (1988) Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 ; (1989) *ibid.* **63**, 1195.

[Fier97-99] A. Fierro, A. de Candia et A. Coniglio (1997) *Phys. Rev. E* **56**, 4990 ; A. Fierro, G. Franzese, A. de Candia et A. Coniglio (1999) *Phys. Rev. E*, **59**, 60.

[Fish61] M.E. Fisher (1961) *Phys. Rev.* **124**, 1664.

[Fish64] M.E. Fisher (1964) *J. Math. Phys.* **5**, 944.

[Fish72] M.E. Fisher et M.N. Barber (1972) *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516.

[Fish64] M.E. Fisher et D. S. Gaunt (1964) *Phys. Rev.* **133**, A225.

[Fish88a] D.S. Fisher et D.A. Huse (1988) *Phys. Rev. B* **38**, 373.

[Fish88b] D.S. Fisher et D.A. Huse (1988) *Phys. Rev. B* **38**, 386.

[Forg80] G. Forgacs (1980) *Phys. Rev. B* **22**, 4473.

[Fort72] C.M. Fortuin et P.W. Kasteleyn (1972) *Physica A* **57**, 536.

[Fost01] D.P. Foster, C. Gérard et I. Puha (2001) *J. Phys. A* **34**, 5183.

[Frad78] E. Fradkin, B.A. Huberman et S.H. Shenker (1978) *Phys. Rev. B* **18**, 4789.

[Fran94] S. Franz et M. Mézard (1994) *Europhys. Lett.* **26**, 209 ; (1994) *Physica A* **210**, 48.

[Fran95] M. Franz et S. Teitel (1995) *Phys. Rev. B* **51**, 6551.

[Gart88] S. Gartenhaus et W.S. MacCullough (1988) *Phys. Rev. B* **38**, 11688.

[Glau63] R.J. Glauber (1963) *J. Math. Phys.* **4**, 294.

[Glot95] S.C. Glotzer et A. Coniglio (1995) *Comput. Mater. Sci.* **4**, 325.

[Godr00a] C. Godrèche et J-M. Luck (2000) *J. Phys. A : Math. Gen.* **33**, 1151.

[Godr00b] C. Godrèche et J-M. Luck (2000) *J. Phys. A : Math. Gen.* **33**, 9141.

[Gofm93] M. Gofman, J. Adler, A. Aharony, A.B. Harris et D. Stauffer (1993) *J. Stat. Phys.* **71**, 1221.

[Gran93] E. Granato et M.P. Nightingale (1993) *Phys. Rev. B* **48**, 7438.

[Gras95] P. Grassberger (1995) *Physica A* **214**, 547 ; *erratum* (1995) *Physica A* **217**, 227.

[Grif65] R.B. Griffiths (1965) *Phys. Rev. Lett.* **14**, 623.

[Gugg45] E.A. Guggenheim (1945) *J. Chem. Phys.* **13**, 253.

[Günd05] S. Gündüç, M. Dilaver, M. Aydin et Y. Gündüç (2005) *Comp. Phys. Comm.* **166**, 1.

[Gutt81] A.J. Guttmann (1981) *J. Phys. A* **14**, 233.

[Hal67-69] B.I. Halperin et P.C. Hohenberg (1967) *Phys. Rev. Lett.* **19**, 700 ; (1969) *Phys. Rev.* **177**, 952.

[Hals85] T.C. Halsey (1985) *J. Phys. C : Solid State Phys.* **18**, 2437.

[Han08] Y.Han, Y. Shokef, A.M. Alsayed, P. Yunker, T. C. Lubensky et A. G. Yodh (2008) *Nature* **456**, 898.

[Harr08] M. Harris (2008) *Nature* **456**, 886.

[Hase05a] M. Hasenbusch (2005) *J. Phys. A : Math. Gen.* **38**, 5869.

[Hase05] M. Hasenbusch, A. Pelissetto et E. Vicari (2005) *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.*, P12002.

[Hase97] M. Hasenbusch et K. Pinn (1997) *J. Phys. A : Math. Gen.* **30**, 63.

[Hatt95] S.A. Hattel et J.M. Wheatley (1995) *Phys. Rev. B* **51**, 11951.

[Hell62] P. Heller et G.B. Benedek (1962) *Phys. Rev. Lett.* **8**, 428.

[Henk08] M. Henkel et M. Pleimling *Nonequilibrium phase transitions* Vol. II (Heidelberg, Springer, 2009).

[Henk03a] M. Henkel et M. Pleimling (2003) *Phys. Rev. Lett.* **90**, 99602.

[Henk03b] M. Henkel, M. Paessens et M. Pleimling (2003) *Europhys. Lett.* **62**, 664.

[Henk04] M. Henkel, M. Paessens et M. Pleimling (2004) *Phys. Rev. E* **69**, 056109.

[Henk05a] M. Henkel et M. Pleimling (2005) *Phys. Rev. E* **72**, 028104.

[Henk05b] M. Henkel et M. Pleimling (2005) *Europhys. Lett.* **69**, 524.

[Heri02] D. Hérisson et M. Ocio (2002) *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257202.

[Hohe67] P.C. Hohenberg (1967) *Phys. Rev.* **158**, 383.

[Hohe77] P.C. Hohenberg et B.I. Halperin (1977) *Rev. Mod. Phys.* **49**, 435.

[Hubb59] J. Hubbard (1959) *Phys. Rev. Lett.* **3**, 77 ; R. L. Stratanovitch (1957) *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **115**, 1097.

[Huse89] D.A. Huse (1989) *Phys. Rev. B* **40**, 304.

[Isin25] Ising E. (1925) *Zeit. Phys.* **31**, 253.

[Ito00] N. Ito, K. Hukushima, K. Ogawa et Y. Ozeki (2000) *J. Phys. Soc. Japan* **69**, 1931.

[Itzy89] C. Itzykson et J.M. Drouffe *Théorie Statistique des champs* Vol. I et II (Editions du CNRS, Meudon, 1989).

[Jans89] H.K. Janssen, B. Schaub et B. Schmittmann (1989) *Z. Phys.* **73**, 539.

[Jast99] A. Jaster, J. Mainville, L. Schülke et B. Zheng (1999) *J. Phys. A : Math. Gen* **32**, 1395.

[Jone05] J.L. Jones et A.P. Young (2005) *Phys. Rev. B* **71**, 174438.

[Jose67] B.D. Josephson (269) *Proc. Phys. soc.* **92**, 269 ; *ibid*, 276.

[José77] J.V. José, L.P. Kadanoff, S. Kirkpatrick et D.R. Nelson (1977) *Phys. Rev. B* **16**, 1217.

[Joub09] S. Joubaud, B. Percier, A. Petrosyan et S. Ciliberto (2009) *Phys. Rev. Lett.* **102**, 130601.

[Joyc72] G.S. Joyce dans *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. II, éditeurs : C. Domb et M.S. Green (Academic Press, London, 1972).

[Kada66] L.P. Kadanoff (1966) *Physics* **2**, 263.

[Kada67] L.P. Kadanoff, W. Götze, D. Hamblen, R. Hecht, E.A.S. Lewis, V.V. Palciausskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes et J. Kane (1967) *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395.

[Kand92] D. Kandel, R. Ben-Av et E. Domany (1990) *Phys. Rev. Lett.* **65**, 941 ; D. Kandel, R. Ben-Av et E. Domany (1992) *Phys. Rev. B* **45**, 4700.

[Kars09] M. Karsai, J.-C. Anglès d'Auriac et F. Iglòi (2009) *Cond-mat/0905.3503.*

[Katz08] H.G. Katzgraber, I.A. Campbell et A.K. Hartmann (2008) *Phys. Rev. B* **78**, 184409.

[Kenn91] R. Kenna et C.B. Lang (1991) *Phys. Lett. B* **264**, 396 ; (1993) *Nucl. Phys. B* **393**, 461.

[Kim03-07] E. Kim, B. Kim et S. J. Lee (2003), *Phys. Rev. E* **68**, 66127 ; E. Kim, S. J Lee et B. Kim (2007) *Phys. Rev. E* **75**, 21106.

[Klei01] H. Kleinert et V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of ϕ^4-Theories* (World Scientific, Singapour, 2001).

[Knop94] Y.M.M. Knops, B. Nienhuis, H.J.F. Knops et H.W.J. Blöte (1994) *Phys. Rev. B* **50**, 1061.

[Kob97] W. Kob et J.-L. Barrat (1997) *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4581.

[Kope89] G.J. M. Koper, H.J. Hilhorst (1989) *Physica A* **155**, 431.

[Korn07] L. Kornyei, M. Pleimling et F. Iglói (2007) *Phys. Rev. E* **77**, 11127.

[Kors86a] S.E. Korshunov (1986) *J. Stat. Phys.* **43**, 17.

[Kors02] S.E. Korshunov (2002) *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167007.

[Kors86b] S.E. Korshunov et G.V. Uimin (1986) *J. Stat. Phys.* **43**, 1.

[Kors95] S.E. Korshunov, A. Vallat et H. Beck (1995) *Phys. Rev. B* **51**, 3071.

[Kost74] J.M. Kosterlitz (1974) *J. Phys. C : Solid State Phys.* **7**, 1046.

[Kost73] J.M. Kosterlitz et D.J. Thouless (1973) *J. Phys. C* **6**, 1181.

[Kram41] H.A. Kramers et G.H. Wannier (1941) *Phys. Rev.* **60**, 252.

[Land37] L.D. Landau (1937) *Phys. Z. Sowjetunion* **11**, 26 ; (1937) *J.E.P.T.* **7**, 19.

[Land67] L.D. Landau et E.M. Lifschitz, *Physique Statistique* (Editions Mir, Moscou, 1967).

[LeBe02] M. Le Bellac, *Des Phénomènes Critiques aux Champs de Jauge* (EDP Sciences/CNRS Edition, 2002).

[Lee91] J. Lee, J.M. Kosterlitz et E. Granato (1991) *Phys. Rev. B* **43**, 11531.

[Lee94] S. Lee, K.-C. Lee (1994) *Phys. Rev. B* **49**, 15184.

[Lee95a] S. Lee et K.-C. Lee (1995) *Phys. Rev. B* **52**, 6706.

[Lee95b] S.J. Lee, J.-R. Lee, B. Kim (1995) *Phys. Rev. E* **51**, R4.

[Lei07] X.W. Lei et B. Zheng (2007) *Phys. Rev. E* **75**, 040104(R).

[Lipp00] E. Lippiello et M. Zannetti (2000) *Phys. Rev. E* **61**, 3369.

[Lube78] T.C. Lubensky et J. Isaacson (1978) *Phys. Rev. Lett.* **41**, 829 ; *(ibid.)* (1979) **42**, 410 *erratum*.

[Luij96] E. Luitjten et H.W.J. Blöte (1996) *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1557.

[Luij99] E. Luijten, K. Binder et H.W.J. Blöte (1999) *Eur. Phys. J. B* **9**, 289.

[Luki06] J. Lukic, E. Marinari et O.C. Martin (2006) *Europhys. Lett.* **73**, 779.

[Luo02] M.-B. Luo, Q.-H. Chen, H.-P. Ying et Z.-K. Jiao (2002) *Phys. Lett. A* **292**, 303.

[Luo98] H.J. Luo, L. Schülke et B. Zheng (1998) *Phys. Rev. Lett.* **81**, 180 ; (1998) *Phys. Rev. E* **57**, 1327.

[Luo98] H. J. Luo, M. Schulz, L. Schülke, S. Trimper et B. Zheng (1998) *Phys. Lett. A* **250**, 383.

[Ma00] S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (Westview press, Boulder, 2000).

[MacC04] W.D. MacComb, *Renormalization Methods* (Clarendon Press, Oxford, 2004).

[McMi83] W.L. McMillan (1983) *Phys. Rev. B* **28**, 5216.

[Mart00] P. Martinoli et C. Leemann (2000) *J. Low Temp. Phys.* **118**, 699.

[Matt76] D. C. Mattis (1976) *Phys. Lett. A* **56**, 421.

[Merd06] Z. Merdan, A. Duran, D. Atille, G. Mülazimoğlu et A. Günen (2006) *Physica A* **366**, 265.

[Metr53] N. polis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller et E. Teller (1953) *J. Chem. Phys.* **21**, 1087.

[Maye03] P. Mayer, L. Berthier, J.P. Garrahan et P. Sollich (2003) *Phys. Rev. E* **68**, 016116.

[Merm66] N.D. Mermin et H. Wagner (1966) *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133.

[Minn07] P. Minnhagen, B.J. Kim, S. Bernhardsson et G. Cristofano (2007) *Phys. Rev. B* **76**, 224403 ; (2008) *Phys. Rev. B* **78**, 184432.

[Mon96] K.K. Mon (1996) *Europhys. Lett.* **34**, 399 ; (1996) *Europhys. Lett.* **37**, 493 (Erratum).

[Moor99] C. Moore, M.G. Nordahl, N. Minar et C.R. Shalizi (1999) *Phys. Rev. E* **60**, 5344 ; cond-mat/9902200.

[Munk93] C. Münkel, D.W. Heermann, J. Adler, G. Gofman et D. Stauffer (1993) *Physica A* **193** , 540.

[Nels77] D. R. Nelson et J. M. Kosterlitz (1977) *Phys. Rev. Lett.* **39**, 1201.

[New01] M. E. J. Newmann et G. T. Barkema, *Monte Carlo Method in Statistical Physics* (University Press, Oxford, 2001).

[Nie06a] Q.-N. Nie, M.-B. Luo et Q.-H. Chen (2006) *Phys. Lett. A* **350**, 274.

[Nie06b] Q.-N. Nie, M.-B. Luo et Q.-H. Chen (2006) *Phys. Rev. B* **74**, 24523.

[Nieu98] Th.M. Nieuwenhuizen (1998) *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5580.

[Nigh96] M.P. Nightingale et H. W. J. Blöte (1996) *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4548 ; (2000) *Phys. Rev. B* **62**, 1089.

[Noak66] J. Noakes *et al* (1966) *J. Appl. Phys.* **37**, 1264.

[Ogie85] A.T. Ogielski (1985) *Phys. Rev. B* **32**, 7384.

[Okan97] K. Okano, L. Schülke, K. Yamagashi et B. Zheng (1997) *J. Phys. A : Math. Gen.* **30**, 4527-4535.

[Olss95] P. Olsson (1995) *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2758 ; (1997) *Phys. Rev. B* **55**, 3585.

[Onsa44] L. Onsager (1944) *Phys. Rev.*, **65**, 117 ; (1949) *Nuovo Cimento (Suppl.)* **6**, 261.

[Orri01] W.P. Orrick, B. Nickel, A. J. Guttmann et J.H.H. Perk (2001) *J. Stat. Phys* **102**, 795.

[Ozek03] Y. Ozeki et N. Ito (2003) *Phys. Rev. B* **68**, 54414.

[Pari98] G. Parisi *Statistical Field Theory* (Westview Press, Boulder, 1998)

[Pari96] G. Parisi et J.J. Ruiz-Lorenzo (1996) *Phys. Rev. B* **54**, R3698 ; (1997) *Phys. Rev. B* **55**, 6082 (Erratum).

[Park00] S.Y. Park, M.Y. Choi, B.J. Kim, G.S. Jeon, J.S. Chung (2000) *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3484.

[Paro95] A. Parola et L. Reatto (1995) *Adv. Phys.* **44**, 211.

[Pezz97] U. Pezzella et A. Coniglio (1997) *Physica A* **237**, 353.

[Phys] www.physicsofmatter.com/NotTheBook/CriticalOpal/Opal.html.

[Prok98] N. Prokof'ev et B. Svistunov et I. N. Tupitsyn (1998) Phys. Lett. A **238**, 253.

[Prok01] N. Prokof'ev et B. Svistunov (2001) Phys. Rev. Lett. **87**, 160601.

[Rami94] G. Ramirez-Santiago, J.V. José (1994) *Phys. Rev. B* **49**, 9567.

[Ricc03] F. Ricci-Tersenghi (2003) *Phys. Rev. E* **68**, 65104.

[Rick94] Ch. Rickwardt, P. Nielaba et K. Binder (1994) *Ann. Phys.* **3**, 483.

[Roja99] F. Rojas et A.D. Rutenberg (1999) *Phys. Rev. E* **60**, 212.

[Rudn85] J. Rudnick, G. Gaspari et V. Privman (1985) *Phys. Rev. B* **32**, 7594.

[Rush63] G. S. Rushbrooke (1963) *J. Chem. Phys.* **39**, 842.

[Rute95a] A.D. Rutenberg et A.J. Bray (1995) *Phys. Rev. E* **51**, R1641.

[Rute95b] A.D. Rutenberg et A.J. Bray (1995) *Phys. Rev. E* **51**, 5499.

[Sast03] F. Sastre, F. Dornic et H. Chaté (2003) *Phys. Rev. Lett.* **91**, 267205.

[Scar97] S. Scarpetta, A. de Candia et A. Coniglio (1997) *Phys. Rev. E* **55**, 4943.

[Sche04] G. Schehr et P. Le Doussal (2004) *Phys. Rev. Lett.* **93**, 217201.

[Sche05] G. Schehr et R. Paul (2005) *Phys. Rev. B* **72**, 16105.

[Sher75] D. Sherrington et S. Kirkpatrick (1975) *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1972.

[Silv02] R. da Silva, N.A. Alves et J.R. Drugowich de Felício (2002) *Phys. Lett. A* **298**, 325-329.

[Silv04] R. da Silva et J.R. Drugowich de Felício (2004) cond-mat/0404083.

[Stan71] H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (University Press, Oxford, 1971).

[Stau00] D. Stauffer (2000) *Braz. J. Phys.* **30**, 787.

[Stau94] D. Stauffer et A. Aharony, *A Introduction to Percolation Theory* (Taylor & Francis, London, 1994).

[Step64] J. Stephenson (1964) *J. Math. Phys.* **5**, 1009 ; J. Stephenson (1970) *J. Math. Phys.* **11**, 413.

[Stra97] J.P. Straley, A. X. Morozov et E. B. Kolomeisky (1997) *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2534.

[Stru78] L.C.E. Struick, *Physical Aging in Amorphous Polymers and Other Materials* (Elsevier, Houston, 1978).

[Swen87] R.H. Swendsen et J.S. Wang (1987) *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86.

[Teit83] S. Teitel et C. Jayaprakash (1983) *Phys.Rev. B* **27**, 598.

[Thij90] J.M. Thijssen, H.J.F. Knops (1990) *Phys. Rev. B* **42**, 2438.

[Toul77] G. Toulouse (1977) *Comm. Phys.* **2**, 115.

[Vica00] E. Vicari et A. Pelissetto, cond-mat/001264v6.

[Vill77a] J. Villain (1977) *J. Phys. C : Solide State Phys.* **10**, 1717.

[Vill77b] J. Villain (1977) *J. Phys. C : Solide State Phys.* **10**, 4793.

[Vill80] J. Villain, R. Bidaux, J.-P. Carton et R. Conte (1980) *Journal de Physique* **41**, 1263.

[Vinc07] E. Vincent, Aging, rejuvenation and memory : the example of spin-glasses dans *Ageing and the glass transition, Lecture Notes in Physics* **716**, éditeurs : M. Henkel, M. Pleimling et R. Sanctuary (Springer, Heidelberg, 2007).

[Wann50] G.H. Wannier (1950) *Phys. Rev.* **79**, 357.

[Wats73] P.G. Watson dans *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. II, éditeurs : C. Domb et M.S. Green (Academic Press, London, 1973).

[Wegn72] F.J. Wegner (1972) *Phys. Rev. B* **5**, 4529.

[Wido64] B. Widom (1964) *J. Chem. Phys* **41**, 1633.

[Wido65] B. Widom (1965) *J. Chem. Phys.* **43**, 3892 ; (1965) *J. Chem. Phys.* **43**, 3898.

[Wiki] article *ice*, *Wikipedia* (version anglaise).

[Wils71] K.G. Wilson (1971) Phys. Rev. B **4**, 3174 ; (1971) Phys. Rev. B **4**, 3184.

[Wolf89] U. Wolff (1989) Phys. Rev. Lett. **62**, 361.

[Wu03] J. Wu et D.C. Mattis (2003) *Phys. Rev. B* **67**, 224414.

[Yeom94] J.M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (University Press, Oxford, 1994).

[Youn98] *Spin-Glasses and Random Fields*, éditeur : A.P. Young (World Scientific, Singapour, 1998).

[Yurk93] B. Yurke, A.N. Pargellis, T. Kovacs et D.A. Huse (1993) *Phys. Rev. E* **47**, 1525.

[Zhan94] G.M. Zhang et C.Z. Yang (1994) *Phys. Rev. B* **50**, 12546.

[Zhen98] B. Zheng (1998) *Int. J. Mod. Phys. B* **12**, 1419.

[Zhen03] B. Zheng, F. Ren et H. Ren (2003) *Phys. rev. E* **68**, 46120.

[Zinn02] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 2002).

Résumé

Cette thèse est une étude numérique par simulation Monte Carlo des corrections d'échelle au comportement dominant à l'équilibre et hors de l'équilibre. La première partie a pour sujet le comportement à l'équilibre du modèle d'Ising en dimensions supérieures à quatre. Dans un premier temps, nous étudions le comportement thermique dans le cadre du comportement d'échelle étendu qui permet d'étendre le développement critique à toutes températures supérieures à la température critique. Une interpolation des données numériques obtenues en dimensions cinq, six, sept et huit permettent d'obtenir un développement incluant le comportement dominant identique au champ moyen et les corrections dominantes. Ce développement permet de décrire la susceptibilité depuis le régime critique jusqu'à haute température. Les simulations ont été réalisées avec l'algorithme de ver. Dans un second temps, nous étudions les effets de taille finie. Il est bien établi que la longueur de corrélation présente une croissance anormale en fonction de la taille du système au-delà de la dimension critique supérieure. Cette propriété a été vérifiée numériquement de façon extensive avec des conditions de bords périodiques. Nos résultats obtenus pour le modèle d'Ising à cinq dimensions en conditions de bords libres sont compatibles avec une telle croissance anormale. Les simulations ont été effectuées avec l'algorithme de Wolff combiné à la repondération de l'histogramme.

La seconde partie a pour sujet le vieillissement dans les systèmes de spins bidimensionnels complètement frustrés par dynamique de Glauber. Dans un premier temps, nous étudions le vieillissement du modèle d'Ising complètement frustré bidimensionnel lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température critique. Ce modèle donne lieu à l'équilibre à une transition de type Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless gouvernée par l'appariement des défauts topologiques. Nous montrons que le vieillissement est caractérisé par la présence de ces défauts topologiques qui se manifeste par des corrections logarithmiques lors de la croissance de la longueur caractéristique. De plus, nous estimons les grandeurs universelles associées au vieillissement du modèle. Dans un second temps, nous étudions le vieillissement du modèle XY complètement frustré bidimensionnel. L'état fondamental présente une symétrie particulière $U(1) \otimes Z_2$ qui nécessite la définition d'une variable appelée chiralité. Nous étudions l'effet de cet état fondamental sur le vieillissement de chacune des variables. Lors d'une trempe depuis l'état fondamental jusque dans la ligne critique, le vieillissement des spins est bien décrit par l'approximation de ondes de spins du modèle XY. Lors d'une trempe depuis la phase haute température jusqu'à la température de Berezinskiĭ, Kosterlitz et Thouless des spins d'une part et jusqu'à la température de brisure de symétrie de la chiralité d'autre part, les variables d'échelle sont modifiées par des corrections logarithmiques. Nous estimons les grandeurs universelles caractérisant le vieillissement des deux variables. La chiralité présente des valeurs incompatibles avec la classe d'universalité du modèle d'Ising $2d$.

MOTS CLÉS : Physique statistique, phénomènes critiques, transition de phase, exposant critique, simulations Monte Carlo, modèle d'Ising, dimension critique supérieure, champ moyen, effets de taille finie, vieillissement, relaxation, frustration, modèle XY, chiralité, défauts topologiques.