



Etude de systemes hors equilibre

Ivan Junier

► To cite this version:

Ivan Junier. Etude de systemes hors equilibre. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2004. Français. NNT: . tel-00007153

HAL Id: tel-00007153

<https://theses.hal.science/tel-00007153>

Submitted on 19 Oct 2004

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.

Etude de phénomènes loin de l'équilibre :

1. Systèmes soumis à des champs oscillants
2. Réalisations microscopiques de modèles d'espace des phases
pour les transitions vitreuses

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 14 octobre 2004

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université Denis Diderot – Paris VII
(Spécialité: Physique)

par

Ivan Junier

Composition du jury

<i>Président :</i>	M. Jean-Baptiste Fournier
<i>Rapporteurs :</i>	Mme Cécile Monthus M. Jean-Philippe Bouchaud
<i>Examineur :</i>	M. Felix Ritort
<i>Directeur :</i>	Jorge Kurchan

Remerciements

Premièrement, je tiens à remercier les membres du jury pour avoir accepté la responsabilité de juger mon travail de thèse.

Le travail présenté dans ce manuscrit est le fruit de trois années de recherche passées au sein du laboratoire PMMH à l'ESPCI. A ce titre, je tiens à remercier son directeur, Jose Eduardo Wesfreid, pour le dynamisme qu'il insuffle et pour sa gentillesse. Je tiens aussi à remercier Frédérique Auger pour son sourire et son aide des plus efficaces dans mes diverses démarches 'extra-recherche'. Je tiens aussi à remercier l'ensemble des permanents du laboratoire pour leur joie quotidienne, plus particulièrement Marc Fermigier et Jean-Claude Charmet qui ont balisé mon parcours à l'ESPCI depuis déjà sept ans, même si parfois je n'étais pas toujours au rendez-vous... Je tiens aussi à remercier les différents administrateurs réseaux qui ont tenu à bout de bras le système informatique du labo, à savoir Françoise, Serge et Antonio. Enfin, j'ai une pensée pour l'ensemble des thésards qui rôdent ou qui ont rôdé dans les deux bâtiments du laboratoire pour expérimenter le dur apprentissage de la recherche.

Ces trois années de thèse se sont déroulées principalement dans deux pièces : celle du 'père' et celle des 'enfants'. La première abrite Jorge Kurchan, mon directeur de thèse. Nul n'est besoin de vanter les qualités scientifiques reconnues de cet artiste de la physique. Je tiens seulement à lui exprimer ma sincère reconnaissance pour m'avoir guidé dans mes recherches brouillon et pour avoir laissé une place suffisante à ma personnalité, préservant ainsi mon enthousiasme pour la physique. La pièce des 'enfants', dans laquelle j'ai passé la plupart de mon temps, m'a permis de rencontrer un nombre d'individus qui me sont désormais chers. Je pense en premier lieu à Léo qui est retourné au Venezuela avec sa Marie-Hélène et qui, je l'espère, pourra concrétiser ses idéaux les plus nobles. Je pense ensuite à Pierre, l'expérimentateur isolé de la pièce, concentré d'humilité et de perspicacité. Vient ensuite l'ambassadeur de la Hollande (Hup Holland!) : Snoeijer, Kampen! Je tiens alors à les remercier, lui, Jacco (même s'il est difficile d'accepter de prendre des 'roustes' au billard), et elle, Danielle, pour leur gentillesse et à m'incliner devant leur dévotion hollandaise (pour le foot, évidemment!). Pour finir, je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance pour Sorin Tănase-Nicola, mon compagnon de thèse depuis trois ans. J'aurais pu écrire une page de remerciements seulement dédiée à lui mais je sais que son humilité déconcertante n'aurait pas supporté... Je voudrais simplement exprimer ma gratitude pour l'aide qu'il m'a apportée tant du point de vue de la physique que des soucis informatiques. Je tiens aussi à exprimer mon admiration pour ce brillant scientifique qui ne demande qu'à exploser mais aussi pour l'intelligence de son érudition. Enfin, comment dire un mot sur Sorin sans penser à Codruța. Je leur souhaite alors beaucoup de chances pour leur vie dans le pays de Jacco.

Pour finir, le laboratoire a été une aventure humaine enrichissante grâce à la diversité des nationalités qu'on peut y rencontrer. A ce sujet, nous pouvons remercier Jorge pour sa schizophrénie franco-américaine qui permet d'avoir un regard souvent différent sur les

choses mais aussi assez irritant, car derrière une bonhomie le rendant très sociable, l'animal est plutôt provocateur (bon courage Julien!).

Le travail présenté dans ce mémoire doit aussi beaucoup à une collaboration avec Eric Bertin. Qu'il en soit remercié pour sa précieuse aide et son efficacité mais aussi pour son humour grinçant qui a rendu cette collaboration très agréable.

J'aimerais remercier tous mes amis comme ils le méritent mais je m'en sens bien incapable puisque les remerciements seraient plus longs que la thèse. Alors, je ne citerai que Bruno Ponchon, mon vieil ami de lycée et colocataire improvisé (à la mode équatorienne...), qui n'aurait pas supporté de ne pas voir apparaître son nom dans ce manuscrit (la physique est encore loin de tout expliquer!).

Enfin, mes pensées les plus tendres vont à mes parents. Je les remercie de m'avoir toujours soutenu et d'avoir toujours gardé confiance. Cette thèse leur est dédiée.

Table des matières

Introduction	1
I Systèmes oscillants	3
1 Problèmes à symétries continues	5
1.1 Motivations	5
1.1.1 Etat de l'art	5
1.1.2 Modeler les symétries	7
1.2 Stratégies	8
1.3 Etude du XY en champ moyen	9
1.3.1 Dynamique de Langevin	9
1.3.2 Solutions génériques	12
1.3.3 Approximation champ moyen du XY	12
1.4 Méthodes d'approximation et mécanismes de sélection	14
1.4.1 Champ faible et basse fréquence : mécanisme de sélection transverse .	14
1.4.2 Développement basse température : sélection longitudinale	16
1.4.3 Approximation de Hartree	17
1.5 Ingénierie des transitions de phases	20
1.5.1 Développement à hautes fréquences	20
1.5.2 Application de plusieurs champs	21
1.6 Conclusions et perspectives	22
2 Annexes	25
2.1 Annexe A : Potentiel Mou	25
2.2 Annexe B : Développement basse température	26
2.2.1 Modèle XY	26
2.2.2 Modèle Heisenberg	28
2.3 Annexe C : Méthode de Hartree	30
2.3.1 Justification de l'approximation	30
2.3.2 Fluctuations dans la phase longitudinale	31
2.4 Annexe D : Développement Hautes Fréquences	32
2.4.1 Application d'un seul champ	32
2.4.2 Application de plusieurs champs	35
3 Transition	37
Liste des abréviations	45

II	Réalisations microscopiques de modèles de pièges	47
4	Réalisations microscopiques du modèle de pièges de Bouchaud	49
4.1	Le modèle de pièges de Bouchaud (BTM)	49
4.2	NPP et le modèle de pièges (BTM)	52
4.2.1	Analyse de l'équilibre	53
4.2.2	Analyse dynamique	54
4.3	Approximations diophantines et modèles de pièges	66
4.4	Philosophie du BTM	68
4.4.1	Comportement de pièges	68
4.4.2	FDR	69
4.5	Comportement de pièges dans le REM	70
4.5.1	L'horizon	70
4.5.2	Quelle dynamique pour le REM ?	71
4.5.3	Réalisations du REM	72
4.6	Variations sur le BTM	72
4.6.1	Modèles de collections de BTM	72
4.6.2	Modèle de pièges à plusieurs niveaux	74
5	Réalisations microscopiques du modèle de Barrat-Mézard à température finie	77
5.1	Le modèle de Barrat-Mézard (BMM)	77
5.2	Programme	80
5.3	Réalisations des modèles originaux	80
5.3.1	$K = 1$	80
5.3.2	$K = N$	80
5.3.3	Régime entropique et régime activé	82
5.4	Dynamique intermédiaire : $1 \ll K \ll N$	83
5.4.1	Structure de l'espace des phases	83
5.4.2	Lois de vieillissement	85
5.5	FDR dans le régime de vieillissement	89
5.5.1	$K=N$ et le BMM	89
5.5.2	$1 \ll K \ll N$ ou l'émergence d'une température effective	90
5.6	Discussion	91
5.6.1	Influence de la distribution en énergie	91
5.6.2	Interprétation de la FDR linéaire	93
5.7	Etat des lieux et discussion	94
6	Dynamique locale dans l'espace des phases	97
6.1	Connectivité locale	99
6.1.1	Description discrète	99
6.1.2	Description continue pour des énergies indépendantes	99
6.2	Définition du modèle	101
6.2.1	Densité d'états	101
6.2.2	Choix de la connectivité	101
6.3	Relaxation à l'équilibre	104
6.3.1	Phase haute température	105
6.3.2	Divergence des temps de relaxation	106
6.4	La phase basse température	107
6.4.1	Lois de corrélation sans champ	107

6.5	FDR pour des régimes purement entropiques	109
6.6	Résumé et perspectives	111
Annexes		113
A	Réalisations du BMM	115
A.1	L'horizon lorsque $1 \ll K \ll N$	115
A.2	Dérivation de la température effective	115
A.2.1	L'aimantation à température nulle	116
A.2.2	Température finie	118
A.2.3	Généralisation aux observables douces	119
B	Dynamique locale	121
B.1	Densité exponentielle en énergie	121
B.2	Densité gaussienne en énergie	123
C	Température effective pour des dynamiques entropiques	125
C.1	Cas fictif d'un retournement de spin pour l'aimantation	126
C.2	Généralisation aux observables gaussiennes	127
C.3	Applications	128
C.3.1	Exemple du BMM	128
C.3.2	REM à connectivité locale	128
C.3.3	Le modèle d'oscillateur harmonique (OSC)	129
Conclusions générales		131
Bibliographie		133
Table des publications		137

Introduction

Une partie de la physique d'aujourd'hui a entrepris le défi de comprendre les phénomènes dont la principale caractéristique est de ne pas être à l'équilibre. Un exemple très simple (en apparence) est le phénomène d'hystérésis dans les matériaux magnétiques. Les domaines magnétiques tendent à s'aligner avec le champ appliqué. Ce dernier dépend du temps, l'aimantation s'adapte donc à chaque instant pour pouvoir le suivre et dissipe ainsi de la chaleur. Un autre exemple totalement différent, puisque tiré de la biologie, est celui du fonctionnement des cellules. En effet, ces dernières ne sont pas dans un état d'équilibre puisque toute sorte de réactions chimiques et de processus mécaniques, assurés respectivement par des enzymes et des moteurs moléculaires, assurent leur bon fonctionnement.

Cette diversité des phénomènes hors équilibre a donné lieu à différentes approches qu'il est aujourd'hui difficile d'unifier¹ alors que la physique de l'équilibre est bien comprise grâce aux concepts de minimisation de l'énergie libre. Les axes de recherche que proposent les physiciens sont divers et variés. Par exemple, il est possible d'étudier des systèmes hors de l'équilibre mais assez proche pour mener des études perturbatives. Une autre perspective est d'étudier spécifiquement des phénomènes loin de l'équilibre et d'en tirer par analogie avec d'autres systèmes des conclusions générales.

Cette thèse est basée sur cette dernière perspective. Nous présentons deux sujets qui semblent déconnectés l'un de l'autre. D'un côté nous abordons la question de systèmes comportant des 'modes mous' et sollicités par des champs périodiques. D'un autre côté nous proposons des réalisations microscopiques de modèles visant à reproduire les phénomènes de relaxation lente vers l'équilibre (typiquement les verres). Ces deux systèmes ont a priori le seul point commun d'être loin de leur état d'équilibre. Cette notion de hors équilibre est tout de même à relativiser. En effet, dans le premier cas, les phénomènes observés sont périodiques dans le temps, faisant donc penser à une forme d'équilibre. Nous essaierons alors autant que possible de donner des outils analytiques permettant de comprendre, voire de prévoir, les différents comportements susceptibles de se produire. Dans le deuxième cas, ces dernières années ont montré que des systèmes évoluant très lentement vers leur état d'équilibre pouvaient prétendre à des descriptions directement issues de la notion d'équilibre, en particulier à travers le concept de température, base de toute la thermodynamique que nous connaissons. Nous aborderons ce genre de discussion à travers des réalisations numériques de modèles théoriques.

Plus concrètement, les deux études de cette thèse ont le point commun de considérer des systèmes composés de spins, c'est-à-dire de vecteurs interagissant entre eux avec une tendance à s'aligner, la température au contraire induisant autant de désordre que possible (entropie). Pour les systèmes soumis à un champ magnétique oscillant (première partie), nous verrons que l'application de ce champ induit des comportements ordonnés tout à fait non triviaux permettant d'une façon générale de réaliser des outils permettant de modéliser

¹Pour une discussion récente des plus éclairées, voir D. Ruelle, *Physics Today*, Mai 2004, p. 48.

la symétrie du problème. Dans la deuxième partie, nous verrons qu'une interaction particulière entre les spins, mêlant à la fois désordre gelé et interaction de type champ moyen (tous les spins interagissent entre eux), permet de comprendre à la fois des comportements de dynamique lente et des problèmes d'optimisation rencontrés dans certains problèmes mathématiques et numériques.

Première partie

Systèmes oscillants

Chapitre 1

Problèmes à symétries continues

1.1 Motivations

1.1.1 Etat de l'art

L'effet d'un champ de forces oscillantes sur un système à N corps n'est pas un sujet nouveau. Sans entrer dans les détails, une multitude de systèmes dont la principale caractéristique est d'être soumis à des forçages oscillants ont été (et le sont toujours) étudiés autant du point de vue théorique que de ses applications. En voici quelques exemples : les phénomènes d'hystérésis dans les matériaux magnétiques [22], les comportements de résonance stochastique [14], les phénomènes de transport par des effets de 'ratchet' [4, 12], les milieux granulaires vibrés [36], les phénomènes de dépiégeage dans les milieux désordonnés [21], les modèles d'oscillateurs couplés [19],... La nécessité d'étudier ces systèmes est indiscutable tant du point de vue de l'ingénierie (ex : science des matériaux magnétiques) que du point de vue des sciences plus fondamentales (ex : dynamique de la modulation du champ magnétique terrestre), expérimentales (ex : détermination de l'élongation de polymères par méthodes magnétiques [10]) et théoriques (ex : transitions de phases hors équilibre). Incidemment, ces dernières années s'est vu développé un regain d'intérêt très dynamique pour l'étude de ces systèmes. En particulier, la littérature sur les phénomènes d'hystérésis des milieux magnétiques s'est exponentiellement enrichie [1].

La boucle d'hystérésis $M - h$, où M est l'aimantation du milieu magnétique et h est le champ magnétique appliqué, possède la propriété intéressante de devenir asymétrique par transformation $h \rightarrow -h$, $M \rightarrow -M$ lorsque la fréquence ω du champ appliqué devient grande. Ceci se traduit par une valeur moyenne non nulle de l'aimantation sur une période du champ (Fig. (1.1)). La raison plutôt évidente de ce comportement est que la fréquence de relaxation du système devient petite devant la fréquence du forçage. Ainsi, le système n'arrive plus à suivre les changements de signes du champ appliqué. Il existe donc dans la plupart des cas une fréquence critique au-dessus de laquelle il se produit une brisure de symétrie puisque dans le plan $M - h$ les solutions symétriques par rapport à l'origine du repère sont équiprobables. L'idée naturelle est alors d'introduire un paramètre d'ordre reflétant cette brisure de symétrie, à savoir Q la moyenne de l'aimantation sur une période complète du champ extérieur, calculée dans le régime stationnaire :

$$Q = \frac{\omega}{2\pi} \oint m dt \quad (1.1)$$

Les travaux pour comprendre l'émergence de ce paramètre d'ordre [1] ont débuté sur des

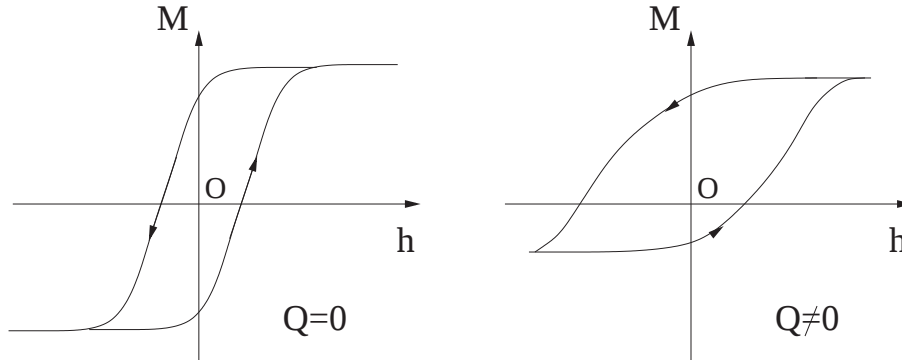


FIG. 1.1 – Brisure de symétrie pour un système magnétique soumis à un champ oscillant. A gauche, l'évolution est quasistatique, $Q = 0$. A droite, la fréquence du champ est plus élevée ; le cycle d'hystérésis n'est plus symétrique par rapport à l'origine O du repère. Dans ce cas, il faut noter que le système admet aussi une solution symétrique par rapport à O de celle présentée.

systèmes de type champ moyen [35]. Cette approximation consiste à négliger toute fluctuation spatiale dans le système. Il s'est alors avéré que la transition était un artefact du champ moyen puisque même dans la limite quasistatique ($\omega \rightarrow 0$) le système présentait une transition dynamique vers une phase décrite par $Q \neq 0$ et nous savons que dans cette limite les processus de nucléation deviennent dominants pour un système de dimension finie ; ils permettent alors sous l'effet d'un champ de renverser l'aimantation dans un temps fini. Les recherches qui ont suivi ont montré qu'il existait tout de même de telles transitions dans des systèmes incorporant les fluctuations [2]. Il faut alors reconnaître que l'essentiel des travaux s'est focalisé sur des systèmes de type Ising pour lesquels les spins magnétiques ne peuvent prendre que des valeurs discrètes $+1$ ou -1 . Seuls des travaux de D. Dhar *et al.* [8] et de M. Rao *et. al* [28], et plus récemment de S.B. Dutta [11], se sont portés sur le cas plus général de spins avec symétrie continue. Cette problématique concerne des spins de type XY (2 composantes de spins) vivant sur un cercle de rayon μ_b (μ_b est le magnéton de Bohr et sera désormais pris égal à 1) ou plus généralement des systèmes dits de Heisenberg (n composantes) vivant sur une hyper-sphère unité de dimension quelconque $n > 2$. Remarquablement, Dhar et Thomas [8] ont montré que dans le cas analytiquement soluble d'un système de spins à N composantes avec $N \rightarrow \infty$, l'existence de modes mous¹ (modes de Goldstone) perpendiculaires au champ empêchait les spins de s'aligner suivant le champ et ceci quelque soient la fréquence et l'amplitude du champ appliqué. Par ailleurs, ils ont aussi mis en évidence qu'une brisure de symétrie apparaissait dans les directions perpendiculaires au champ appliqué, i.e. $Q_{\perp} = \frac{\omega}{2\pi} \oint m_{\perp} dt \neq 0$. L'essentiel de nos résultats montre que ce comportement n'est pas générique pour tout système de symétrie $O(n)$ comme l'avait conjecturé Dhar *et. al* [9]. En effet, nous allons voir que l'application de champs alternés peut induire quatre (dont trois ayant une aimantation moyenne non nulle sur une période) différents types de phases dynamiques que nous décrivons dans le prochain paragraphe.

¹Les modes mous sont caractérisés en théorie des champs par une masse nulle. Il faut alors simplement comprendre que le mouvement le long de ces directions ne demandent aucun travail à fournir. Une image très simple de ce phénomène est le déplacement d'une bille dans un fond de bouteille. Il faut fournir du travail pour élever la bille en direction du sommet alors que s'il n'y a pas de frottement, la bille peut tourner perpétuellement le long de la circonférence.

1.1.2 Modeler les symétries

Nous avons donc deux situations extrêmes décrites plus haut. D'un côté, l'absence de modes nous conduit des systèmes de type Ising à des transitions ayant une aimantation moyenne non nulle le long du champ appliqué. D'un autre côté, lorsque le nombre de composantes de spins n tend vers l'infini pratiquement toutes les configurations sont perpendiculaires au champ ; ainsi, seules des solutions ayant une valeur moyenne non nulle transverse au champ sont observées. L'idée du travail présenté dans cette partie est d'étudier le cas intermédiaire pour lequel pourrait avoir lieu une compétition entre des mécanismes tendant d'un côté à aligner l'aimantation le long du champ et d'un autre à aligner perpendiculairement au champ. Ainsi, nous allons considérer de façon générale des systèmes de type XY ($n = 2$) et de type Heisenberg ($n = 3$) dans le cas d'interaction ferromagnétique sans désordre. Nous allons montrer que les systèmes XY sont susceptibles de présenter *trois* phases distinctes ayant une aimantation moyenne non nulle, à savoir : une phase s'alignant le long du champ magnétique, une phase s'ordonnant perpendiculairement au champ et une phase oblique suivant laquelle l'aimantation peut osciller autour de n'importe quel angle moyen par rapport au champ. Nos résultats concernant le modèle de Heisenberg laisse penser que seule la phase transverse est observée pour ce système lorsqu'un seul champ est appliqué, confirmant la conjecture de Dhar et Thomas lorsque $n \geq 3$.

L'objectif sous-jacent de ce travail est de comprendre de façon générale les effets d'un champ alterné sur un système à symétrie continue. L'importance d'une telle compréhension réside dans le caractère omniprésent des systèmes à symétries continues. En effet, divers systèmes sont concernés par ces propriétés comme les cristaux liquides [33], les polymères lamellaires [23], les défauts cristallins, les conducteurs ferromagnétiques [38], etc... A ce sujet, il est surprenant de constater que dans le cas du ferromagnétisme, il a fallu attendre les années 1990 pour voir apparaître les premières expériences de transition hors-équilibre en présence de champs magnétiques dépendant du temps [15, 17, 32].

Nous verrons qu'une fois compris les mécanismes d'ordre liés à la présence de ces champs alternés, il est possible de les utiliser pour changer la symétrie du système permettant ainsi à partir d'un système initial de construire *physiquement* des modèles ayant des symétries différentes. Par exemple, nous verrons qu'à partir d'un système Heisenberg de symétrie $O(3)$, nous pouvons obtenir des systèmes XY de symétrie $O(2)$. Une situation très intéressante est celle du XY en dimension $d = 2$. En effet, ce modèle est connu pour subir une transition de type Kosterlitz-Thouless caractérisée par la présence de défauts (vortex de spins), appariés à basse température et qui se séparent à l'approche de la température critique. L'aimantation n'est pas un paramètre d'ordre car elle est nulle pour toute température non nulle. Remarquablement, l'application de champs alternés à suffisamment haute fréquence permet alors d'induire une aimantation spontanée de valeur moyenne non nulle dans la direction du champ. Cet effet peut alors se comprendre comme l'induction d'une anisotropie dans le milieu. Nous verrons aussi que le jeu de plusieurs champs bien choisis permet d'obtenir à partir de $O(3)$ une symétrie Ising Z_2 , montrant la polyvalence de l'outil des champs alternés.

Etant donnée la pauvreté des concepts et des méthodes dans le domaine des forçages alternés, notre discussion se scinde essentiellement en deux chapitres. Le premier chapitre correspond à la discussion générale des phénomènes observables et des méthodes que nous avons employées pour mettre en évidence ces phénomènes. A chaque moment nécessaire, ce chapitre renvoie sur une partie du second chapitre (les annexes) exclusivement consacré à la partie technique de ces méthodes. Cette division nous semble indispensable pour la clarté de notre discours.

1.2 Stratégies

Malgré l'intérêt théorique et expérimental du sujet des sollicitations alternées, il est tout à fait surprenant de constater la pauvreté des méthodes que nous avons à notre disposition. La raison est essentiellement due à l'impossibilité d'écrire la distribution *a priori* des états stationnaires sans avoir préalablement résolu la dynamique. Ce constat est particulièrement vrai pour les problèmes à symétrie continue puisqu'à l'heure d'aujourd'hui, aucune méthode générale ne permet d'attaquer d'emblée n'importe quel problème. Seulement récemment, Dutta [11] a proposé une théorie des champs effective permettant de prévoir certains comportements dans des limites que nous préciserons à la fin de ce chapitre. Cependant, nous verrons que la phénoménologie obtenue par Dutta semble a priori incompatible avec certains de nos résultats exacts.

Afin de comprendre notre contribution à ce sujet, il est nécessaire en premier lieu d'expliquer quelle a été notre stratégie pour développer autant que possible des méthodes analytiques fiables pour aborder ces problèmes. Premièrement, comme le modèle XY se situe en quelque sorte à la frontière des systèmes de symétrie Ising et ceux de symétrie $O(n)$, nous avons étudié et résolu ce modèle dans l'approximation champ moyen. Ces résultats sont développés dans la section suivante. Constatant la richesse du diagramme des phases de ce modèle, nous avons réalisé des simulations numériques du modèle XY à dimension finie pour lequel nous avons obtenu des diagrammes de phases tout aussi riches. Nous avons alors développé plusieurs méthodes d'approximation permettant de comprendre l'émergence des différentes phases. Pour résumer, ces méthodes que nous traitons après l'étude du champ moyen sont les suivantes :

Développement basse température : cette méthode permet d'écrire aux premiers ordres en la température un système fermé d'équations concernant l'évolution temporelle de la moyenne des angles d'Euler correspondant aux degrés de liberté orientationnels des spins, et des fluctuations autour de ces angles. Elle permet entre autres de mettre en évidence le mécanisme d'orientation le long du champ.

Arguments adiabatiques : dans la limite des faibles fréquences et des faibles amplitudes de champ dans des proportions telles que l'aimantation ne suit pas simplement le champ oscillant par phénomènes de nucléation, i.e. $\hbar/\omega$ est constant, une approximation adiabatique permet de comprendre le phénomène de sélection transverse mise en évidence par Dhar *et. al* [8].

Approximation de Hartree : cette méthode permet de prendre en compte une partie des contributions non linéaires du Hamiltonien par une approximation quadratique. Elle permet de traiter le délicat problème du XY en deux dimensions et semble être un candidat idéal pour le développement d'une méthode générale pour déterminer les différentes phases du problème.

Développement hautes fréquences : pour finir, nous donnons des arguments liés à un développement hautes fréquences permettant de prévoir le comportement lors de l'application de plusieurs champs. Cette méthode semble très prometteuse du point de vue de l'ingénierie des symétries d'un système.

Commençons donc notre étude par l'approximation champ moyen permettant aussi d'introduire l'essentiel des principes qui sous-tendent notre travail.

1.3 Etude du XY en champ moyen

1.3.1 Dynamique de Langevin

D'un point de vue général, un système ferromagnétique de spins $\vec{S}_i$ sans désordre est décrit par un hamiltonien, ou de façon équivalente, une énergie d'interaction donnée par :

$$E_{\text{int}} = H = -\frac{J}{2d} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.2)$$

où $\langle i,j \rangle$ indique que nous considérons seulement les plus proches voisins. Ainsi, $2d$ est le nombre de voisin et d est la dimension spatiale dans laquelle sont plongés les spins. Les spins $\vec{S}_i$ sont des vecteurs ayant n composantes, dont la longueur est soit fixée à 1 (spins *durs*), ou peut fluctuer à l'intérieur d'un potentiel mou de la forme :

$$E_m = \frac{A}{2} (\|\vec{S}\|^2 - 1)^2 \quad (1.3)$$

J est l'énergie d'interaction magnétique que nous prenons désormais égale à 1 de telle façon que les températures sont prises en référence à $J = 1$. En outre, nous prenons tout le long de ce manuscrit le facteur de Boltzmann k_B égal à 1.

L'étude à l'équilibre de ces systèmes est maintenant très bien comprise grâce à la théorie des champs même si parfois quelques subtilités subsistent [3]. Le sont moins les propriétés dynamiques lorsque nous appliquons un champ extérieur périodique. Dans ce cas, il faut rajouter dans l'énergie un terme de champ du type :

$$E_h = -\cos(\omega t) \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i \quad (1.4)$$

Aucune méthode générale n'est bien définie pour décrire le système suivant les paramètres de contrôle n , d , $\|\vec{h}\|$, ω et la température T . Incidemment, il faut étudier spécifiquement la dynamique de ces systèmes. Le choix le plus naturel de dynamique est la dynamique de Langevin. Dans la *limite fortement dissipative*, l'équation d'évolution temporelle d'un spin $\vec{S}_i$ dont les composantes sont S_i^α , $\alpha = 1, \dots, n$, est alors donnée par :

$$\dot{S}_i^\alpha = -\frac{\partial E}{\partial S_i^\alpha} + \eta_i^\alpha \quad (1.5)$$

où η_i^α est un bruit blanc gaussien de variance $2T$. L'énergie E est la somme de (1.2), (1.4) et éventuellement de (1.3). Dans le cas de spins *durs*, la longueur est fixée par un multiplicateur de Lagrange². La limite fortement dissipative néglige tout effet d'inertie, se prêtant donc bien à la description de phénomènes ferromagnétiques. En effet, pour ces systèmes, le phénomène d'inertie est dissipé par interactions avec les autres degrés de liberté du réseau cristallin (phonons). Il est donc d'usage d'intégrer ces degrés de liberté et de les considérer comme un bain thermique. Cependant, il est possible de prendre en compte des termes de précession résultant de ces effets d'inertie. Ceci conduit à des phénomènes différents de ceux que nous traitons mais tout aussi intéressants [7]. Enfin, il n'est pas inutile de rappeler que les phénomènes de précession de spin unique sont très étudiés dans le domaine de la RMN.

²Numériquement, la simulation de ces équations de Langevin dans le cas de 'spins durs' consiste simplement à intégrer pas à pas l'équation (1.5) avec une renormalisation de la longueur des spins à 1 après chaque pas de temps.

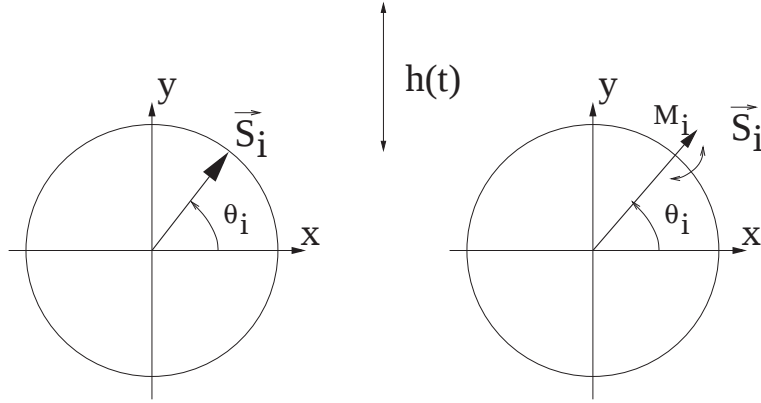


FIG. 1.2 – Deux types de spins peuvent être considérés. Des spins 'durs' (schéma de gauche) pour lesquels la norme est fixée à 1 (les cercles sont des cercles unité). Le spin $\vec{S}$ a un seul degré de liberté. Des spins 'mous' (droite) dont la norme peut fluctuer autour de 1 ; la longueur du spin est un degré de liberté supplémentaire.

Spin 'dur' : ordre par le désordre

Considérons le présent modèle à température nulle pour des spins de type XY vivant sur un cercle. En passant en coordonnées polaires, les équations d'évolution de l'angle θ_i (Fig. (1.2)) des spin i sont données par :

$$\dot{\theta}_i = -\frac{1}{d} \sum_j \sin(\theta_i - \theta_j) - h \cos(\omega t) \cos \theta_i \quad (1.6)$$

Ce système d'équation admet toujours une solution suivant laquelle l'ensemble des spins se meuvent en phase, i.e. $\theta_i = \theta \forall i$. En outre, numériquement nous observons que les solutions inhomogènes tendent de toute manière à s'homogénéiser. Incidemment, les termes d'interaction deviennent nuls et le système se résume à une équation de *spin unique* valable pour toute géométrie, i.e. pour tout d :

$$\dot{\theta} = -h \cos(\omega t) \cos \theta \quad (1.7)$$

Cette équation admet une infinité de solution de la forme :

$$\theta(t) = 2 \arctan \left(e^{-(h \sin(\omega t)/\omega + k)} \right) - \frac{\pi}{2} \quad (1.8)$$

où k peut prendre n'importe quelle valeur sur $\mathbb{R}$. Ainsi, à température nulle, toute solution oscillant autour de n'importe quel angle est autorisée. Remarquablement, au contraire du cas sans champ, ces solutions ne sont reliées par aucune symétrie continue. Seules les symétries discrètes $\theta \rightarrow -\theta$ et $\theta \rightarrow \pi - \theta$ survivent. Dans le cas $n > 2$, un sous-groupe de symétrie supplémentaire survit : par exemple, lorsque $n = 3$, les spins évoluent suivant un angle azimuthal θ comme dans (1.7) et un angle équatorial ϕ constant. Ainsi, des solutions avec un même k mais des angles équatoriaux différents sont reliés par une symétrie $O(2)$. La généralisation à n quelconque est immédiate. Par conséquent la discussion suivante est valable pour toute géométrie et pour n'importe quel nombre de composantes de spins $n \geq 2$.

Dans des situations comme celles-ci, c'est-à-dire lorsque des solutions à température nulle ne sont reliées entre elles par aucune symétrie, des fluctuations thermiques ou quantiques

sélectionnent généralement un sous-ensemble de ces solutions (à moins bien sûr que les fluctuations soient trop fortes pour qu'un ordre quelconque apparaisse). Ce phénomène est communément appelé *ordre par le désordre* [37] puisque ce sont les fluctuations qui sont responsables de la réduction du nombre de solutions. D'un point de vue pratique, si à basse température nous préparons le système dans une des multiples solutions de température nulle, celle-ci diffusera lentement vers une solution particulière : une perturbation *séculaire* agit sur des échelles de temps beaucoup plus petites que la fréquence de vibration.

Avant de considérer l'effet d'un bain thermique conduisant à la sélection de solutions particulières, il est très instructif d'étudier le cas de spins 'mous'. En effet, nous allons voir que dans ce cas, une solution particulière transverse au champ est déjà sélectionnée à température nulle.

Spins 'mous' : sélection à température nulle

Considérons maintenant le cas de spins mous à température nulle et étudions le cas particulier du modèle XY. De la même façon que précédemment, la discussion est valable pour n'importe quelle géométrie et n'importe quel nombre de composantes de spins. Les solutions homogènes du système vérifient maintenant un système d'équations dont les inconnues sont l'angle θ et la norme M de $\vec{S}$ (Fig. (1.2)) :

$$\begin{aligned}\dot{M} &= M + h \cos(\omega t) \sin \theta - AM(M^2 - 1) \\ M\dot{\theta} &= h \cos(\omega t) \cos \theta\end{aligned}\tag{1.9}$$

Procédons alors à un développement des solutions en $1/A$ représentant la dureté du potentiel (plus A est grand, plus le potentiel est dur, c'est-à-dire plus il contraint le spin à être de norme unité). A l'ordre dominant, $M(t)$ est donné par $M(t) = 1 + (1 + h \cos(\omega t) \sin \theta)/2A$. Reportons cette solution dans l'équation d'évolution de $\theta(t)$ et perturbons une solution particulière $\theta_0(t)$ du cas 'spin dur'. Considérons alors $\theta(t) = \theta_0(t) + \alpha(t)$. Nous pouvons montrer (voir annexe A) qu'à chaque période $\alpha(t)$ gagne une quantité non nulle :

$$-\frac{\omega}{2\pi} \frac{h^2}{2A} \oint dt \cos \theta_0(t) \int^t dt' \sin \theta_0(t')\tag{1.10}$$

où $\oint$ indique que l'on intègre sur une période du champ. . Pour se convaincre que ce terme n'est pas nul, il suffit de considérer la limite des fréquences infinies. En effet, dans cette limite, θ_0 ne dépend plus du temps et vaut par exemple Ω . Cette quantité vaut alors :

$$-\frac{\pi h^2}{2A\omega} \sin \Omega \cos \Omega\tag{1.11}$$

Nous voyons donc que lorsque l'aimantation initiale se trouve dans le premier ($\Omega \in [0, \pi/2]$) et troisième quadrant ($\Omega \in [\pi, 3\pi/2]$), $\alpha(t)$ a tendance à diminuer à chaque période et inversement pour les autres quadrants. Ainsi, la solution symétrique par rapport au plan équatorial est sélectionnée dans ce cas. Par ailleurs, numériquement nous avons vérifié exhaustivement que le système d'équations (1.9) conduisait systématiquement à une solution transverse au champ magnétique. Par conséquent, à température nulle, lorsque les spins ont un degré de liberté supplémentaire sur leur longueur, quelque soit la force du potentiel contraignant ce degré de liberté, le système présente quatre solutions particulières situées dans le plan équatorial (donc transverses au champ appliqué) reliées entre elles par une symétrie discrète $\theta \rightarrow -\theta$ et $\theta \rightarrow \pi - \theta$. Par ailleurs, remarquons que le terme *séculaire* est bien adapté puisque pour des potentiels très durs ($A \gg 1$) le temps caractéristique d'évolution $\sim A \gg \omega^{-1}$.

Notre objectif étant d'étudier la possibilité de transitions entre plusieurs phases dynamiques qualitativement différentes, notre étude se concentre uniquement sur l'étude du cas dur.

1.3.2 Solutions génériques

Un ferromagnétique de symétrie $O(n)$ (n composantes de spins) peut présenter *a priori* quatre types de phases dynamiques caractérisables par :

- leurs aimantations $M_\perp(t)$, respectivement $M_h(t)$, perpendiculaire, respectivement parallèle, au champ h appliqué,
- l'angle faisant entre ces deux aimantations $\theta(t) = \tan^{-1}(M_\perp(t)/M_h(t))$,
- les quantités correspondantes moyennées sur une période : $\overline{M}_\alpha \equiv \frac{\omega}{2\pi} \oint dt M_\alpha(t)$ et $\overline{\theta} \equiv \frac{\omega}{2\pi} \oint dt \theta(t)$.

Nous distinguons alors les phases suivantes :

Paramagnétique : l'aimantation suit le champ avec un certain retard (hystérésis) : $M_\perp(t) = 0$ et $\overline{M}_h = 0$.

Longitudinale : $\theta(t) = 0$ ou $\theta(t) = \pi$. L'aimantation pointe dans la direction du champ : $M_\perp(t) = 0$, mais $\overline{M}_h \neq 0$.

Transverse : $\overline{\theta} = \pi/2$ or $\overline{\theta} = -\pi/2$. L'aimantation a une moyenne non nulle perpendiculairement au champ, $\overline{M}_\perp \neq 0$. La composante parallèle au champ a une moyenne nulle, $\overline{M}_h = 0$.

Oblique : $0 < \overline{\theta} < \pi/2$ ou $\pi/2 < \overline{\theta} < \pi$. L'aimantation évolue autour d'un angle oblique avec la direction du champ : $\overline{M}_\perp \neq 0$ et $\overline{M}_h \neq 0$.

La solution longitudinale est doublement dégénérée. Dans le cas XY , les solutions obliques sont quatre fois dégénérées ainsi que les transverses. Ces solutions deviennent continûment dégénérées lorsque $n > 2$ (une solution par plan déterminé par $(M_h, M_\perp)$).

Rappelons à ce stade que jusqu'à maintenant seules des transitions entre d'un côté phases paramagnétiques et phases longitudinales, et d'un autre entre phases paramagnétiques et phases transverses ont été mises en évidence. La première transition concerne les systèmes de type Ising et la seconde les ferromagnétiques lorsque $n \rightarrow \infty$.

1.3.3 Approximation champ moyen du XY

L'approximation champ moyen a l'avantage d'être exactement résoluble et permet donc d'obtenir un diagramme des phases complet. Les équations d'évolution se réduisent à un seul spin et l'ensemble des spins se comportent exactement de la même façon. Il n'y a pas de fluctuation spatiale dans le système. Ainsi, dans le cas du modèle XY pour des spins durs, les équations d'évolution des $\theta_i(t)$ associés aux spins i se réduisent à une loi stochastique de *spin unique* de type Langevin :

$$\dot{\theta} = -\frac{\partial V(\theta)}{\partial \theta} + \eta \quad (1.12)$$

où η est un bruit blanc gaussien d'amplitude $2T$. $V(\theta)$ est donné par :

$$V(\theta) = -\langle \cos \theta \rangle_t \cos \theta - \langle \sin \theta \rangle_t \sin \theta - h \cos(\omega t) \sin \theta \quad (1.13)$$

où $\langle \bullet \rangle_t = \int \bullet d\theta P(\theta, t)$ dénote la moyenne à l'instant t sur les réalisations du bruit. Pour obtenir la solution du problème, une astuce est de passer par l'équation d'évolution de la

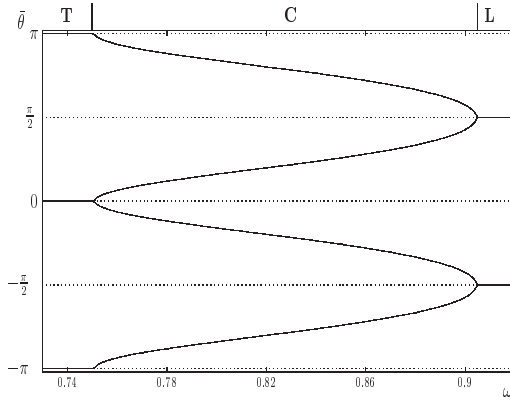


FIG. 1.3 – $\bar{\theta}$ fonction de ω pour le XY en champ moyen. $h = 1$, $T = 0.2$. Les transitions sont du second ordre.

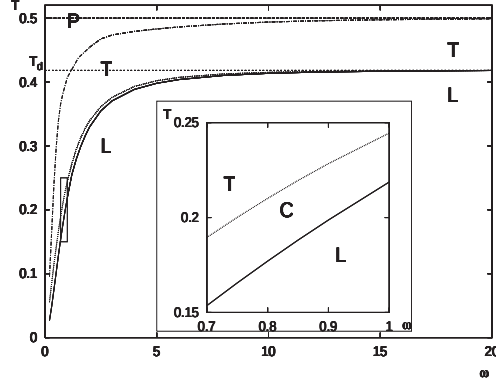


FIG. 1.4 – Diagramme de phase du XY champ moyen dans l'espace T - ω . $h = 1$.

probabilité $P(\theta, t)$ de trouver l'angle du 'spin unique' à la valeur θ au temps t . Cette équation est donnée par l'équation de Fokker-Planck [30] associée à (1.12) :

$$\dot{P}(\theta, t) = \frac{\partial}{\partial \theta} \left(T \frac{\partial}{\partial \theta} + V'(\theta) \right) P(\theta, t) \quad (1.14)$$

En multipliant systématiquement cette équation par $\cos(p\theta)$ et $\sin(p\theta)$ avec p entier non nul et en intégrant sur $[0, 2\pi]$, nous obtenons le système d'équation suivant pour les variables $x_p \equiv \langle \cos(p\theta) \rangle$ et $y_p \equiv \langle \sin(p\theta) \rangle$:

$$\begin{aligned} \dot{y}_p &= -p^2 T y_p + \frac{1}{2} p x_1 (y_{p-1} - y_{p+1}) + m(x_{p-1} + x_{p+1}) \\ \dot{x}_p &= -p^2 T x_p + \frac{1}{2} p x_1 (x_{p-1} - x_{p+1}) - m(y_{p-1} + y_{p+1}) \\ \dot{y}_1 &= \left(\frac{1}{2} - T\right) y_1 - \frac{1}{2} x_1 y_2 - \frac{1}{2} (y_1 + h(t)) x_2 + \frac{1}{2} h(t) \\ \dot{x}_1 &= \left(\frac{1}{2} - T\right) x_1 - \frac{1}{2} x_1 x_2 - \frac{1}{2} (y_1 + h(t)) y_2 \end{aligned} \quad (1.15)$$

avec $m(t) = p(y_1 + h(t))/2$. Dans le cas du modèle de Heisenberg, les variables à étudier seraient les harmoniques sphériques $Y_{l,m}$. Une première constatation est qu'un nombre infini d'équations est nécessaire pour décrire le système même dans l'approximation champ moyen. Ceci est une signature du caractère hors-équilibre du système. En effet, le cas statique est caractérisé seulement par une relation unique d'autocohérence vérifiée par l'aimantation.

Nous avons numériquement résolu ce système en gardant autant de modes que possible (un mode correspond à une valeur de p), c'est-à-dire en vérifiant à chaque fois que l'ajout de modes ne changeait pas la solution du système. Remarquablement, lorsque nous faisons varier l'amplitude du champ, la fréquence et la température, nous observons l'ensemble des solutions présentées plus haut, à savoir des phases paramagnétique (P), transverse (T), oblique (C) (pour 'canted') et longitudinale (L).

Fig. (1.3) montre les valeurs de $\bar{\theta}$ en fonction de la fréquence ω à une température³

³La transition paramagnétique-ferromagnétique sans champ extérieur se produit à une température $T = 0.5$ dans les unités de J .

$T = 0.2$ et $h = 1$. Nous observons des transitions du second ordre : à mesure que la fréquence diminue, le système passe d'une solution longitudinale à une solution oblique, puis d'une solution oblique à une solution transverse. A plus basse fréquence, nous obtenons une solution paramagnétique. Fig. (1.4) donne le diagramme de phase général pour une valeur de champ $h = 1$ (la ligne pointillée à $T = 0.5$ représente la transition para-ferro sans champ). Remarquablement, dans la limite des hautes fréquences, $\omega \rightarrow \infty$ avec $h/\omega \rightarrow 0$, nous observons une transition dynamique à $T_d \sim 0.42$ entre une phase longitudinale et une phase transverse. Par ailleurs les simulations numériques laissent penser que cette transition est indépendante de la valeur du champ $h > 0$.

Fort de la mise en évidence des différentes phases susceptibles de se produire pour le modèle XY, nous allons à travers différentes approximations étendre notre étude aux cas plus concrets de dimension finie pour lesquels, comme nous l'avons déjà signalé, des mécanismes de nucléation peuvent modifier qualitativement les phases obtenues en champ moyen. Nous justifierons autant que possible nos approximations par des réalisations numériques de ces systèmes. Un résultat important de l'étude qui suit est que malgré les fluctuations intervenant dans le système, nous retrouvons les mêmes phases que le champ moyen pour toute dimension spatiale $d \geq 3$. En ce qui concerne le cas le plus intéressant pour lequel $d = 2$, les choses sont sensiblement différentes puisque numériquement nous n'obtenons pas de phase transverse, ni de phase oblique. Cependant, nous montrons qu'il est possible d'induire une phase aimantée (ayant la symétrie Ising) à partir de la phase sans aimantation de Kosterlitz-Thouless.

1.4 Méthodes d'approximation et mécanismes de sélection

Outre la résolution de nos modèles, les méthodes que nous développons dans cette partie ont aussi pour objectif de proposer des pistes de réflexion pour des travaux futurs sur les problèmes à symétrie continue.

1.4.1 Champ faible et basse fréquence : mécanisme de sélection transverse

Dans la limite des faibles fréquences et des faibles champs ($\omega \rightarrow 0$, h/ω constant), nous pouvons donner un argument général pour affirmer qu'il existe une sélection transverse pour tout $n \geq 3$ et $d \geq 3$. Considérons donc un champ appliqué le long de l'axe z et décomposons le suivant ses composantes $h_M(t)$ alignée avec l'aimantation instantanée et celle perpendiculaire $h_\perp(t)$. Comme le champ est faible et varie lentement, l'effet de la composante $h_M(t)$ est de changer la norme de l'aimantation linéairement et adiabatiquement : $M(t) = M_0 + Ch_M(t)$, où M_0 est la norme non perturbée et C une susceptibilité positive. D'un autre côté, l'effet de la composante perpendiculaire est de modifier l'angle Ω que fait l'aimantation avec le plan équatorial : $J(M)\dot{\Omega} = h_\perp(t)$. Le coefficient de mobilité $J^{-1}(M)$ dépend seulement de la norme M pour des raisons de symétrie. Ainsi, regroupant ces deux résultats, nous avons :

$$J(M)\dot{\Omega} = h(t) \cos \Omega \quad ; \quad M = M_0 + Ch(t) \sin \Omega \quad (1.16)$$

En utilisant l'approximation des faibles champs, nous trouvons :

$$\dot{\Omega} = \frac{h(t) \cos \Omega}{J(M_0) + CJ'(M_0)h(t) \sin \Omega} \quad (1.17)$$

Il est facile de vérifier que cette équation conduit à une sélection transverse dans le cas $J'(M_0) > 0$, i.e. lorsque la mobilité diminue pour des aimantations de plus en plus grandes.

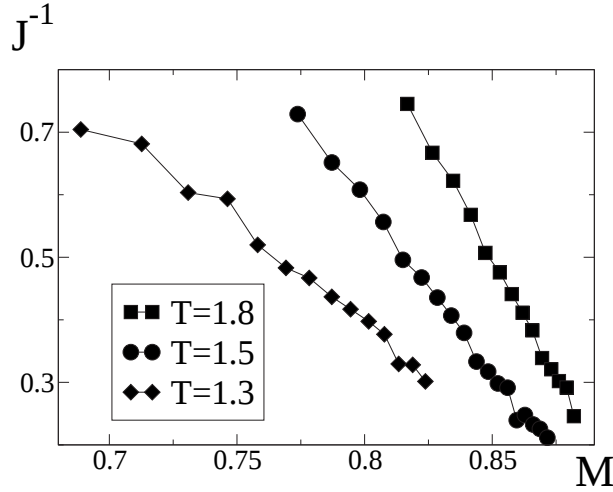


FIG. 1.5 – Evolution du coefficient de mobilité en fonction de l'aimantation pour le modèle XY lorsque $d = 3$. Les points sont obtenus en mesurant l'angle de déviation de l'aimantation lorsqu'elle est soumise à un champ perpendiculaire. Pour obtenir différentes valeurs d'aimantation, il suffit d'appliquer un champ le long de l'aimantation.

Remarquons à ce point qu'un mécanisme de nucléation inhomogène en dimension d demanderait une taille critique de goutte de l'ordre de $h^{-1/2}$ et une barrière d'énergie libre à franchir d'ordre $h^{-(d-2)/2}$, impliquant des temps d'évolution bien plus grands que ω^{-1} . Ainsi, ce genre de mécanisme est insuffisant pour détruire l'ordre transverse induit par le champ.

Nous pouvons alors expliquer la sélection transverse comme un mécanisme de 'ratchet'. Supposons en effet que l'aimantation commence à un angle situé dans le premier quadrant. Pendant la moitié de période pour laquelle le champ magnétique pointe vers le haut, ce dernier fait tourner l'aimantation vers l'axe z et dans le même temps étire la norme. Durant la demi-période négative la rotation est dirigée vers le plan xy et la norme est raccourcie. La faible variation de norme rend le cycle positif moins efficace (si $J'(M_0) > 0$) que les cycles négatifs. Ainsi, en fin de chaque période, le vecteur a un mouvement net dirigé dans la direction transverse. D'ailleurs, ce mécanisme s'applique dans le cas des 'spins mous' à température nulle puisque dans ce cas l'évolution (2.2) (Annexe A) de l'angle θ peut se mettre sous la forme (1.17) en faisant les changements $\Omega \rightarrow \theta$, $J(M_0) \rightarrow 1 + 1/2A$ et $J'(M_0) \rightarrow 1/2A$. En d'autres mots, le mécanisme de sélection transverse peut s'interpréter comme la transformation d'un spin 'dur' en spin 'mou' (il serait d'ailleurs intéressant de connaître la valeur effective A_{eff}).

Nous avons numériquement intégré les équations de Langevin. Nous avons alors observé cette solution transverse pour XY et pour Heisenberg ($n = 3$) lorsque $d = 3$, laissant supposer que ce comportement existe pour toute dimension $d \geq 3$. Nous rapportons en Fig. (1.6) les trois phases d'aimantation moyenne non nulle sur une période obtenues pour un système XY en dimension 3 avec 70^3 spins. La simulation numérique consiste à intégrer pas à pas les équations de Langevin (1.5) pour chaque spin. D'un autre côté, Fig. (1.5) confirme bien que le coefficient $J(M)$ est une fonction croissante de M pour ce modèle. En outre, l'approximation basse fréquence et petite aimantation du modèle champ moyen donne $J(M) = M$, confirmant le caractère universel de la dépendance de J en fonction de M .

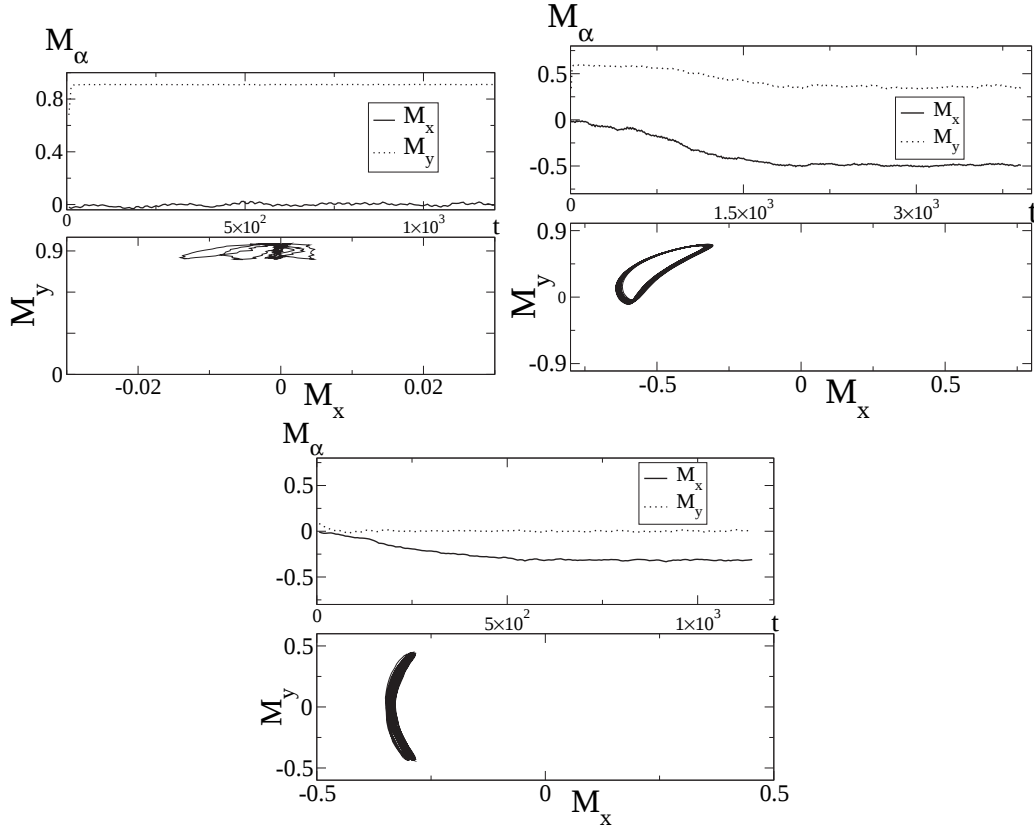


FIG. 1.6 – Simulations numériques des équations de Langevin du modèle XY en dimension 3. Pas de temps : 0.005. $N = 70^3$. Constante de couplage (voir texte) $A_{ij} = 1$, $N = 70^3$, $h = 1$, $\omega = 1$. Les figures du haut donnent l'évolution des composantes de l'aimantation moyennées sur une période. De gauche à droite et de haut en bas, nous avons une phase longitudinale ($T = 0.5$), une phase oblique ($T = 1.575$), et une phase transverse ($T = 2$). Les schémas du bas donnent l'allure de l'aimantation dans le plan M_x, M_y pour les dernières périodes.

1.4.2 Développement basse température : sélection longitudinale

Cas XY

Nous avons vu que l'ensemble des modèles à symétrie continue ($n \geq 2$) sont exactement résolubles à température nulle. Un développement naturel est donc celui des basses températures en puissance de T . Ce développement est faisable pour toute dimension d dans le cas, et seulement dans ce cas, où le développement est analytique lorsque $T \rightarrow 0$. Pour le cas XY, une méthode fructueuse est de développer chaque θ_i autour de la valeur moyenne $\langle \theta_i(t) \rangle$: $\theta_i(t) = \langle \theta_i(t) \rangle + \tilde{\theta}_i$. En utilisant l'équation de Fokker-Planck associée et en négligeant la probabilité de trouver un spin perpendiculaire à l'orientation moyenne, nous pouvons écrire un système d'équation dans le même esprit que le champ moyen pour les variables $\langle \theta_i(t) \rangle$, $\langle \tilde{\theta}_i \tilde{\theta}_j(t) \rangle$, $\langle \tilde{\theta}_i \tilde{\theta}_j \tilde{\theta}_k(t) \rangle, \dots$ A l'ordre T , seules les fonctions de corrélation à

deux points sont nécessaires. Dans le cas général, nous obtenons (voir annexe B) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle &= T \delta_{ab} - \sum_j A_{aj} \langle \tilde{\theta}_b (\tilde{\theta}_a - \tilde{\theta}_j) \rangle - 2h(t) \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle \sin \langle \theta_a \rangle \\ \frac{d \langle \theta \rangle}{dt} &= h(t) \left(1 - \frac{1}{2} \langle \tilde{\theta}^2 \rangle \right) \cos \langle \theta \rangle \end{aligned} \quad (1.18)$$

avec $A_{ai} = 1/2d$ si a et i sont des voisins dans l'espace à d dimensions et zéro autrement. Ce système est linéaire dans les fonctions de corrélation. Nous pouvons alors faire l'hypothèse d'invariance par translation spatiale et supposé que les fonctions de corrélations ne dépendent que de la distance entre les points. Dans ce cas, le système devient résoluble dans l'espace de Fourier (annexe B). Ainsi, lorsque $d \geq 3$, la solution obtenue est toujours longitudinale. Par ailleurs les simulations numériques de la dynamique de Langevin à taille finie (Fig. 1.6) confirment aussi ce comportement à basse température pour le XY lorsque $d = 3$. Les simulations confirment aussi l'existence d'une phase oblique lorsque $d = 3$. Ainsi, nous pouvons conclure que pour $d \geq 3$, le système se comporte qualitativement comme le champ moyen avec la présence des quatre phases. La situation est pour l'instant moins claire pour la dimension 2 puisque le développement précédent conduit à une divergence logarithmique en temps des fluctuations (annexe B). Ceci indique que le développement basse température n'est pas analytique dans ce cas (des corrections du type $T \ln T$ interviennent). Nous discutons ce cas plus loin suivant une approximation de Hartree permettant de circonvenir le problème de non-analyticité.

Heisenberg $n = 3$

Un résultat intéressant est celui du modèle Heisenberg pour lequel $n = 3$. En effet, le même développement peut se faire en considérant les fonctions de corrélation des deux angles θ_i et ϕ_i (annexe B) décrivant chaque spin. Nous voyons alors (annexe B encore) qu'à l'ordre T les termes éventuels de sélection s'annulent exactement. Puisque les basses températures sont les cas les plus favorables pour une sélection longitudinale, il est sans doute probable qu'il n'y ait pas de phase longitudinale pour toute dimension $d \geq 3$. Par ailleurs, toutes les simulations de dynamiques de Langevin que nous avons mené sur ce modèle donnent une phase transverse, confirmant donc bien ce scénario.

1.4.3 Approximation de Hartree

Nous venons de voir que la phase longitudinale du XY à deux dimensions semble être une phase instable puisque les fluctuations de l'angle moyen divergent lorsque $T \rightarrow 0$. En fait, nous allons voir que ceci est un artefact du développement basse température puisque les fluctuations ont une contribution non analytique lorsque $T \rightarrow 0$. Le résultat très important de cette partie est qu'il est donc possible à partir de la phase sans aimantation de Kosterlitz-Thouless d'induire une anisotropie conduisant à l'apparition d'une phase avec une aimantation spontanée.

Modèle XY

Pour discuter le modèle XY à deux dimensions, nous devons en fait faire attention aux développements en petits angles du hamiltonien correspondant :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - h \sum_i \sin \theta_i \quad (1.19)$$

En effet, dans le cas d'un champ fixe, même si les termes entre voisins $\theta_i - \theta_j$ restent petits, les déviations de θ_i par rapport à $\pi/2$, i.e. par rapport à la direction du champ, sont divergentes dans la limite thermodynamique. Un développement du terme de champ en petits angles (en ne retenant que les premiers termes) n'est donc pas valide. Une façon de traiter ces divergences est d'utiliser l'approximation de Hartree permettant de traiter les non-linéarités du hamiltonien [27, 26]. Suivant cette méthode, les termes x^{2p} de puissances paires d'un potentiel sont remplacés par :

$$x^{2p} \rightarrow C_p \langle x^2 \rangle^{p-1} x^2 \quad (1.20)$$

où $C_p = \frac{(2p)!}{2^p(p-1)!}$. Une façon élégante de comprendre cette approximation est de la voir comme la minimisation de l'énergie libre de Gibbs par une probabilité gaussienne étant donnée une énergie potentielle de la forme $E(x) \sim x^{2p}$ (voir annexe C).

Nous utilisons cette approximation pour le cas de processus dépendant du temps. Notons qu'elle n'est a priori valide que dans le cas où il n'y a pas de vortex (i.e. de défauts) et est donc légitime pour traiter la divergence des fluctuations dans la phase longitudinale puisque dans cette phase le système se comporte comme Ising. Ainsi, nous gardons l'équation d'évolution pour $\langle \theta(t) \rangle$:

$$\frac{d\langle \theta \rangle}{dt} = h(t) \left(1 - \frac{1}{2} \langle \tilde{\theta}^2 \rangle\right) \cos \langle \theta \rangle \quad (1.21)$$

Par contre, pour traiter les fluctuations $\langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle$, il faut développer $\sin \theta_i$ autour de $\langle \theta \rangle(t)$, supprimer les termes de puissances impaires (par symétrie ces termes disparaissent dans la phase longitudinale) et changer les termes de puissances paires en considérant la relation (1.20). Nous obtenons alors :

$$-h(t) \sin \theta_i = -h(t) \sin \langle \theta \rangle \left(1 - \frac{1}{2} e^{-\langle \tilde{\theta}^2 \rangle / 2} \tilde{\theta}^2\right) \quad (1.22)$$

et la première équation du système (2.9) de l'annexe B devient :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle = T \delta_{ab} - \sum_j A_{aj} \langle \tilde{\theta}_b (\tilde{\theta}_a - \tilde{\theta}_j) \rangle - 2h(t) \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle \sin \langle \theta \rangle \exp \left(-\frac{\langle \tilde{\theta}^2 \rangle}{2} \right) \quad (1.23)$$

Par conséquent nous retrouvons exactement les équations précédentes (à savoir (1.18)) sauf que le terme de champ intervenant dans les équations d'évolution des fluctuations est $-h(t) \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle \sin \langle \theta \rangle \exp \left(-\frac{\langle \tilde{\theta}^2 \rangle}{2} \right)$ à la place de $-h(t) \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle \sin \langle \theta \rangle$. Nous pouvons donc écrire formellement la relation vérifiée par $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ en reprenant la relation (2.19) de l'annexe B :

$$\langle \tilde{\theta}^2 \rangle = 2T \int dt' e^{-(K(t) - K(t')) - 2(t-t')} [I_0(t-t')]^2 \quad (1.24)$$

mais avec ici $\dot{K}(t) = 2h(t) \sin \langle \theta \rangle \exp \left(-\langle \tilde{\theta}^2 \rangle / 2 \right)$. $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ vérifie donc une relation d'auto-cohérence intégrale. Nous pouvons alors montrer (annexe C) qu'une solution de la forme suivante vérifie cette relation d'autocohérence :

$$\langle \tilde{\theta}^2 \rangle = (c_{(1)} T G(t) - c_{(2)} T \ln(T/T^*)) e^{-\xi(t)} \quad ; \quad \xi(t) = \frac{2h}{\omega} \sin(\omega t) \quad (1.25)$$

où $G(t)$ converge aux temps longs vers une fonction périodique. $c_{(1)}$ et $c_{(2)}$ sont des constantes indépendantes de la température et T^* est une énergie qui ne dépend pas non plus de T .

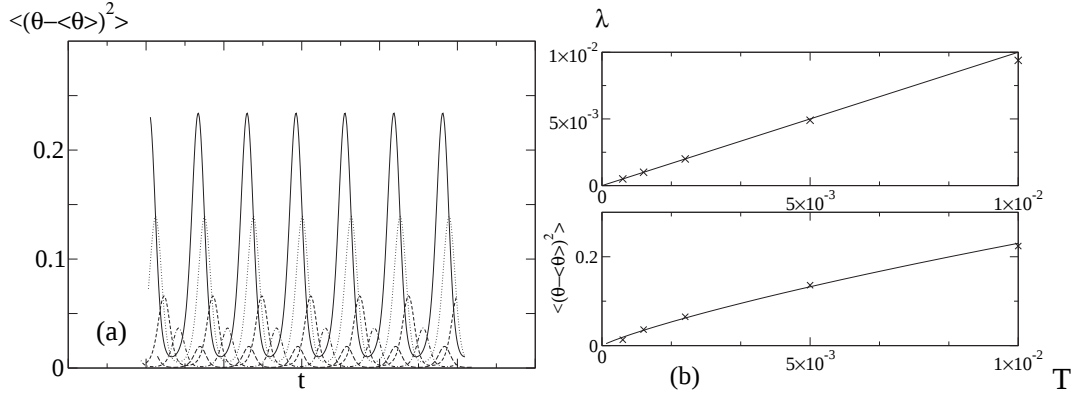


FIG. 1.7 – *Approximation de Hartree.* La figure (a) donne l'évolution des fluctuations $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ en fonction de la température à amplitude et fréquence fixées ($h = 1, \omega = 1$). Les solutions présentées sont obtenues dans le régime stationnaire. Le déphasage est arbitraire pour des raisons de lisibilité. Dans l'ordre des amplitudes décroissantes : $T = 0.01, 0.005, 0.002, 0.001, 0.0005$. Figure (b) : en haut, dépendance de λ (Eq.(2.43) de l'annexe C) en fonction de T pour les solutions de la figure (a). La droite donne $\lambda = T$, confirmant la méthode des calculs ; en bas, dépendance des fluctuations en fonction de T . La courbe est donnée par $f(T) = -5T \ln T$.

Numériquement, ce comportement à basse température est très bien vérifié. Fig. (1.7(a)) et (1.7(b)) montrent l'évolution de l'amplitude de $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ et de la valeur de λ (équation (2.43) de l'annexe C) en fonction de la température T . Nous retrouvons bien le comportement à la fois de $T \ln T$ pour l'amplitude et de T pour λ , confirmant l'approche utilisée dans l'annexe pour déterminer la solution.

Cette relation montre effectivement que les fluctuations de la phase longitudinale ne sont pas analytiques lorsque $T \rightarrow 0$ étant donnée la présence du terme en $\ln T$. Ces fluctuations sont donc tout de même finies, montrant ainsi l'existence de cette phase. Les simulations numériques à taille finie confirment l'existence d'une phase longitudinale. Cependant, ce résultat numérique est à prendre avec des pincettes puisque nous savons que l'aimantation pour XY, $d = 2$, décroît comme une loi de puissance de N ; par conséquent, il est difficile de discriminer la contribution de l'effet de taille finie de celui de l'anisotropie créée par le champ a.c.. Par contre, numériquement il est intéressant de constater (du moins exhaustivement) l'absence de phase transverse ou oblique pour toute fréquence, toute amplitude de champ et toute température non nulle. En conclusion, nous pensons que ce système passe continûment d'une phase longitudinale à une phase paramagnétique.

Pour conclure ce paragraphe, rappelons que l'approximation de Hartree que nous avons utilisée est une approximation qui permet de retenir tous les termes de puissances paires du développement de l'énergie de champ et donc de circonvenir le problème de non-analyticité. Puisque cette méthode permet de prendre en compte les termes de fluctuation d'ordre supérieur, il est intéressant de l'appliquer au cas Heisenberg pour voir si la phase transverse apparaît.

Modèle Heisenberg

Pour boucler la boucle, nous allons donc appliquer la méthode de Hartree au cas Heisenberg pour savoir quel comportement nous obtenons. Cette approximation est bien justifiée dans ce cas aussi car les défauts (ou vortex) ne jouent pas de rôle pertinent dans les phases obtenues. L'approximation consiste alors à remplacer le terme de champ $-h(t) \cos \theta_i$ par :

$$-h(t) \cos \langle \theta \rangle (t) \left(1 - \frac{1}{2} \exp \left(-\langle \tilde{\theta}^2 \rangle / 2 \right) \right) \quad (1.26)$$

les équations pour $\langle \theta \rangle (t)$ et pour $\langle \phi^2 \rangle (t)$ restant identiques dans notre approximation. Ainsi, nous pouvons montrer (par manipulation des équations comme dans l'annexe B) que nous avons les équations suivantes aux ordres les plus bas en T :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \theta \rangle}{dt} &= T \cot \langle \theta \rangle + \cos \langle \theta \rangle \sin \langle \theta \rangle \left(\frac{1}{2} \frac{d\langle \phi^2 \rangle}{2dt} - \frac{T}{\sin^2 \langle \theta \rangle} \right) - h(t) \sin \langle \theta \rangle \left(1 - \frac{1}{2} \langle \tilde{\theta}^2 \rangle \right) \\ \langle \tilde{\theta}^2 \rangle &= 2T \int_0^t dt' e^{-(K(t)-K(t'))-2(t-t')} [I_0(\frac{2}{d}(t-t'))]^d \end{aligned} \quad (1.27)$$

$$\langle \tilde{\phi}^2 \rangle = 2T \int_0^t dt' e^{-2(t-t')} [I_0(\frac{2}{d}(t-t'))]^d \sin^{-2} \langle \theta \rangle \quad (1.28)$$

$$\dot{K}(t) = 2h(t) \cos \langle \theta \rangle (t) \exp \left(-\frac{\langle \tilde{\theta}^2 \rangle}{2} \right) \quad (1.29)$$

La résolution numérique de ce système d'équations donne une nouvelle fois une absence de sélection. Il semble donc que pour espérer montrer une sélection transverse aux premiers ordres, il faille prendre en compte les termes supérieurs dans l'équation d'évolution de $\langle \theta \rangle$.

1.5 Ingénierie des transitions de phases

Dans cette partie, nous discutons la possibilité d'utiliser des champs a.c. pour modeler les symétries de n'importe quel système ayant une symétrie continue. La discussion s'articule autour d'un développement haute fréquence permettant entre autres de comprendre l'effet de l'application de plusieurs champs.

1.5.1 Développement à hautes fréquences

Une méthode d'approximation prometteuse et instructive que nous n'avons pas signalée dans le chapitre précédent est le développement à hautes fréquences. Dans cette limite, le champ haute fréquence peut-être traité perturbativement. Supposons qu'à $t = 0$, le système se trouve à l'équilibre. De façon générale, l'application d'un champ infinitésimal $h(t) = (h_1, \dots, h_n)(t)$ où h_i est la composante i du champ dans l'espace à n dimensions de composantes de spins, induit une variation d'aimantation $\Delta^M(t) = \Delta_1^M, \dots, \Delta_n^M(t)$ dont l'expression jusqu'au deuxième ordre en $\|\vec{h}\|$ est donnée par :

$$\Delta_i^M(t) = \sum_{j=1}^n \int_0^t dt' R_{ij}^{(1)}(t, t') h_j(t') + \sum_{j,k=1}^n \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' R_{ijk}^{(2)}(t, t', t'') h_j(t') h_k(t'') \quad (1.30)$$

$R_{ij}^{(1)}(t, t')$ et $R_{ijk}^{(2)}(t, t', t'')$ sont respectivement les susceptibilités linéaire et non linéaire :

$$R_{ij}^{(1)}(t, t') = \frac{\delta M_i(t)}{\delta h_j(t')} \quad ; \quad R_{ijk}^{(2)}(t, t', t'') = \frac{\delta M_i(t)}{\delta h_j(t') \delta h_k(t'')} \quad (1.31)$$

Dans le cas de l'application d'un seul champ $h(t) = \cos(\omega t)$ suivant la direction $i = 1$, le développement haute fréquence (voir annexe D) de (1.30) donne des termes (repérés par un astérisque) de moyenne non nulle sur une période dont l'expression est :

$$\Delta_i^{*M}(t) = \frac{h^2}{\omega^2} \int_0^t dt' v_{i,1,1}^{(2)}(t, t', t'') \quad (1.32)$$

où :

$$v_{i,j,k}^{(2)}(t, t', t'') \equiv \lim_{\substack{t-t' \rightarrow \infty \\ t'' \rightarrow t'}} \frac{\partial R_{ijk}^{(2)}(t, t', t'')}{\partial t'} \quad (1.33)$$

Il est alors important de retenir que les termes de susceptibilité linéaire ne contribue pas au phénomène de sélection, conduisant ainsi à un premier ordre en $1/\omega^2$ (annexe D). Dans le cas champ moyen, nous pouvons déjà avoir un aperçu du potentiel effectif. En effet, le développement⁴ en $1/\omega^2$ et en T du modèle XY donne une sélection longitudinale correspondant à un potentiel effectif $\sim Th^2\omega^{-2} \sin(2\Omega)$ où Ω est l'angle d'une solution de l'aimantation à température nulle et à fréquence infinie.

Ce développement à hautes fréquences a inspiré des travaux très intéressants [11] de Dutta. Ces derniers établissent d'une manière générale une description effective de systèmes périodiquement forcés en montrant que les fluctuations statistiques du système forcé sont gouvernées par un hamiltonien effectif comprenant le terme sans champ et un terme correspondant à une moyenne sur une période des fluctuations en présence de champ. Ces travaux montrent alors que suivant la forme des champs appliqués, plusieurs manipulations sur les transitions de phases sont possibles, à savoir : décaler la température d'un point critique, changer la nature de la transition (en passant par exemple d'une transition du second ordre à une transition du premier), induire de nouveaux points fixes dans les équations de flots du groupe de renormalisation conduisant ainsi à de nouvelles propriétés du système à longues distances. Cependant, les résultats obtenus par Dutta semblent incompatibles avec les nôtres puisqu'aucune phase longitudinale ne peut être sélectionnée dans sa théorie effective.

1.5.2 Application de plusieurs champs

Nous avons vu que par application d'un champ, il était possible de convertir une symétrie $O(2)$ en une symétrie Z_2 puisqu'une phase longitudinale correspond à l'alignement des spins suivant la direction du champ. D'autre part, l'application d'un champ oscillant à un système de symétrie $O(3)$ induit une phase transverse caractérisée par une aimantation moyenne sur une période dirigée dans le plan équatorial perpendiculaire au champ. Ainsi, $O(3)$ est devenu $O(2)$. L'étude 'hautes fréquences' montre alors (annexe D) que par application d'un autre champ perpendiculaire au premier avec une fréquence double ou plus (pour obtenir des interférences de moyenne nulle sur une période), nous pourrions nous attendre à une nouvelle sélection et donc induire une phase longitudinale dans un modèle Heisenberg. Numériquement, Fig. (1.8) montre que l'application de deux champs orthogonaux avec des fréquences ω et 3ω induit effectivement une phase longitudinale pour Heisenberg en champ moyen. Nous voyons aussi sur cette même figure qu'un champ tournant dans le plan xy à fréquence suffisamment élevée permet d'aligner l'aimantation suivant z . Ainsi, il est possible de transformer un modèle Heisenberg en un modèle ayant une symétrie Ising.

⁴Le calcul correspondant est le développement de la deuxième équation de (1.18) en perturbation autour d'une solution particulière de température nulle. Nous ne montrons pas le calcul car celui-ci est en tout point identique au cas du potentiel mou (Annexe A) lors de la sélection transverse à température nulle.

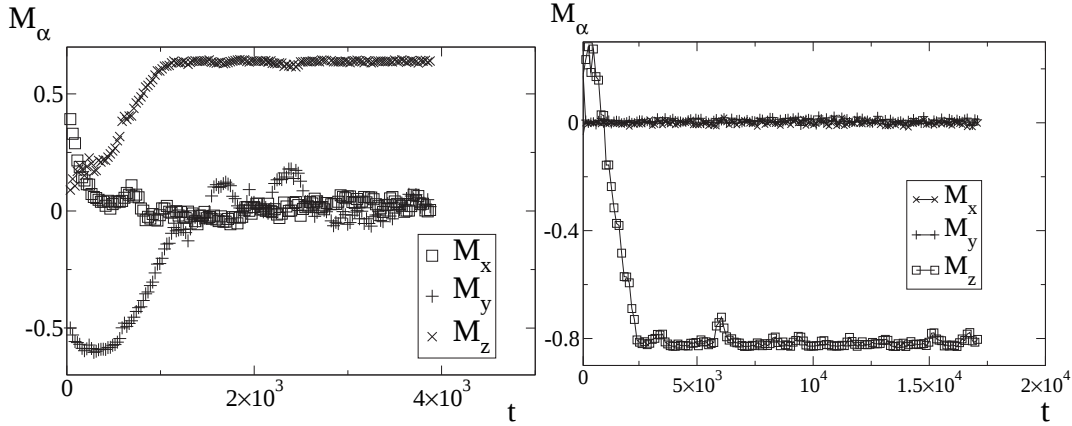


FIG. 1.8 – Modèle Heisenberg champ moyen. $N = 4000$. Simulation de la dynamique de Langevin. Pas de temps : $dt = 10^{-3}$. Les conditions initiales sont aléatoires. Figure de gauche : Application de deux champs orthogonaux suivant les directions y et z . L'amplitude du champ vaut $h = 1$ dans les deux cas. La fréquence suivant y vaut $\omega_y = 1$ et suivant z , $\omega_z = 3$. Les points représentent les valeurs de l'aimantation (suivant les trois directions) moyennées sur 25 périodes pour une seule réalisation. Il y a bien sélection longitudinale suivant z . A droite : Même courbe mais cette fois le champ appliqué est un champ circulaire dans le plan xy de fréquence $\omega = 3$ et d'amplitude $h = 1$. La valeur moyenne suivant z est plus grande dans ce cas puisque l'aimantation n'oscille pas suivant cette direction (ce qu'on voit très bien dans les simulations).

1.6 Conclusions et perspectives

Premièrement, résumons l'ensemble des résultats que nous trouvons : l'application d'un champ a.c. dans une direction induit seulement des phases transverses pour des modèles $O(n)$ avec $n \geq 3$. D'un autre côté, pour toute dimension spatiale $d \geq 3$, le modèle XY ($n = 2$) peut présenter quatre types de phases suivant les paramètres de contrôle h , ω et T . Ces phases sont caractérisées par une aimantation moyenne sur une période pouvant être nulle (phase paramagnétique), non nulle le long du champ (phase longitudinale), non nulle dans le plan perpendiculaire au champ (phase transverse), et non nulle suivant une direction inclinée par rapport au champ (phase oblique). Remarquablement, il est aussi possible d'induire une aimantation spontanée dans des modèles en dimension $d = 2$ (par exemple XY) ne pouvant pas admettre à l'équilibre une phase aimantée (théorème de Mermin-Wagner). Un autre résultat important est que l'application de plusieurs champs orthogonaux avec des fréquences bien choisies permet d'induire ces mêmes phases dans n'importe quel modèle de symétrie $O(n)$.

L'utilisation de champs périodiques semble donc être une méthode particulièrement efficace pour contrôler les symétries de problèmes à N corps en interaction. Par ailleurs, le développement à hautes fréquences semble aussi être une méthode prometteuse pour dériver une théorie effective des champs [11] en moyennant les fluctuations dynamiques périodiques sur une période. Cependant, dans le cas spécifique du modèle XY, un développement au premier ordre non nul en $1/\omega^2$ ne devrait donner que les phases longitudinales et transverses puisque la solution oblique disparaît à haute fréquence. Il faudrait donc développer à un ordre supérieur pour espérer voir la solution oblique. Sans aller jusque là, il est déjà intéressant de confronter nos résultats exacts (champ moyen) avec la théorie effective pro-

posée par Dutta [11]. A première vue, malheureusement, il semble qu'il y ait incompatibilité. En effet, les résultats de Dutta laissent penser que seule une phase transverse peut être obtenue dans un modèle à symétrie continue. Deux raisons peuvent être à l'origine de cette incompatibilité. Primo, le cadre de validité des travaux de Dutta est peut-être restreint à des valeurs de contrôle correspondant aux phases transverses que nous obtenons. Secondo, la théorie des champs peut induire d'emblée une phase transverse à température nulle puisque cette théorie dans sa forme la plus classique permet des fluctuations de la norme des spins et nous avons vu qu'à température nulle la sélection était déjà transverse pour des spins mous, quelque soit la dureté du potentiel. Si cette raison était la bonne, ceci montrerait que l'étude de ces problèmes est très subtile, donc très intéressante ! Une méthode qu'il serait alors bon de développer serait le développement haute fréquence que nous proposons.

Nous avons aussi vu que la méthode de Hartree permettait d'obtenir une phase longitudinale bien définie dans le cas XY, $d = 2$. Comme cette méthode permet par resommation de prendre en compte les termes de puissances paires supérieures à θ_i^2 , il serait intéressant d'approfondir cette approximation en modifiant l'équation d'évolution de $\langle \theta \rangle(t)$ (1.18). En effet, l'obtention de cette équation fait intervenir des termes d'ordre impair dans le développement de $-h(t) \sin \theta_i$. Il faudrait alors adapter une méthode pour resommer ces termes de façon à obtenir une évolution de $\langle \theta \rangle(t)$ faisant intervenir des termes d'ordre supérieur, permettant ainsi d'espérer d'obtenir les phases obliques du modèle XY, ainsi que la phase transverse du modèle de Heisenberg.

En termes d'application, le caractère général de notre approche laisse penser que plusieurs domaines peuvent être concernés. Par exemple, changer le groupe de symétrie d'un système conduit à une modification de la topologie des défauts. Ainsi, un champ alterné peut sans doute devenir un outil pour étudier en détail le rôle de ces derniers dans les transitions [23], dans la cinétique de l'apparition des phases, mais aussi dans l'effet Hall anormal puisque ce phénomène implique l'interaction des électrons avec les défauts topologiques [23]. Dans le même esprit, le *scénario de chiralité* [18] des verres de spins suivant lequel ces derniers sont supposés être essentiellement isotropes pourrait être mis à l'épreuve en observant l'effet d'une anisotropie plus ou moins grande générée par l'application de ces champs alternés. Appliquer des champs a.c. à des cristaux liquides ordonnés pourrait être aussi une façon d'observer directement ce que deviennent l'ordre et les textures. D'ailleurs cette stratégie a déjà quelques précédents intéressants [25]. D'un point de vue plus général, les systèmes à symétrie continue couvrent un très grand nombre de domaines. Ainsi, une compréhension globale de l'ordre induit par les champs a.c. reste nécessaire.

Chapitre 2

Annexes

2.1 Annexe A : Potentiel Mou

Dans cette partie nous montrons qu'à température nulle dans le cas du modèle XY, le potentiel mou induit d'emblée la sélection d'une solution perpendiculaire au champ, c'est-à-dire que l'aimantation pointe en moyenne dans le plan équatorial si le champ est dirigé suivant y . L'équation d'évolution du système est donnée par $M(t)$ et $\theta(t)$ de (1.9) (en respectant le schéma (1.2)) :

$$\begin{aligned}\dot{M} &= M + h \cos(\omega t) \sin \theta - AM(M^2 - 1) \\ M\dot{\theta} &= h \cos(\omega t) \cos \theta\end{aligned}$$

Pour commencer, nous injectons une solution du type $M(t) = 1 + m(t)$ dans la première équation du système. Nous obtenons alors $\dot{m} + 2Am = 1 + h \cos(\omega t) \sin \theta$. Ainsi, dans le cas des potentiels très durs $A \gg \omega$, au premier ordre nous obtenons :

$$m(t) = \frac{1}{2A}(1 + h \cos(\omega t) \sin \theta) \quad (2.1)$$

En remplaçant cette solution dans la deuxième équation du système, nous obtenons :

$$\dot{\theta} = \frac{h \cos(\omega t) \cos \theta}{M_0 + h(t) \sin \theta / 2A} \quad (2.2)$$

où nous avons posé $M_0 = 1 + 1/2A$. En écrivant θ comme la somme d'une solution $\theta_0(t)$ du cas dur plus une petite perturbation $\alpha(t)$, nous obtenons au premier ordre en $1/A$ une équation pour $\alpha(t)$ du type :

$$\dot{\alpha} + h(t) \sin \theta_0 \alpha = -\frac{1}{2A} (h(t) \cos \theta_0 + h^2(t) \sin \theta_0 \cos \theta_0) \quad (2.3)$$

La solution de cette équation est de la forme :

$$\alpha(t) = \int_0^t dt' e^{-(I(t)-I(t'))} F(t') \quad (2.4)$$

avec $dI/dt = h(t) \sin \theta_0$ et $F(t) = -\frac{1}{2A} (h(t) \cos \theta_0 + h^2(t) \sin \theta_0 \cos \theta_0)$. Nous avons pris comme condition initiale $\alpha = 0$ à $t = 0$. Dans le cas du spin dur à température nulle, nous pouvons montrer que si le champ appliqué est suivant y , alors $\dot{M}_x^0 = -h(t)M_y^0M_x^0$ où M_x^0 et

M_y^0 sont respectivement les aimantations suivant les directions x et y . Comme $M_x^0 = \cos \theta_0$ et $M_y^0 = \sin \theta_0$, nous obtenons la relation :

$$I(t) = -\ln(|\cos \theta_0(t)|) \quad (2.5)$$

Ainsi :

$$\alpha(t) = \frac{\cos \theta_0}{2A} \int_0^t dt' (-h(t) - h^2(t) \sin \theta_0) \quad (2.6)$$

Le premier terme de l'intégrale donne une contribution de moyenne nulle sur une période, ne conduisant donc à aucune sélection de solution particulière. A l'opposé, le second terme donne une contribution non nulle. Au premier ordre à haute fréquence, θ_0 est indépendant du temps et vaut par exemple Ω . Dans cette limite, à chaque période nous voyons que α gagne une quantité Q_α :

$$Q_\alpha = -\frac{\pi h^2}{2A\omega} \sin \Omega \cos \Omega \quad (2.7)$$

Cette quantité est négative dans le premier et troisième quadrant et positive dans le second et le quatrième. Ainsi, la solution se dirige vers une solution dans le plan équatorial perpendiculaire au champ $\vec{h}$.

2.2 Annexe B : Développement basse température

L'objectif de cette annexe comme le titre l'indique est d'établir les équations d'évolution de l'angle moyen des spins à basse température pour les systèmes XY et Heisenberg pour toute dimension $d \geq 3$.

2.2.1 Modèle XY

Nous commençons par introduire l'opérateur de Fokker-Planck et son équation associée :

$$\begin{aligned} \dot{P}(\{\theta_i\}, t) &= H_{\text{FP}} P(\{\theta_i\}, t) \\ &= \left(\sum_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(T \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \sum_j A_{ij} \sin(\theta_i - \theta_j) - h(t) \cos \theta_i \right) \right) P(\{\theta_i\}, t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

En écrivant $\theta_i(t) = \langle \theta_i \rangle(t) + \tilde{\theta}_i(t)$, par multiplication successive de (2.8) par θ_a et par $\theta_a \theta_b$, puis par intégration périodique sur un segment dont les extrémités sont des angles perpendiculaires à $\langle \theta_i \rangle(t)$, nous obtenons en négligeant la probabilité pour que le système se trouve à ces angles (conditions de bord nulles) :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \theta_a \rangle}{dt} &= h(t) \cos \langle \theta_a \rangle (1 - \frac{1}{2} \langle \tilde{\theta}_a^2 \rangle) \\ \frac{d}{dt} \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle &= 2T\delta_{ab} - \sum_j (A_{aj} \langle \tilde{\theta}_b (\tilde{\theta}_a - \tilde{\theta}_j) \rangle + A_{bj} \langle \tilde{\theta}_a (\tilde{\theta}_b - \tilde{\theta}_j) \rangle) - 2h(t) \sin \langle \theta_a \rangle \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

avec $A_{ab} = 1/2d$ si a, b sont voisins, et zéro sinon. Nous avons alors :

$$\frac{d}{dt} \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle = 2T\delta_{ab} - 2\langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle + \frac{1}{d} \sum_{e_i} (\langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_{b+e_i} \rangle + \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_{b-e_i} \rangle) - 2h(t) \sin \langle \theta \rangle \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle \quad (2.10)$$

où $\{e_i\}_{i \leq d}$ est une base orthonormale de l'espace euclidien. Ces équations se réduisent au cas champ moyen lorsque nous supposons que seules les corrélations de même site sont non nulles :

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\theta\rangle}{dt} &= h(t) \cos\langle\theta\rangle \left(1 - \frac{1}{2}\langle\tilde{\theta}^2\rangle\right) \\ \frac{d\langle\tilde{\theta}^2\rangle}{dt} &= 2T - 2[1 + h \sin\langle\theta\rangle]\langle\tilde{\theta}^2\rangle\end{aligned}\quad (2.11)$$

En général, par hypothèses d'invariance par translation dans l'espace des valeurs calculées, nous pouvons exprimer le tout en terme des fonctions de corrélation spatiale :

$$C(\vec{u}) = \langle \tilde{\theta}(\vec{x}_a) \tilde{\theta}(\vec{x}_a + \vec{u}) \rangle \quad (2.12)$$

Nous obtenons alors :

$$\dot{C}(\vec{u}) = 2T\delta(\vec{u}) - 2C(\vec{u}) + \frac{1}{d} \sum_{\vec{e}_i} (C(\vec{u} + \vec{e}_i) + C(\vec{u} - \vec{e}_i)) - 2h(t) \sin\langle\theta\rangle C(\vec{u}) \quad (2.13)$$

Nous introduisons alors la transformée de Fourier définie par :

$$C(\vec{u}) = \frac{a^d}{2^d V} \sum_{|\vec{k}_\alpha| < \frac{2\pi}{a}} \tilde{C}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} \quad ; \quad C(\vec{k}) = \sum_{|\vec{u}_\gamma| < L} C(\vec{u}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} \quad (2.14)$$

où $\vec{u}$ vit sur un réseau de pas a , et $\vec{k}$ dans le réseau dual de pas $\frac{2\pi}{L}$ ($L = Na$). En utilisant la relation $C(\vec{u} \pm \vec{e}_j) = e^{\pm i k_j a} C(\vec{u})$ nous obtenons dans l'espace réciproque :

$$\dot{\tilde{C}}(\vec{k}) = 2T - 2\tilde{C}(\vec{k}) + \frac{2}{d} \sum_{\alpha} \cos(k_\alpha a) \tilde{C}(\vec{k}) - 2h(t) \sin\langle\theta\rangle \tilde{C}(\vec{k}) \quad (2.15)$$

dont la solution est :

$$\tilde{C}(\vec{k}) = 2T \int_0^t dt' e^{-(K(t) - K(t')) - 2(t-t') + \frac{2}{d} \sum_{\alpha} \cos(k_\alpha a)(t-t')} \quad (2.16)$$

où nous prenons comme condition initiale $\tilde{C}(\vec{k}) = 0$ à $t = 0$ par souci de légèreté. Cette condition initiale sera toujours implicitement prise dans la suite des calculs sauf mention spéciale. $\dot{K}(t) = 2h(t) \sin\langle\theta\rangle$. Alors, en utilisant $\langle\tilde{\theta}^2\rangle = \frac{a^d}{2^d V} \sum_{\vec{k}} C(\vec{k})$ nous trouvons :

$$\langle\tilde{\theta}^2\rangle = 2T \int_0^t dt' e^{-(K(t) - K(t')) - 2(t-t')} \left(\sum_{\vec{k}_n = \frac{2\pi n}{L}} e^{\frac{2}{d} \cos(k_n a)(t-t')} \right)^d \quad (2.17)$$

A ce stade, il est utile de passer à la limite continue avec un cut-off $\Lambda = \frac{2\pi}{a}$:

$$\langle\tilde{\theta}^2\rangle = \frac{2T a^d}{4^d \pi^d} \int_0^t dt' e^{-(K(t) - K(t')) - 2(t-t')} \left(\int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk e^{\frac{2}{d} \cos(ka)(t-t')} \right)^d \quad (2.18)$$

ce qui donne :

$$\langle\tilde{\theta}^2\rangle = 2T \int_0^t dt' e^{-(K(t) - K(t')) - 2(t-t')} [I_0(\frac{2}{d}(t-t'))]^d \quad (2.19)$$

où I_0 est la fonction de Bessel modifiée.

Remarques :

- Dans cette forme, il est facile de voir que lorsque $d \rightarrow \infty$ nous obtenons la solution champ moyen :

$$\langle \tilde{\theta}^2 \rangle = 2T \int_0^t dt' e^{-(K(t)-K(t'))-2(t-t')}$$

En effet, écrivons :

$$[I_0(\frac{2}{d}(t-t'))]^d = e^{d \log(I_0(\frac{2}{d}(t-t')))}$$

Pour des petits z , $I_0(z) = 1 + \frac{z^2}{4}$. Ainsi, dans la limite de d grand,

$$[I_0(\frac{2}{d}(t-t'))]^d \propto e^{\frac{(t-t')^2}{d}}$$

de limite 1 lorsque $d \rightarrow \infty$.

- C'est aussi une jolie manière de vérifier l'absence de transition vers un ordre sans champ extérieur ($K(t) = 0$) lorsque $d \leq 2$ (théorème de Mermin-Wagner). En effet, pour des grands z , $I_0(z) \propto \frac{e^z}{\sqrt{z}}$ de telle façon que pour des grands $(t-t')$:

$$[I_0(\frac{2}{d}(t-t'))]^d \propto \frac{e^{2(t-t')}}{(t-t')^{d/2}}$$

et nous voyons alors que les termes exponentiels s'annulent exactement. L'intégrale est dominée par le terme $1/(t-t')^{d/2}$ qui converge seulement lorsque $d > 2$. Quand $d = 2$, nous obtenons une divergence logarithmique des fluctuations.

En général nous devons résoudre :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \theta \rangle}{dt} &= h(t) \cos\langle \theta \rangle (1 - \frac{1}{2} \langle \tilde{\theta}^2 \rangle) \\ \langle \tilde{\theta}^2 \rangle &= 2T \int_0^t dt' e^{-(K(t)-K(t'))-2(t-t')} [I_0(\frac{2}{d}(t-t'))]^d \\ \dot{K}(t) &= 2h(t) \sin\langle \theta \rangle \end{aligned} \tag{2.20}$$

Ce système dynamique de trois variables peut être résolu numériquement : pour des petites températures, il conduit toujours à une solution longitudinale pour laquelle $\langle \theta \rangle_\infty = \frac{\pi}{2}$. Dans le cas spécifique $d = 2$, les fluctuations $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ ont un mouvement oscillant dont l'amplitude est modulée par un terme logarithmiquement divergent lorsque $t \rightarrow \infty$. Pour résoudre ce problème, une resommation des termes supérieures est nécessaire (voir annexe C).

2.2.2 Modèle Heisenberg

Le même développement peut être effectué pour le modèle Heisenberg ($n = 3$) pour toute dimension. Dans ce cas, l'équation de Fokker Planck s'écrit :

$$\dot{P} = T \Delta P + \Delta V P + \vec{\nabla} V \vec{\nabla} P \tag{2.21}$$

où V est le potentiel d'interaction de spins de Heisenberg :

$$V = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{h} \sum_i \vec{S}_i \tag{2.22}$$

$\vec{S}_i$ peut se décomposer dans les coordonnées sphériques (r_i, θ_i, ϕ_i) :

$$\vec{S}_i = \cos \theta_i \vec{u}_z + \sin \theta_i \cos \phi_i \vec{u}_x + \sin \theta_i \sin \phi_i \vec{u}_y \quad (2.23)$$

Alors :

$$V = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\cos \theta_i \cos \theta_j + \sin \theta_i \sin \theta_j \cos(\phi_i - \phi_j)) - h(t) \sum_i \cos \theta_i \quad (2.24)$$

En imposant la norme 1 pour les vecteurs, les opérateurs Δ et $\vec{\nabla}$ sont donnés par :

$$\begin{aligned} \Delta &= \sum_i \left(\frac{1}{\sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \frac{1}{\sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \phi_i^2} \right) \\ \vec{\nabla} &= \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial \theta_i} \vec{u}_{\theta_i} + \frac{1}{\sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \phi_i} \vec{u}_{\phi_i} \right) \end{aligned} \quad (2.25)$$

En procédant à la même décomposition que dans le cas XY, nous trouvons :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \theta_a \rangle}{dt} &= T \cot \langle \theta_a \rangle - 2dJ \sin 2\langle \theta_a \rangle \langle \phi_a^2 \rangle + \sin 2\langle \theta_a \rangle \sum_j J_{aj} \langle \phi_a \phi_j \rangle - h(t) \sin \langle \theta_a \rangle \left(1 - \frac{1}{2} \langle \tilde{\theta}_a^2 \rangle \right) \\ \frac{d}{dt} \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle &= 2T \delta_{ab} - 8dJ \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle + 4 \sum_k J_{ak} \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_k \rangle - 2h \cos \langle \theta_a \rangle \langle \tilde{\theta}_a \tilde{\theta}_b \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \phi_a \phi_b \rangle &= \frac{2T \delta_{ab}}{\sin^2 \langle \theta_a \rangle} - 8dJ \langle \phi_a \phi_b \rangle + 4 \sum_k J_{ak} \langle \phi_a \phi_k \rangle \end{aligned} \quad (2.26)$$

Ici, $\langle \phi_a \rangle$ est pris égal à zéro, bien que toute autre valeur d'angle fonctionnerait de la même façon.

A ce stade, nous pourrions continuer la méthode développée dans le XY. Cependant, une manière alternative nous permet de prédire qu'il n'existe pas de sélection à l'ordre T : écrivons la solution pour $\langle \theta_a \rangle$ comme $\langle \theta_a \rangle = \theta_0 + \alpha$ où α est d'ordre T et $\dot{\theta}_0 = -h(t) \sin \theta_0$ est la solution à température nulle. A l'ordre T , en injectant $J = \frac{1}{4d}$, nous trouvons :

$$\frac{d\alpha}{dt} = T \cot(\theta_0) - h(t) \cos \theta_0 \alpha - \frac{\sin 2\theta_0}{2} \langle \phi^2 \rangle + \sin 2\theta_0 \sum_j J_{aj} \langle \phi_a \phi_j \rangle + \frac{h(t) \sin \theta_0}{2} \langle \tilde{\theta}^2 \rangle \quad (2.27)$$

Les solutions intégrales de $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ et de $\langle \phi^2 \rangle$ donne la relation $\langle \tilde{\theta}^2(t) \rangle = \sin^2 \theta_0(t) \langle \phi^2(t) \rangle$, et à partir de (2.26) nous avons aussi :

$$2 \sum_k J_{ak} \langle \phi_a \phi_k \rangle = \frac{1}{2} \frac{d\langle \phi_a^2 \rangle}{dt} + \langle \phi_a^2 \rangle - \frac{T}{\sin^2 \langle \theta_a \rangle} \quad (2.28)$$

En injectant ces deux relations dans (2.27), nous trouvons :

$$\frac{d\alpha}{dt} + h(t) \cos \theta_0 \alpha = \frac{1}{2} \left(\sin \theta_0 \cos \theta_0 \frac{d\langle \phi^2 \rangle}{dt} + h(t) \sin^3 \theta_0 \langle \phi^2 \rangle \right) \quad (2.29)$$

Nous savons d'après les solutions à température nulle que $\int dt h(t) \cos \theta_0(t) = -\ln(|\sin \theta_0|)$. Ainsi, α vérifie :

$$\alpha = \frac{\sin \theta_0}{2} \int_0^t dt' \left(\cos \theta_0(t') \frac{d\langle \phi^2 \rangle}{dt'} + h(t') \sin^2 \theta_0(t') \langle \phi^2(t') \rangle \right) \quad (2.30)$$

De $T = 0$ nous savons aussi que $h(t) \sin^2 \theta_0 = \frac{d \cos \theta_0}{dt}$. Alors :

$$\alpha = \frac{\sin \theta_0}{2} \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} (\langle \phi^2 \rangle \cos \theta_0) = \langle \phi^2(t) \rangle \frac{\sin 2\theta_0}{4} \quad (2.31)$$

qui est périodique et donc ne diffuse pas vers une solution particulière pour $d \geq 3$.

2.3 Annexe C : Méthode de Hartree

Avant d'utiliser la méthode de Hartree pour des processus dépendant du temps, nous donnons une explication de l'approximation dans le cas statique pour un système simple (unidimensionnel).

2.3.1 Justification de l'approximation

Considérons un système unidimensionnel défini par une particule classique (définie par sa position x) soumise à une énergie potentielle $E(x) = x^{2p}$ où p est un entier naturel non nul et à un bain thermique de température T . L'approximation de Hartree peut être vue comme l'approximation de la distribution vraie de l'équilibre :

$$P(x) \sim e^{-\beta E(x)} \quad (2.32)$$

par une distribution gaussienne :

$$P_G(x) = \frac{A^{1/2}}{\sqrt{4\pi}} e^{-Ax^2} \quad (2.33)$$

où A est un facteur de Lagrange minimisant l'énergie libre de Gibbs définie par :

$$G[P] = \int_{-\infty}^{\infty} dx E(x) P(x) + T \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) \ln P(x) \quad (2.34)$$

Nous cherchons donc A tel que $\frac{\partial G}{\partial A} = 0$. En remplaçant $P_G(x)$ dans $G[P]$, nous obtenons :

$$G[P] = \langle x^{2p} \rangle_G + \frac{T}{2} \ln A - \frac{T}{2} \ln \pi - TA \langle x^2 \rangle_G \quad (2.35)$$

où les indices G indiquent que la moyenne est prise avec (2.33). En utilisant les relations de Wick $\langle x^{2p} \rangle_G = \frac{(2p)!}{2^p p!} \langle x^2 \rangle_G^p = \frac{(2p)!}{2^p p! A^p}$, la minimisation de G vis à vis de A donne la relation :

$$A = \frac{(2p)!}{2^{2p-1} (p-1)! A^{p-1} T} \quad (2.36)$$

En utilisant $A^{1-p} = 2^{p-1} \langle x^2 \rangle_G^{p-1}$ (par définition de A), nous obtenons :

$$A = \frac{1}{T} C_p \langle x^2 \rangle_G^{p-1} x^2 \quad (2.37)$$

où $C_p = \frac{(2p)!}{2^p (p-1)!}$. Ainsi, de manière effective, l'approximation revient à changer le potentiel $E(x) = x^{2p}$ en le potentiel

$$E(x) = C_p \langle x^2 \rangle_G^{p-1} x^2 \quad (2.38)$$

Nous allons appliquer cette approximation définie dans le cas *statique* à des processus dépendant du temps (XY, $d = 2$, sous champ a.c.). Notre approximation consiste alors à remplacer x dans (2.38) par $x(t)$. Nous obtenons alors l'équation (1.22) du premier chapitre (dans ce cas $x \equiv \tilde{\theta}$).

2.3.2 Fluctuations dans la phase longitudinale

Nous nous proposons de justifier la forme (1.25) des fluctuations du XY à 2d en utilisant l'approximation de Hartree que nous venons d'introduire. Nous supposons pour simplifier le problème que le système a atteint sa phase longitudinale ($\langle \theta \rangle = \pi/2$) et nous développons $\exp(-\langle \tilde{\theta}^2 \rangle / 2)$ (voir équation (1.22) du premier chapitre) en puissance de $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle / 2$. Ainsi, les fluctuations s'écrivent au premier ordre :

$$\langle \tilde{\theta}^2 \rangle = 2T \int_0^t dt' e^{-(K(t)-K(t'))-2(t-t')} [I_0(t-t')]^2 \quad (2.39)$$

avec $K(t) = h(t)(2 - \langle \tilde{\theta}^2 \rangle)$.

Nous supposons alors que $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ tend vers une valeur finie à toute température non nulle et que lorsque $T \rightarrow 0$, $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle \rightarrow 0$. A la fin du calcul, nous devrons donc vérifier l'autocohérence de ces hypothèses.

Décomposons donc $h(t)\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ en la somme d'une constante λ (représentant donc la valeur moyenne sur une période) et d'une fonction périodique de valeur moyenne nulle. L'amplitude de cette fonction est de l'ordre de $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle$ et donc est supposée tendre vers 0 lorsque $T \rightarrow 0$. Ainsi, aux ordres dominants, les fluctuations s'écrivent :

$$\langle \tilde{\theta}^2 \rangle = 2T \int_0^t dt' e^{-(\xi(t)-\xi(t'))-\lambda(t-t')-2(t-t')} [I_0(t-t')]^2 \quad (2.40)$$

où $\xi(t) = \frac{2h}{\omega} \sin(\omega t)$. Introduisons à ce stade $m = \overline{e^{\xi(t)}}$, la moyenne sur une période de la fonction $e^{\xi(t)}$. Nous pouvons réécrire les fluctuations comme :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\theta}^2 \rangle &= 2T m e^{-\xi(t)} \int_0^t dt' e^{-\lambda(t-t')-2(t-t')} [I_0(t-t')]^2 \\ &\quad + 2T e^{-\xi(t)} \int_0^t dt' \left(e^{\xi(t')} - m \right) e^{-\lambda(t-t')-2(t-t')} [I_0(t-t')]^2 \end{aligned} \quad (2.41)$$

Il est facile de se convaincre que le deuxième membre de droite converge lorsque $t \rightarrow \infty$ vers une fonction périodique, même lorsque $\lambda \rightarrow 0$. Cette partie de la solution ne pose donc pas de problème de convergence et nous pouvons même remplacer à l'ordre dominant sa valeur en prenant $\lambda = 0$, valeur que nous notons $G(t)$ (voir plus bas). Analysons maintenant le premier terme. L'intégrale peut se décomposer en trois intervalles de temps :

- $I_1 : t - t' \in [0, t_1]$ où t_1 est fini
- $I_2 : t - t' \in [t_1, \lambda^{-1}]$
- $I_3 : t - t' \in [\lambda^{-1}, 0]$

La contribution du premier intervalle est finie puisque l'intervalle l'est et les fonctions sont régulières sur celui-ci. Etant donné que nous travaillons dans la limite $\lambda \rightarrow 0$ (par autocohérence), nous pouvons prendre $[I_0(t-t')]^2 \approx \frac{e^{2(t-t')}}{2\pi(t-t')}$ sur I_2 . Cette approximation suggère alors que malgré le caractère fini de t_1 , ce temps doit être suffisamment grand pour que l'approximation de I_0 soit valide. Au final, la contribution de l'intégrale sur cet intervalle

est donné par l'intégrande $1/(t-t')$. Nous trouvons alors que cet intervalle contribue à hauteur de $-\ln(\lambda/t_1)$ (nous montrons plus bas que λ est bien positif. La contribution de I_3 est négligeable devant I_2 puisque sur cet intervalle, nous avons une décroissance exponentielle de l'intégrande. Ainsi, aux ordres dominants, la relation (2.41) devient :

$$\langle \tilde{\theta}^2 \rangle = -c_{(1)} T \ln(\lambda/t_1) e^{-\xi(t)} + 2T e^{-\xi(t)} G(t) \quad (2.42)$$

où $c_{(1)}$ est une constante positive et $G(t) = \int_0^t dt' \left(e^{\xi(t')} - m \right) e^{-2(t-t')} [I_0(t-t')]^2$. Pour conclure nous devons satisfaire la relation d'autocohérence :

$$\oint dt h(t) \langle \tilde{\theta}^2 \rangle(t) = \lambda \quad (2.43)$$

Le premier membre de $\langle \tilde{\theta}^2 \rangle(t)$ dans l'équation (2.42) donne une contribution nulle alors que le second donne une contribution positive finie (vérifiée à l'aide de Mathematica) proportionnelle à T , i.e. $\lambda \sim T$ justifiant ainsi *a posteriori* les approximations faites lors du calcul. Par conséquent, de manière générale, les fluctuations s'écrivent :

$$\langle \tilde{\theta}^2 \rangle = (c_{(1)} T G(t) - c_{(2)} T \ln(T/T^*)) e^{-\xi(t)} \quad (2.44)$$

où T^* est une énergie non nulle indépendante de T .

2.4 Annexe D : Développement Hautes Fréquences

Nous donnons dans ce paragraphe des éléments de calcul correspondant à un développement haute fréquence. Cette méthode n'est pas complète. Elle permet juste d'entrevoir des comportements susceptibles de se produire à haute fréquence. Les raisons de l'inachèvement des calculs développés ici sont plutôt techniques et ne nécessitent pas véritablement de discussion. Notre objectif est essentiellement de donner quelques pistes de travail pour des études futures.

2.4.1 Application d'un seul champ

Pour commencer, nous traitons le cas de l'application d'un seul champ suivant une direction des composantes de spins.

A haute fréquence, le champ oscille très rapidement. En première approximation, nous pouvons alors supposer que le champ a un effet très faible par rapport aux fluctuations thermiques du système. Nous pouvons donc le traiter de manière perturbative. Considérons alors un système de symétrie $O(n)$ dont les composantes d'aimantation sont données par $M_1, \dots, M_n$. La variation d'aimantation $\Delta^M(t) = \Delta_1^M, \dots, \Delta_n^M(t)$ induite au temps t après l'application d'un champ infinitésimal $h(t')$ à partir de $t = 0$ suivant la direction i est donnée par les susceptibilités linéaires $R_{ji}^{(1)}(t, t')$ et non linéaires $R_{ijk}^{(2)}(t, t', t'')$ suivant :

$$\Delta_j^M(t) = \int_0^t dt' R_{ji}^{(1)}(t, t') h(t') + \int_0^t dt' dt'' R_{jii}^{(2)}(t, t', t'') h(t') h(t'') + \dots \quad (2.45)$$

Les susceptibilités linéaires et non linéaires dépendent en fait seulement de la différence des temps pris deux à deux, i.e. $R_{ji}^{(1)}(t, t') = R_{ji}^{(1)}(t - t')$ et $R_{jii}^{(2)}(t, t', t'') = R_{jii}^{(2)}(t - t', t' - t'')$. Evaluons maintenant la contribution de chaque intégrale.

Traisons en premier lieu le cas du terme de susceptibilité linéaire. Les modèles de symétrie $O(n)$ ont la particularité de posséder des modes mous, c'est à dire des directions dans l'espace

des phases suivant lesquelles aucun travail n'est nécessaire pour faire évoluer le système. Ceci se caractérise directement dans la susceptibilité instantanée $R_{ij}^{(1)}(t - t')$ par un terme constant. En notant $u = t - t'$, nous pouvons donc décomposer cette fonction de u en la somme d'une constante λ (nous abandonnons pour l'instant les indices) et d'une fonction décroissante que nous notons $f(u)$. Ainsi, la contribution linéaire à l'aimantation est donnée par :

$$\int_0^t dt' \lambda h(t') + \int_0^t dt' f(t - t') h(t') \quad (2.46)$$

Dans le cas d'un champ oscillant $h(t) = h \cos(\omega t)$, la première intégrale donne une contribution de moyenne nulle sur une période, ne contribuant ainsi pas à un processus de sélection. Remarquons alors que la situation serait tout à fait différente si le champ était constant puisque cette intégrale divergerait dans la limite des temps infinis lorsque $\lambda \neq 0$. Par ailleurs, pour toute fonction monotone f tendant vers 0, l'intégrale $\int_0^t dx f(x) \cos(\omega x)$ converge lorsque t tend vers l'infini. Ainsi, la deuxième intégrale a au plus une contribution oscillante d'amplitude finie à la variation d'aimantation et ne conduit donc pas elle non plus à une sélection. Par conséquent, le terme de susceptibilité linéaire ne contribue pas à une sélection particulière de solution.

Analysons maintenant en détails la deuxième intégrale car nous verrons que nous aurons le même genre de terme à considérer dans la susceptibilité non linéaire. Une astuce pour traiter ce terme à haute fréquence est d'écrire $f(t - t')$ comme $\exp(\ln(f(t - t')))$ (f est positive) et de développer $\ln(f(t - t'))$ en puissance de $t - t'$. Nous avons le droit de faire ce développement seulement si $f(0) \neq 0$. Dans le cas contraire, f est nulle à tous les temps et la contribution de l'intégrale est nulle. Ainsi, nous avons :

$$f(t - t') = \exp\left(\sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{a_{\alpha}}{\alpha!} (t - t')^{\alpha}\right) \quad (2.47)$$

où :

$$a_0 = \ln(f(0)) \quad ; \quad a_{\alpha} = \frac{\partial \ln(f(u))}{\partial u} \Big|_{u=0} \quad (2.48)$$

Nous supposons donc aussi que toutes les dérivées $\frac{\partial \ln(f(u))}{\partial u}$ ont une limite finie lorsque $u \rightarrow 0$. Comme le champ est périodique, nous devons calculer la partie réelle de :

$$\int_0^t dt' \exp\left(-i\omega t' + \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{a_{\alpha}}{\alpha!} (t - t')^{\alpha}\right) \quad (2.49)$$

Dans la limite des grands temps, en faisant le changement de variable $u = t - t'$, cette expression vaut :

$$\exp(-i\omega t + a_0) \int_0^{\infty} du \exp(i\omega u + a_1 u + a_2 u^2/2 + \dots) \quad (2.50)$$

Nous pouvons réécrire cette intégrale en développant les termes $\exp(a_2 u^2/2 + \dots)$ en puissance de $a_2 u^2/2 + \dots$. Nous obtenons alors :

$$\exp(a_2 u^2/2 + a_3 u^3/3! \dots) = 1 + b_2 u^2 + b_3 u^3 + \dots \quad (2.51)$$

Nous avons le droit d'effectuer ce développement si chaque terme $\int_0^{\infty} du u^n \exp(i\omega u + a_1 u)$ (où $n \geq 2$) est fini. Il faut donc que a_1 soit négatif, ce qui est vrai puisque f est décroissante.

Nous pouvons alors montrer que ces termes $\int_0^\infty du u^n \exp(i\omega u + a_1 u)$ varient suivant ω^{-n-1} . Ainsi, aux termes dominants en $1/\omega$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \exp(-i\omega t + a_0) \int_0^\infty du \exp(i\omega u + a_1 u + a_2 u^2/2 + \dots) &= \exp(-i\omega t + a_0) \int_0^\infty du \exp(i\omega u + a_1 u) \\ &= \frac{\exp(-i\omega t + a_0)}{i\omega + a_1} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Dans la limite haute fréquence, en prenant la partie réelle de ce dernier terme, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_0^t dt' f(t-t') h(t') &= h \left(\frac{1}{\omega} \sin(\omega t) + \frac{a_1}{\omega^2} \cos(\omega t) \right) e^{a_0} \\ &= \frac{hf(0)}{\omega} \sin(\omega t) + \frac{hf'(0)}{\omega^2} \cos(\omega t) \end{aligned} \quad (2.53)$$

Nous allons voir que ce résultat permet d'expliquer que le terme de susceptibilité non linéaire sélectionne une solution particulière.

En effet, le développement à haute fréquence que nous venons de voir peut s'appliquer au terme $\int_0^{t'} dt'' R_{jii}^{(2)}(t-t', t'-t'') h(t'')$, la contribution non linéaire valant :

$$2 \int_0^t dt' h(t') \int_0^{t'} dt'' R_{jii}^{(2)}(t-t', t'-t'') h(t'') \quad (2.54)$$

Nous trouvons alors par analogie, aux termes dominants en $1/\omega$:

$$\int_0^{t'} dt'' R_{jii}^{(2)}(t-t', t'-t'') h(t'') = h \left(\frac{R_{jii}^{(2)}(t, t', t')}{\omega} \sin(\omega t') + \frac{v_{i,j,k}^{(2)}(t, t', t')}{\omega^2} \cos(\omega t') \right) \quad (2.55)$$

où par souci de clarté nous employons les mêmes notations que dans le texte principal (chapitre 1) :

$$v_{i,j,k}^{(2)}(t, t', t') \equiv \lim_{\substack{t-t' \rightarrow \infty \\ t'' \rightarrow t'}} \frac{\partial R_{ijik}^{(2)}(t, t', t'')}{\partial t'} \quad (2.56)$$

Ainsi, la contribution totale du terme non linéaire vaut :

$$2 \frac{h^2}{\omega} \int_0^t dt' R_{jii}^{(2)}(t, t', t') \cos(\omega t') \sin(\omega t') + \frac{h^2}{\omega^2} \int_0^t dt' v_{i,j,k}^{(2)}(t, t', t') \cos(2\omega t') + \frac{h^2}{\omega^2} \int_0^t dt' v_{i,j,k}^{(2)}(t, t', t') \quad (2.57)$$

Les deux premiers termes peuvent être traités exactement de la même façon que le terme linéaire : ils ne participent donc pas à la sélection. Par contre, le dernier terme peut diverger dans la limite des grands temps. En effet, il suffit que $v_{i,j,k}^{(2)}(t, t', t')$ ait une partie constante lorsque la variable est t' . Ceci est assez naturelle puisque ce terme est la dérivée par rapport à t'' d'une réponse à un champ dont la forme typique est une exponentielle du type $\exp(-(t'-t'')/\tau)$. Par conséquent ce dernier terme de la somme contribue à une sélection de la solution puisque seules des solutions particulières pour lesquelles $v_{i,j,k}^{(2)}(t, t', t') = 0$ peuvent prétendre à être stables.

Nous allons voir l'extension de ce résultat à l'application de plusieurs champs. Les détails des calculs ne sont pas explicités puisque ceux-ci sont en tout point identiques à ceux que nous venons d'effectuer.

2.4.2 Application de plusieurs champs

Si maintenant, nous appliquons deux champs suivant deux directions i et j orthogonales (correspondant aux composantes i et j de l'aimantation (voir plus haut)) de fréquences respectives ω_i et ω_j , chacune des contributions de la susceptibilité linéaire aura le même effet que précédemment, c'est-à-dire aucun du point de vue de la sélection. A l'opposé, chaque terme de la contribution non linéaire :

$$\begin{aligned} & \int_0^t dt' dt'' R_{kii}^{(2)}(t, t', t'') h_i(t') h_i(t'') \\ & \int_0^t dt' dt'' R_{kjj}^{(2)}(t, t', t'') h_j(t') h_j(t'') \end{aligned} \quad (2.58)$$

aura sur toute composante k de l'aimantation un effet de sélection identique à celui que nous venons de voir. Un effet alors à éviter, si nous voulons utiliser plusieurs champs a.c. comme outils indépendants les uns des autres permettant d'opérer sur un système, est une contribution croisée des champs aux termes de sélection :

$$\int_0^t dt' dt'' R_{kij}^{(2)}(t, t', t'') h_i(t') h_j(t'') \quad (2.59)$$

Pour éviter un tel phénomène d'interférences, il faut éviter que des termes du type $\cos(\omega_i t') \cos(\omega_j t'')$ aient une valeur moyenne non nulle sur une période, les raisons étant exactement les mêmes que celles qui donnent une valeur non nulle dans le cas de l'application d'un seul champ. Ainsi, il suffit de prendre ω_j comme multiple de ω_i , $\omega_j = p \omega_i$, où p est un entier plus grand que 2, pour être sûr que la contribution à la sélection est nulle pour ces termes croisés.

En conclusion, nous voyons que l'utilisation de plusieurs champs orthogonaux avec des fréquences bien choisies permet de modéliser les symétries de façon indépendante.

Chapitre 3

Transition

Nous venons de voir dans une première partie des systèmes loin de l'équilibre mais atteignant un état stationnaire pour des temps expérimentalement accessibles, sauf pour des paramètres particuliers plaçant le système aux points de transition. Maintenant nous allons nous intéresser à des systèmes se situant loin de leur équilibre stable et relaxant lentement vers cet état. La raison d'un tel comportement peut avoir des causes multiples et variées. Un exemple bien connu est celui de la vinaigrette. A température ambiante, la vinaigrette possède un état d'équilibre stable qui se traduit par une séparation de phase : l'huile (acides gras insaturés) et le vinaigre (acide acétique) ne se mélangent pas par effet hydrophobe. Dès lors, il faut agiter fortement la vinaigrette pour qu'une phase homogène apparaisse, plus ou moins bien stabilisée par ajout de moutarde (contenant des graines d'une plante de la famille des cruciféracées qui contient des éléments tensioactifs). Lorsque l'agitation est arrêtée, la vinaigrette est dans un état thermodynamique métastable. Très lentement, la vitesse dépendant de la qualité de la (du) cuisinière(er), les gouttes d'huile vont coalescer, les plus petites au profit des plus grosses, et vont se séparer du vinaigre après un temps assez long (on peut atteindre quelques mois en conservant au réfrigérateur). On peut distinguer alors deux comportements *a priori* qualitativement différents : si la seule coalescence de deux gouttes demande un temps beaucoup plus grand que celui de l'échelle de temps de l'observation alors le système est dynamiquement stable et thermodynamiquement métastable sans relaxation véritable vers son état d'équilibre. Si par contre, il y a une coalescence incessante des gouttes et que les volumes en jeu sont infinis, les gouttes d'huile deviennent de plus en plus grosses à mesure que le temps avance et il faudra un temps infini pour que la séparation se fasse. Le système est alors loin de l'équilibre et possède la propriété que la taille moyenne des gouttes dépend du temps pris à partir du moment que le cuisinier a arrêté d'agiter la sauce. On dit que le système vieillit car ses propriétés physiques dépendent de l'âge du système, l'âge étant compté à partir de la fin de préparation du système. C'est exactement ce genre de systèmes que nous allons étudier dans ce chapitre. Le comportement de coalescence huileuse de la vinaigrette est un processus de croissance de domaines, processus que l'on retrouve dans une multitude de systèmes : trempes de ferromagnétiques depuis leur phase para dans leur phase ferro, processus de diffusions, coalescence des bulles dans les mousses,... Le processus de vieillissement, lui, se rencontre dans de nombreux systèmes pour lesquels il est assez difficile de définir ce qui grossit : les plastiques, les verres de spins, les verres inorganiques, les gels... Cependant, des travaux récents [47, 79] laissent penser qu'à l'instar des fonctions de corrélation à deux points (d'espace) pour les transitions d'équilibre, des fonctions de corrélation à quatre points (deux d'espace et deux de temps) seraient le pendant d'une bonne description de ce qui grossit dans les systèmes subissant des *transitions*

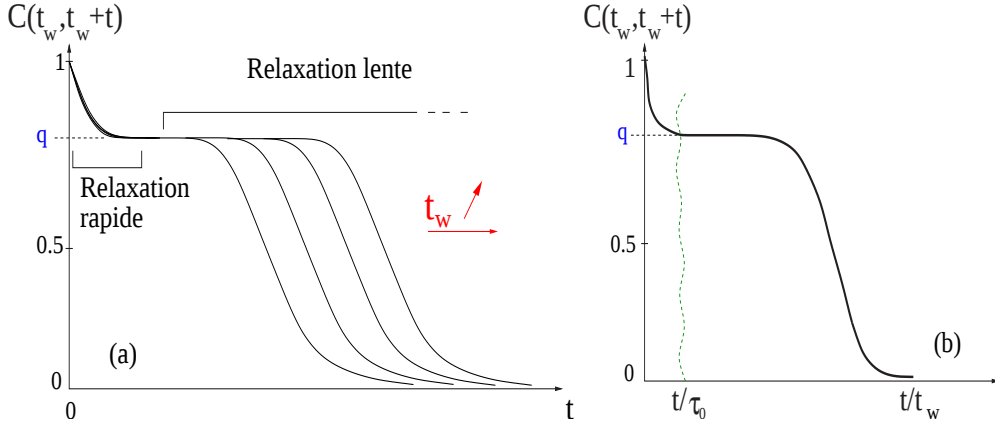


FIG. 3.1 – Comportement typique des fonctions de corrélation à deux temps d'un système vieillissant. Figure (a) : lorsque $C > q$, le système relaxe rapidement vers un pseudo-équilibre caractérisé par q . Ensuite, la relaxation dépend fortement de l'âge du système t_w . Figure (b) : pour un vieillissement dit simple, une reparamétrisation du type t/t_w fait collapser les courbes sur elles-mêmes. L'échelle de temps microscopique τ_0 n'intervient plus.

vitreuses, i.e. des systèmes susceptibles d'avoir une phase hors-équilibre et vieillissante pour tous les temps expérimentaux accessibles.

Ces dernières années donc, un effort considérable a été développé pour mettre en évidence des analogies entre les systèmes possédant la propriété de vieillir, faisant fi à la fois de la différence des échelles de temps mis en jeu mais aussi des raisons donnant naissance au processus de vieillissement [57, 76]. Par exemple, pour les verres de spins (exemple : $C_d C_{r2-x} I_{n_x} S_4$) le désordre gelé des interactions magnétiques induit le phénomène alors que les verres structuraux (comme les verres organiques) ne présentent à première vue aucun désordre. Une des plus célèbres analogies concerne les équations (maintenant classiques) d'évolution, d'un côté des fonctions à deux temps (corrélation et réponse) de l'aimantation du p -spin en champ moyen [62], et de l'autre, des fonctions à deux temps de la densité dans un liquide surfondu traité suivant la théorie de couplage de modes [70]. Il faut alors reconnaître qu'il n'était *a priori* pas évident que l'évolution temporelle de ces deux systèmes soient identiques. D'une façon générale les lois de vieillissement rencontrées dans les systèmes aussi bien expérimentaux, que numériques et qu'analytiques, où seul l'âge du système intervient, sont une manifestation d'une description sous-jacente sûrement très générale.

Plus formellement, les lois de vieillissement se caractérisent premièrement par une brisure de l'invariance dans le temps des fonctions de corrélation et de réponse. Expérimentalement, pour une large gamme d'observables, deux comportements, pour lesquels les échelles de temps sont séparées, doivent être distingués. Aux temps courts, un nombre macroscopique de particules relaxent rapidement vers un pseudo-équilibre (relaxation β dans le jargon des liquides surfondus) suivant un comportement rappelant exactement les situations d'équilibre : les fonctions de corrélation (et de réponse) à deux temps t_w et $t_w + t$ ne dépendent que de leur différence :

$$C_{eq}(t_w, t_w + t) = f(t) \quad (3.1)$$

où f est une fonction décroissante du temps.

Ensuite, le système procède à une décorrélation (relaxation α) qui dépend du temps auquel on fait la mesure. Remarquablement, les fonctions de corrélation dans la partie lente

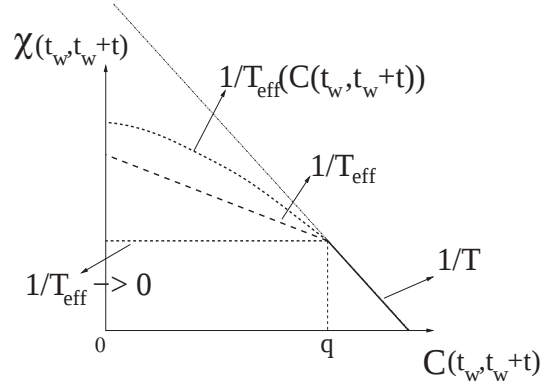


FIG. 3.2 – Diagramme 'Réponse intégrée' vs. 'Corrélation'. Pour $C > q$, la courbe est typique de celle à l'équilibre avec une pente donnée par $-1/T$. Pour $C < q$, plusieurs scénarios sont possibles. C'est seulement dans le cas où la relation est linéaire qu'une température effective est bien définie. Dans les phénomènes de croissance de domaines, la courbe devient plate. La température effective $T_{\text{eff}} = \infty$.

se mettent sous une forme générique pour l'ensemble des systèmes vieillissants (que ce soit expérimental, analytique ou numérique) [57] :

$$C_{\text{lent}}(t_w, t_w + t) = \sum_i C_i \frac{h_i(t_w)}{h_i(t_w + t)} \quad (3.2)$$

où les h_i sont des fonctions croissantes du temps qui évoluent sur des secteurs de temps séparés. Certains systèmes sont simplement décrits par un seul de ces secteurs, i.e. une seule fonction h . La situation la plus populaire est celle de la croissance de domaines [57]. Il faut alors retenir à ce stade que l'ensemble des processus de vieillissement que nous discuterons dans la fin de cette thèse ne comporte aussi qu'un seul secteur de temps.

Une forme typique de relaxation est donnée en figure (3.1). Dans le cas d'un liquide surfondu, ces fonctions d'autocorrélation sont souvent les fluctuations de densité du mode k , $C(t_w, t_w + t) = \langle \rho_k^*(t_w) \rho_k(t_w + t) \rangle$. Pour un système magnétique, elles sont souvent les fonctions d'autocorrélation de l'aimantation. Nous verrons à ce sujet que le choix des observables n'est pas un concept trivial afin d'obtenir des comportements génériques [88, 87].

Température effective

Parmi les approches permettant de comprendre les phénomènes de vieillissement, deux récentes ont eu ces dernières années un impact retentissant. La première concerne la résolution analytique du p -spins [62]. Ce système est caractérisé par le hamiltonien suivant en présence d'un champ magnétique extérieur uniforme h :

$$H = - \sum_{i_1 < \dots < i_p}^N J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} + h \sum_i s_i \quad (3.3)$$

où s_i sont des spins sphériques, i.e. $\sum_{i=1}^N s_i^2 = N$. Les énergies d'interaction magnétique sont des variables aléatoires gaussiennes indépendantes centrées de variance $\overline{J_{i_1 \dots i_p}^2} \sim 1/N^{p-1}$. La

barre indique que la moyenne est prise sur l'ensemble des couplages possibles. La résolution des fonctions d'autocorrélation de spins :

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \overline{\langle s_i(t_w) s_i(t_w + t) \rangle} \quad (3.4)$$

et des réponses intégrées $\chi(t_w, t_w + t)$ associées, correspondant à la variation d'aimantation du système au temps $t_w + t$ par rapport à l'application d'un petit champ magnétique constant au temps t_w , a permis de déboucher pour la première fois sur des prédictions a priori indépendantes du système étudié à travers la notion de *température effective* [63, 64]. L'idée originale a été de considérer le diagramme χ vs C [65] (avec comme variables paramétriques les temps) pour caractériser la dynamique du système. Aujourd'hui, de nombreux efforts sont consacrés à l'étude de ce diagramme pour essayer d'en comprendre les éventuels comportements génériques [65].

Dans la limite $N \rightarrow \infty$ prise avant $t_w \rightarrow \infty$, lorsque la température est telle que le système est à jamais loin de l'équilibre, la relation reliant les fluctuations (encodées dans $C(t_w, t_w + t)$) et la dissipation (encodée dans le retard de la réponse $\chi(t_w, t_w + t)$), relation que l'on note désormais FDR en rapport avec l'acronyme anglais, se met sous la forme suivante dans le cas du p -spins :

$$\chi(t_w, t_w + t) = \begin{cases} \frac{1}{T} (1 - C(t_w, t_w + t)) & \text{si } C > q \\ \frac{1}{T_{eff}} (q - C(t_w, t_w + t)) + \frac{1}{T} (1 - q) & \text{si } C < q \end{cases}$$

Le paramètre d'Edwards-Anderson q délimite les deux régimes, à savoir de pseudo-équilibre et de vieillissement (Fig. (3.2)). La FDR se sépare donc en deux régimes correspondant aux deux échelles de temps, à savoir celle, microscopique, liée à (3.1) et l'autre, vieillissante, liée à (3.2). Le premier régime donne une pente dans le diagramme χ vs. C (Fig. (3.2)) inversement proportionnelle à la température du bain thermique, rappelant fortement le comportement à l'équilibre. Le second donne une pente à partir de laquelle on peut définir une température effective T_{eff} plus grande que la température du bain [63, 64].

Expérimentalement et numériquement, ce comportement a été observé pour divers systèmes très différents (voir [61] pour une discussion générale sur la violation de FDT et références dedans), à savoir une relation linéaire dans le diagramme χ vs C définissant une température effective différente de celle du bain ; par exemple un fluide visqueux étiré [44] et un système d'oscillateurs harmoniques [50]. Les propriétés de la température effective peuvent alors être résumées suivant ces quatre points [77] :

1. Un thermomètre réglé pour répondre seulement aux basses fréquences mesure exactement la température effective.
2. La température effective de deux systèmes différents s'égalisent lorsque les deux systèmes sont suffisamment couplés.
3. Dans la limite de température nulle, la température effective ne s'annule pas.
4. Si on ajoute un bain thermique couplé aux observables lentes, ce bain n'a pratiquement aucun effet sur le système si sa température est plus basse que la température effective. Dans le cas contraire, le vieillissement est interrompu.

En conclusion, que ce soit du point de vue de divers modèles théoriques, d'expériences [39, 16] (toujours en nombre insuffisant pour l'instant), que de simulations numériques, la présence de cette température effective ne fait aucun doute [61]. Reste alors à savoir comment interpréter de façon générale ses valeurs ou les déviations par rapport au comportement linéaire.

Modèle d'espace des phases

La seconde approche récente essentielle dans l'histoire de la compréhension des verres est celle des modèles d'espace de phase qui sont plus des approches phénoménologiques des transitions vitreuses. Parmi ces approches, une lumineuse et minimale vision de la transition vitreuse et de ses effets de vieillissement est le modèle de pièges proposé par Bouchaud [52], modèle sur lequel nous allons revenir plus longuement dans la prochaine partie. Les modèles d'espace de phase sont intéressants car la dynamique du système est intuitive ce qui n'est pas forcément le cas dans la résolution analytique du p -spins, que ce soit pour les lois de vieillissement obtenues ou pour l'émergence de la température effective. Si l'objectif est d'avoir un modèle simple pour décrire les phénomènes vitreux, il faut toutefois garder en tête la nécessité d'avoir des comportements cohérents avec la notion de température effective. Cette nécessité sera la trame de la fin de ce manuscrit. Nous allons voir en effet la réalisation microscopique de modèles d'espace de phase pour étudier leur comportement à travers la FDR. Fort de nos résultats, nous proposerons dans le dernier chapitre une extension de ces modèles avec comme objectif de comprendre toujours mieux la phénoménologie des systèmes comme les p -spins.

Avant de rentrer dans le vif du sujet, il est indispensable d'introduire un tant soit peu les modèles d'espace des phases. Premièrement, les transitions vitreuses se caractérisent par une divergence du temps de relaxation (à température finie ou pas, sachant qu'il est dur de discriminer pour des raisons évidentes de flèche du temps). En-dessous de ces températures de divergence, le système vieillit pour tous les temps expérimentalement accessibles. Une compréhension importante de ces phénomènes d'arrêts structuraux repose sur le paradigme du *paysage d'énergie* [91, 59, 66, 85]. Par exemple, dans le cas du p -spins, la situation est très claire. Au-dessus d'une certaine énergie libre, les états du système (caractérisés par leur Hessien) possèdent tous (à une exponentielle près dans la taille du système) des directions descendantes en énergie. Ce sont donc des points-selles. En-dessous, ces directions disparaissent pour laisser place seulement à des minima locaux séparés par des barrières infinies d'énergie dans la limite thermodynamique. Le ralentissement de la dynamique s'explique alors pour ce système par la diminution des directions descendantes en énergie permettant d'atteindre l'état d'équilibre [78]. L'extension aux verres structuraux se fait exactement dans cette ligne de pensée [40, 58, 71, 75, 41].

Une question est alors de se demander s'il est possible d'avoir une description simplifiée soit du processus de descente en énergie dans des états de moins en moins connectés, soit des processus d'activation qui de toute façon ont lieu tôt ou tard. En effet, il est assez surprenant de trouver dans la littérature la seule question du caractère 'dimension finie' des phénomènes vitreux que chacun peut expérimenter par opposition au caractère champ moyen. Il est vrai que le cas réaliste de dimension finie donne une transition vitreuse plus étalée en température et surtout moins précise que celle du champ moyen ; il est donc bien nécessaire de comprendre les différences entre description champ moyen et dimension finie. Cependant, malgré la résolution du p -spins, il n'existe pas véritablement de modèle simplifié permettant de rendre compte de sa phénoménologie. Nous essaierons autant que possible dans la fin de cette partie de proposer quelques directions (les plus simples possibles) pour se rapprocher de ce comportement.

Rappelons donc qu'une manière de simplifier les descriptions des phénomènes vitreux est de considérer l'évolution d'une particule (représentant l'état microscopique du système) dans un paysage d'énergie en supposant des propriétés très générales de ce paysage. Les modèles d'espace de phase que nous allons considérer font par exemple une première hypothèse simplificatrice selon laquelle *tous les états sont connectés*.

Dans cette situation, si nous considérons les M états i (d'énergies E_i) susceptibles d'être visités par cette particule, une manière générale de décrire l'évolution temporelle des caractéristiques du problème est d'écrire un système d'équations maîtresses pour les probabilités $P_i(t)$ de trouver la particule dans l'état i :

$$\frac{1}{\Gamma_0} \frac{dP_i}{dt} = -\Gamma_i P_i(t) + \frac{1}{M} \sum_{j=1, j \neq i}^M P_j(t) w(j \rightarrow i) \quad (3.5)$$

Γ_0 est une échelle de temps microscopique que l'on prend désormais égale à 1. Γ_i est la probabilité de s'échapper de l'état i et $w(i \rightarrow j)$ est le taux de transition entre les états i et j , taux vérifiant le bilan détaillé. D'un point de vue microscopique, comme tous les états sont connectés, seule une dynamique globale peut *a priori* correspondre à de tels modèles. Cependant, nous verrons que par un phénomène de 'coarse-graining' dans le temps, il est possible à partir d'une dynamique d'un seul retournement de spins (dans le cas de modèles magnétiques) d'avoir d'une façon effective un modèle totalement connecté.

Une deuxième hypothèse simplificatrice des modèles que nous allons considérer suppose que *les énergies sont des variables aléatoires indépendantes*. Ainsi, par passage au continu, les états discrets sont décrits par une densité en énergie de niveaux qui sera la plupart du temps exponentielle :

$$\rho(E) = \beta_g e^{\beta_g E} \quad (3.6)$$

Dans ce cas, le système est caractérisé par la probabilité $P(E, t)$ de trouver au temps t n'importe quel état ayant une énergie comprise entre E et $E + dE$, ou de façon similaire de trouver la particule dans l'énergie $[E, E + dE]$. L'équation maîtresse d'évolution est alors donnée pour ces modèles par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(E, t)}{\partial t} &= -\Gamma(E) P(E, t) + \int_{-\infty}^0 dE' P(E', t) W(E' \rightarrow E) \rho(E) \\ \Gamma(E) &= \int_{-\infty}^0 W(E \rightarrow E') \rho(E') \end{aligned} \quad (3.7)$$

où les taux de transition W vérifient le bilan détaillé :

$$W(E \rightarrow E') = e^{-\beta(E' - E)} W(E' \rightarrow E) \quad (3.8)$$

La résolution de ces équations suivant les données de W et de $\rho(E)$ permettent d'envisager une multitude de comportements rencontrés dans divers systèmes [82, 89].

Pour revenir au p -spins, nous avons vu que des points-selles disparaissaient au profit de minima. Ainsi, deux sortes de transition $W(E \rightarrow E')$ se sont distinguées durant les dernières années. La première correspond à une caricature d'une situation ne comportant que des minima. Le passage de E à E' ne dépend que de E à travers une loi d'Arrhenius :

$$W(E \rightarrow E') = e^{\beta E} \quad (3.9)$$

où $E < 0$. Cette loi d'évolution accompagnée de la densité exponentielle constitue le modèle de pièges de Bouchaud [52] que nous dénommons désormais BTM. Nous étudions en détail ce modèle dans le prochain chapitre.

Deuxièmement, une façon de considérer des directions descendantes est de permettre la descente en énergie même à température nulle. Par exemple, nous pouvons choisir une dynamique de Métropolis :

$$P(E \rightarrow E') = \begin{cases} e^{-\beta(E' - E)} & \text{si } E' > E \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.10)$$

Ce genre de dynamique donne lieu à un autre type de comportement que Barrat et Mézard ont étudié à température nulle [43]. Généralisant ce modèle à toute température [48], nous appellerons BMM désormais le modèle étudié dans [48] (où la seule différence consiste à prendre une dynamique de Glauber au lieu de Métropolis).

En dépit de la simplicité du BTM, ce modèle rend compte d'une multitude de comportements que ce soit dans la matière vitreuse structurale ou les milieux granulaires, et même en physique atomique [42] ! Il est tout de même important de comprendre que le succès des modèles BTM et BMM réside aussi dans leur simplicité. Cette simplicité est essentiellement due au fait que tous les états sont connectés. Nous verrons qu'une version plus locale de la dynamique dans l'espace des phases, i.e. tous les états ne sont plus connectés, permet aussi d'obtenir des phénomènes très intéressants pour les processus vitreux. En outre, les idées que nous développons pourraient permettre de comprendre quels sont les ingrédients nécessaires pour obtenir une description simplifiée de dynamiques complexes comme le p -spins.

Liste des abréviations

BMM Modèle de Barrat-Mézard à température finie [48]. Acronyme anglais de *Barrat-Mézard Model*.

BTM Modèle de pièges de Bouchaud [52]. *Bouchaud Trap Model*.

FDR Relation de fluctuation dissipation. *Fluctuation Dissipation Relation*.

FDT Théorème de fluctuation dissipation. *Fluctuation Dissipation Theorem*.

NPP Problème de répartition des nombres. *Number Partitioning Problem*.

REM Modèle d'énergies aléatoires [68]. *Random Energy Model*.

Deuxième partie

Réalisations microscopiques de modèles de pièges

Chapitre 4

Réalisations microscopiques du modèle de pièges de Bouchaud

4.1 Le modèle de pièges de Bouchaud (BTM)

Le BTM est basé sur le schéma suivant : une particule évolue dans un paysage d'énergie qui ressemble à un green de golf. Ce green est composé de trous dont la profondeur h est distribuée exponentiellement suivant $e^{-\beta_g h}$. A chaque pas de temps microscopique, la particule a une probabilité $e^{-\beta h}$ de sortir du trou pour aller sur le green qui définit ainsi un *horizon*. Une fois sortie, elle tombe immédiatement dans un nouveau trou qui est dans le cas du modèle original choisi au hasard (i. e. Fig. (4.1) est de dimension infinie). Par construction, une fois la particule hors du trou, elle perd totalement la mémoire de son histoire et le système est d'une certaine façon réinitialisé. L'effet combiné d'une distribution exponentielle de profondeur de trous et d'une probabilité exponentielle d'échapper de ces derniers conduit à des temps de piégeage distribués suivant une distribution dont la moyenne diverge lorsque $\beta > \beta_g$. Le caractère vitreux résulte de la possibilité de tomber dans des trous de profondeur arbitrairement grande. Un premier succès de ce modèle est qu'il donne un temps de relaxation qui diverge comme une loi de Vogel-Fulcher (4.1). En effet, d'un point de vue thermique, la température du bain vaut $T = \beta^{-1}$ et la température de transition vitreuse vaut $T_g = \beta_g^{-1}$. Il est alors possible de montrer [82] que :

$$\tau_{relax} \sim e^{\frac{\Delta}{T-T_g}} \quad (4.1)$$

Cette loi est caractéristique des divergences de la viscosité (analogue à un temps de relaxation) pour des verres fragiles.

Le BTM présente le paradoxe apparent que si nous considérons n'importe quelle paire de temps tels que le système vient juste d'émerger d'un piège, la dynamique est (statistiquement) réversible dans le temps : le processus d'irréversibilité vient du fait que pour un temps donné t , le système a de grandes chances d'être dans un piège dont la durée de vie est de l'ordre de t .

Ces éléments, à savoir l'existence d'un horizon au-dessus duquel le système doit émerger à chaque temps, la réversibilité dans le temps et une densité exponentielle d'états, peuvent être considérés comme les caractéristiques définissant le modèle. A ce stade, il est important de noter que l'horizon défini dans ce modèle ne correspond pas au seuil des modèles de verres champ moyen en-dessous duquel les points selles du paysage d'énergie disparaissent. En effet,

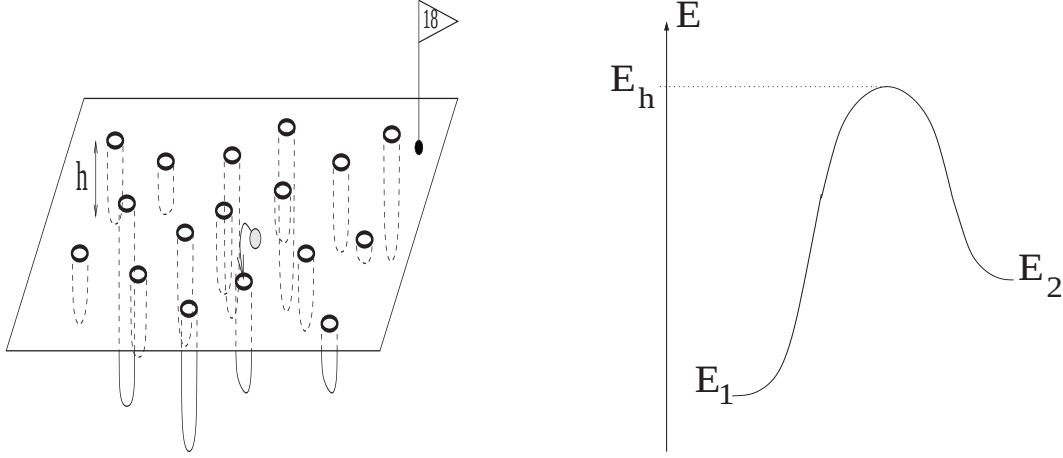


FIG. 4.1 – Caricature du paysage d'énergie dans le BTM. Dans le BTM original, tous les trous sont connectés de façon que le choix du trou d'arrivée de la balle est donné par une mesure plate.

FIG. 4.2 – Barrière d'énergie à franchir lors d'une transition activée. La transition est dite purement activée lorsque l'énergie E_h est la même pour tout couple d'énergies (E_1, E_2) .

juste en-dessous de ce seuil, les verres champ moyen ne présentent pas de phénomène de réinitialisation ou de réémergence. L'évolution est bien activée mais globalement la descente en énergie est irréversible. Seulement pour des temps précédents l'équilibration du système, il est possible que la dynamique soit celle du BTM.

Même si de tels comportements de particules n'ont pas été observés, cette approche phénoménologique donne un comportement vitreux décrivant aussi bien les verres structuraux que les verres de spins. D'autre part, seulement récemment il a été démontré [46] que la dynamique de modèle de pièges (BTM) pouvait résulter d'un modèle microscopique (le modèle d'énergies aléatoires (REM) [68] à taille finie) doté d'une dynamique microscopique purement activée¹, i.e. du type BTM. Par dynamique purement activée, il faut comprendre que le passage entre deux états s'effectue par le franchissement d'une barrière d'énergie dont le sommet est identique pour chaque état (Fig. (4.2)). Le sommet correspond donc à un horizon. Ainsi, étant donnés deux états 1 et 2 d'énergies respectives E_1 et E_2 , la probabilité de passer de 1 à 2, respectivement de 2 à 1, est donnée par $\exp(-(E_h - E_1)/T)$ et $\exp(-(E_h - E_2)/T)$ respectivement. En intégrant le facteur $\exp(-E_h/T)$ dans le temps microscopique du système, sans perte de généralité, nous pouvons remplacer ces taux de transition par des taux de transition purement activée, c'est-à-dire du type :

$$W(E_1 \rightarrow E_2) = e^{E_1/T} \quad (4.2)$$

pour lesquels les énergies considérées sont négatives. Ce type de transition est la dynamique microscopique de base du BTM. En ce qui concerne le REM, comme nous le verrons à la fin de ce chapitre, le comportement BTM semble être insensible à la dynamique choisie à partir du moment où tous les états sont connectés, confirmant ainsi le caractère général de la preuve de [46].

Enfin, il s'est avéré que ces notions de pièges avaient une réalité tangible dans les systèmes

¹Ce choix de dynamique permet de rendre la preuve accessible.

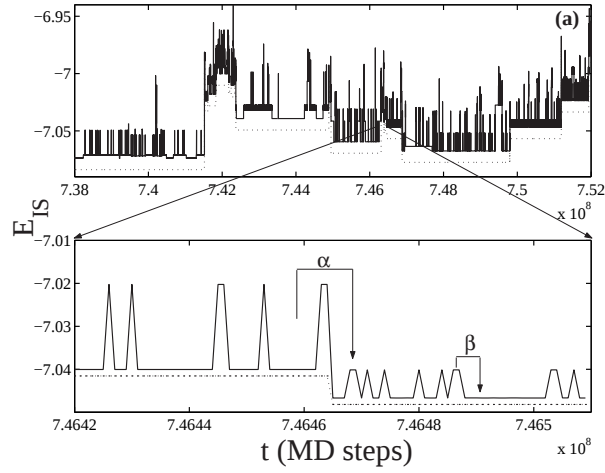


FIG. 4.3 – Minima d'énergies potentielles visitées lors d'une simulation de type dynamique moléculaire d'un liquide de Lennard-Jones près de sa température vitreuse. Extrait de [67].

de Lennard-Jones. En effet, pour les liquides surfondus, il est d'usage d'étudier une énergie E_s différente de l'énergie totale du système (composée d'une partie cinétique et d'une partie d'énergie potentielle d'interaction). Pour un état microscopique donné, cette énergie E_s est définie comme le minimum d'énergie potentielle que l'on atteindrait après une trempe à température nulle à partir de ce même état. Ces énergies sont appelés 'Structures Inhérentes'. Les auteurs de [67] ont numériquement trouvé que ces structures visitées au cours du temps lors d'une évolution près de la température vitreuse peuvent se répartir dans des pièges (métabasins) dont la dynamique peut se mettre sous la forme d'un modèle de pièges (Fig. (4.3)) avec une densité gaussienne en énergie. En considérant les résultats de [82], ils ont alors montré qu'il était possible de rendre compte des lois d'évolution et donc du ralentissement des corrélations de densité.

Avoir des réalisations microscopiques du BTM est intéressant. Premièrement, cela permet de mettre en avant des situations physiques pour lesquelles cette description peut être pertinente et ainsi d'en dégager la philosophie. Une autre raison, qui nous préoccupera jusqu'à la fin de ce manuscrit, est d'étudier la réponse d'un tel système, ou de façon équivalente la FDR. En effet, un large éventail de FDR a été proposé pour ce modèle. La raison essentielle d'un manque de consensus sur cette question vient du fait qu'il n'y a pas de prescription unique sur comment un champ extérieur modifie l'horizon et donc les taux de transition. Cette question est essentielle puisque nous avons vu que la température effective apparaissait comme un comportement inhérent au caractère vitreux dont les caractéristiques pouvaient recouvrir un caractère assez universel.

Dans ce chapitre, nous donnons deux exemples réalisant le BTM : le problème de la répartition de nombres (NPP), lui-même un problème de compactification, et les approximations diophantines. Le problème NPP peut être défini comme ceci : étant donné N nombres aléatoires tirés avec une distribution uniforme dans l'intervalle $[0, 1]$, le jeu consiste à diviser ces nombres en deux ensembles tels que la différence de leur somme soit la plus petite possible. Ce problème d'optimisation peut aussi être vu comme la caricature d'un problème d'empilement car si nous considérons N pièces d'épaisseurs aléatoires et indépendantes, le jeu consiste à trouver la plus petite boîte possible de sorte que ces pièces soient empilées

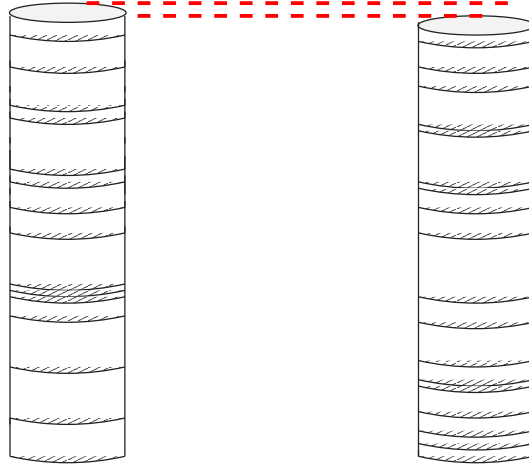


FIG. 4.4 – NPP vu comme un problème d’empilement. Etant donné un certain nombre de pièces d’épaisseurs aléatoires, le jeu consiste à minimiser la différence de hauteur de deux piles construites à l’aide de ces pièces.

suivant deux piles (Fig. (4.4)). Les approximations diophantines que nous allons considérer sont les suivantes : trouver des nombres entiers n et m tels que $n\sqrt{2} + m\sqrt{3}$ soit aussi proche que possible d’un nombre rationnel.

De ces réalisations, nous essayons d’expliquer quelles situations typiques peuvent présenter des comportements de type BTM. Ensuite, nous donnons quelques arguments qualitatifs permettant de comprendre pourquoi le REM est un candidat idéal pour une dynamique de type BTM. Nos résultats montrent alors qu’il semble tout de même assez difficile d’envisager une dynamique réaliste pour le REM. Enfin, nous finissons ce chapitre par exploiter les variations du BTM (ex : modèle à plusieurs niveaux [53]) pour proposer de nouveaux problèmes d’optimisation.

4.2 NPP et le modèle de pièges (BTM)

D’un point de vue de l’optimisation, la définition du NPP est la suivante : étant donné un ensemble de N nombres réels (i. e. de précision infinie) $a_1, a_2, \dots, a_N$, chacun appartenant au segment $[0, 1]$, trouver une partition composée de deux ensembles $\mathcal{S}_1$ et $\mathcal{S}_2$ tels que la différence entre la somme des nombres à l’intérieur de chaque ensemble est la plus petite possible. Ainsi, la fonction de coût la plus naturelle pour ce problème est donnée par :

$$E_m = \left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right| \quad (4.3)$$

Les s_i sont des spins de type Ising pouvant prendre les valeurs ± 1 . Si le réel a_i se trouve dans $\mathcal{S}_1$, le spin s_i vaut $+1$ et *vice versa*.

La fonction de coût peut être aussi écrite comme un verre de spins Ising dont les couplages antiferromagnétiques se mettent sous une forme factorisée $J_{ij} = -a_i a_j$, dite de type Mattis :

$$H_{\text{Mattis}} = E_m^2 = \sum_{i,j=1}^N s_i a_i a_j s_j \quad (4.4)$$

L'énergie du fondamental de (4.3) vaut $\langle E_{m_o} \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}\pi N} 2^{-N}$ [80]. Pour un hamiltonien de la forme (4.4), ceci implique que le comportement vitreux intéressant ne se produit que pour des températures exponentiellement petites dans la taille du système. Pour éviter ce genre de problème, nous allons utiliser un hamiltonien modifié, pour lequel l'énergie de l'état fondamental est extensive dans la limite thermodynamique :

$$E = T_g \ln(E_m) = T_g \ln \left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right| \quad (4.5)$$

T_g est désormais une échelle d'énergie pour laquelle l'énergie de l'état fondamental vaut $-T_g N \ln 2$.

4.2.1 Analyse de l'équilibre

Les problèmes d'optimisation non extensifs, pour lesquels l'optimum n'évolue pas linéairement avec la taille du système, ne sont pas faciles à étudier dans le cadre du formalisme de la mécanique statistique. Pour le NPP, Mertens [80] a contourné le problème de façon intelligente : au lieu de travailler avec une fonction de partition définie sur les bases de (4.5) ou de (4.3) en utilisant les procédés usuels pour établir l'expression de l'énergie libre moyenne, il a utilisé des moyens statistiques pour étudier directement l'indépendance des niveaux d'énergie. Ainsi, ses travaux suggèrent fortement que dans le cas du NPP non contraint, pour des grandes valeurs de N , les énergies E_m sont des variables aléatoires distribuées suivant une demi-gaussienne :

$$P(E_m) = \frac{2}{\sqrt{2\pi\sigma^2 N}} \exp\left(-\frac{E_m^2}{2\sigma^2 N}\right) \cdot \Theta(E_m) \quad (4.6)$$

où $\Theta(E_m)$ est la fonction d'Heaviside et $\sigma^2 = \langle a^2 \rangle$. Mertens a aussi montré que les énergies $E_m < O(\sqrt{N})$ étaient indépendantes. Ce résultat a été rigoureusement prouvé ensuite pour les k plus basses énergies [51], et a été étudié en détails dans toutes les régions dans [45].

De cette étude, en appliquant la transformation $E = T_g \ln |E_m|$, nous pouvons affirmer que les énergies $E < O(\ln N)$ sont aussi des variables aléatoires indépendantes dont la distribution de probabilité est donnée par :

$$P(E) = \mathcal{N} \exp\left(\beta_g E - \frac{1}{2\sigma^2 N} \exp(2\beta_g E)\right) \quad (4.7)$$

avec $\mathcal{N} = \frac{2\beta_g}{\sqrt{2\pi\sigma^2 N}}$. Pour de grandes valeurs de N , la densité des niveaux est donné Fig. (4.5).

La thermodynamique du NPP écrite en termes de la nouvelle énergie E avec les hypothèses citées plus haut peut être obtenue en suivant la méthode microcanonique de Derida pour le modèle d'énergies aléatoires (REM) [68]. On peut alors remarquer qu'il y a deux régions :

- Si $E > E_{inf} = -NT_g \ln 2$, la densité de niveaux est plus grande que 1.
- Si $E < E_{inf} = -NT_g \ln 2$, la densité de niveaux est plus petite que 1.

Pour $E < E_{inf}$ l'entropie s'annule, et pour $E \geq E_{inf}$, l'entropie vaut pour $N \rightarrow \infty$,

$$\frac{S(E)}{N} = \ln 2 + \frac{\beta_g E}{N} \Theta(-E) \quad (4.8)$$

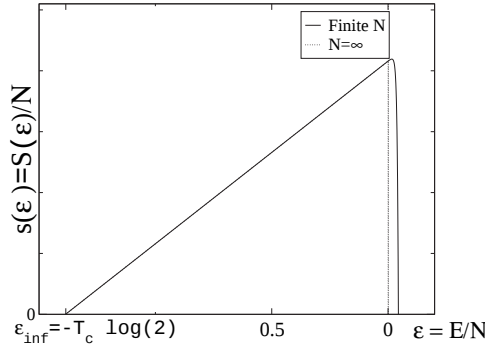


FIG. 4.5 – Entropie par spin $s = S/N$ en fonction de l'énergie par spin $\epsilon = E/N$

En utilisant la relation $\frac{dS}{dE} = \frac{1}{T}$, on trouve que $\frac{\langle E \rangle}{N} = 0$ quand $T > T_g$. Pour $T < T_g$, l'énergie se fixe à $E_{inf} = -T_g N \ln 2$. Finalement, l'énergie libre est donnée par :

$$\begin{cases} \frac{F}{N} = \frac{E_{inf}}{N} = -T_g \ln 2 & \text{si } T < T_g \\ \frac{F}{N} = -T \ln 2 & \text{sinon} \end{cases}$$

La transition est du premier ordre [54] par opposition au modèle standard d'énergies aléatoires, qui est du second ordre. Remarquons qu'au-dessus de l'énergie $E_{sup} = O(\ln N)$ la densité des états est aussi plus petite que 1. A ce niveau d'énergie, l'indépendance des énergies n'est plus vérifiée [80]. Quoi qu'il en soit, nous allons nous intéresser aux transitions qui mettent en jeu les basses énergies, ces niveaux ne sont donc pas pertinents. Nous n'étudierons pas les propriétés statistiques de niveaux pris au hasard, ceci étant fait dans [45] et en détails dans [51]. Nous nous concentrerons sur les propriétés des niveaux d'énergie rencontrés lors d'évolution dictée par une dynamique spécifique, question liée mais loin d'être équivalente aux études mentionnées.

4.2.2 Analyse dynamique

L'étude de l'équilibre montre que le système maximise son entropie lorsque la température est plus grande que T_g . Dans la phase de basse température $T \leq T_g$, une dynamique *Métropolis* conduit le système à explorer des états de plus en plus profonds de façon à atteindre l'état fondamental $-NT_g \ln 2$. Le point intéressant, relatif à l'ensemble des systèmes vitreux, est de comprendre comment le système réussit à diminuer son énergie étant donné d'une part son hamiltonien et d'autre part sa dynamique d'évolution. Nous allons alors montrer qu'une dynamique de retournement d'un seul spin conduit naturellement (4.5) au BTM. Pour justifier notre raisonnement nous présentons les tests numériques les plus pertinents possibles. La dynamique *Métropolis* est définie par des taux de transition qui vérifient le *bilan détaillé* :

$$P(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_j\}) = \begin{cases} e^{-\beta(E_j - E_i)} & \text{si } E_j > E_i \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.9)$$

où $\{\sigma_i\}$ et $\{\sigma_j\}$ sont des configurations qui diffèrent d'un seul retournement de spin. En-dessous de T_g , les simulations montrent qu'un système de $N = 30$ spins ne peut pas équilibrer en des temps numériques raisonnables [80].

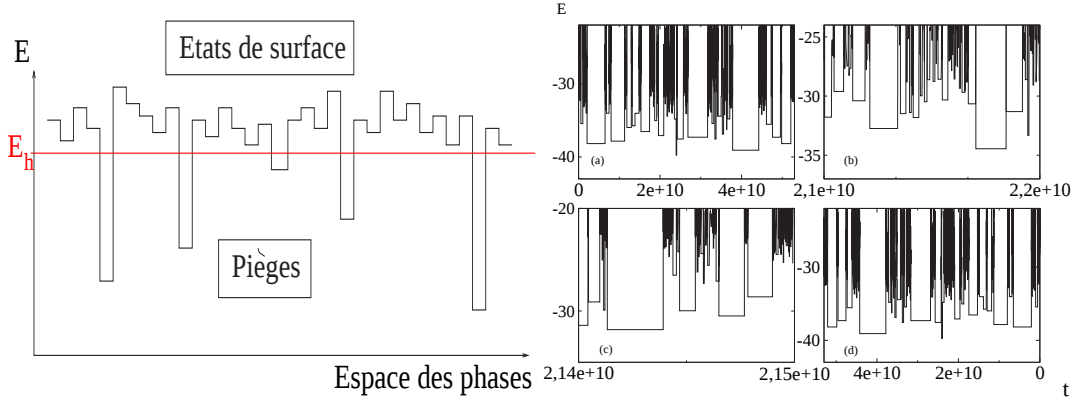


FIG. 4.6 – Structure de l'espace des phases. L'horizon sépare les états de surface des pièges.

FIG. 4.7 – Energie en fonction du temps pour une unique réalisation. (a) Réalisation initiale. (b) Grossissement par 10 du temps. (c) par 100. (d) Echelle des temps inverse.

Etats de surface et horizon

Comme il a été mentionné plus haut, une des caractéristiques définissant le BTM est l'horizon au-dessus duquel le système doit retourner chaque fois qu'il sort d'un état, définissant ainsi une dynamique purement activée (voir début de chapitre). Il est facile de montrer qu'une dynamique de retournement d'un seul spin conduit à cette propriété. En effet, lorsque :

$$E < E_h = T_g \ln(a_{\min}) \sim -T_g \ln N \quad (4.10)$$

avec $a_{\min} \equiv \min(a_1, \dots, a_N) = O(1/N)$, un seul retournement de spin donne une énergie plus grande que E_h . Dans la suite de cette partie, nous appelons *piège* un état dont l'énergie est plus petite que E_h et *état de surface* un état dont l'énergie est plus grande (Fig. (4.6)). Nous allons voir que pour des temps longs la dynamique du système est dominée par de longs séjours dans des états profonds séparés par des excursions rapides au niveau de l'horizon.

Premièrement, nous pouvons jeter rapidement un coup d'oeil à l'évolution de l'énergie pour une unique réalisation. Fig. (4.7) montre une réalisation pour un système de $N = 10000$ spins à température $T = 0.75 T_g$. On peut déjà voir l'invariance d'échelle des pièges. Dans le BTM, le système doit nécessairement apparaître statistiquement invariant par rapport à une inversion du temps, ce qui est limpide au vu des figures (4.7(a)) et (4.7(d)). Insistons une nouvelle fois sur le fait que le BTM est réversible dans le temps dans un intervalle de temps pris entre deux sorties de piège : *une fois que le piège est quitté, le système est aussi mal optimisé qu'il ne l'était au début*. Quand le système est dans un état profond, il n'a pas d'autres choix que de se réorganiser dans sa globalité pour atteindre un nouvel état profond. Un exercice amusant est de réconcilier l'apparente réversibilité avec la tendance systématique de l'énergie à décroître que nous pouvons voir sur Fig. (4.8).

L'existence d'un horizon est une conséquence directe du choix de la dynamique à un seul retournement de spin qui force les états profonds à être situés loin les uns des autres. En effet, le même système doté d'une dynamique suivant laquelle à chaque temps microscopique tous les spins sont aléatoirement distribués se comporte totalement différemment : à basse température, les sauts tendent à diminuer systématiquement l'énergie (voir chapitre suivant), et les figures comme (4.7(a)) et (4.7(d)) sont totalement différentes : voir Fig. (5.3) du

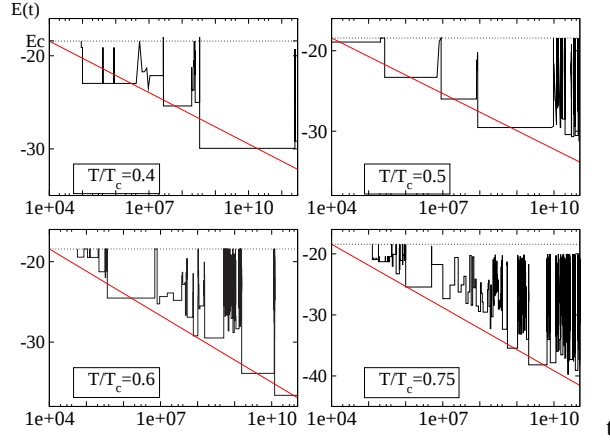


FIG. 4.8 – Dépendance temporelle de l'énergie $E(t)$ pour des réalisations uniques à différentes températures- $N = 10000$. Les lignes droites résultent de l'équation (4.20).

chapitre suivant. Ce chapitre est d'ailleurs dédié à l'étude du NPP avec une dynamique de retournement simultané de plusieurs spins. Nous verrons à ce sujet qu'il est possible d'obtenir un riche diagramme de phases.

Distributions des énergies et des temps de piègeage

Examinons les taux de transition de façon à déterminer la distribution des temps de piègeage. Dans un premier temps, nous supposons que le système se trouve dans un piège, c'est-à dire que $E < E_h$: la seule façon de s'échapper est d'atteindre un état d'énergie plus grande. Si nous notons $x = \sum_{i=1}^N a_i s_i$, la probabilité de s'échapper de x par un seul retournement de spin s'écrit :

$$P_{esc}(E(x)) = \frac{1}{N} \sum_i e^{-\frac{T_g}{T} (\ln |x - 2a_i s_i| - \ln |x|)} \quad (4.11)$$

Si $|x|$ est beaucoup plus petit que a_{min} ($\iff E \ll E_h$) :

$$P_{esc}(E) = \frac{A_N}{N} e^{\beta E} \quad (4.12)$$

$A_N \equiv \sum_i a_i^{-\frac{T_g}{T}}$ est la somme de N variables aléatoires dont les distributions sont des lois de puissance $p(X = a_i^{-\frac{T_g}{T}}) \sim X^{-(1+\frac{T}{T_g})}$ pour $T < T_g$. Ceci implique que pour des grands N , A_N suit une distribution du type loi de Levy, et donc [55] que $\bar{A}_N \sim N^{\frac{T_g}{T}}$. Nous avons donc :

$$\tau(E) = \tau_0 e^{-\beta E} \quad ; \quad \tau_0 \propto N e^{\beta E_h} \quad (4.13)$$

τ_0 fixe l'échelle de temps. En utilisant la relation

$$\psi(\tau) = P(E) \left| \frac{\partial E}{\partial \tau} \right| \quad (4.14)$$

où $P(E)$ vérifie (4.7), nous retrouvons une distribution de Lévy pour les temps de piègeage :

$$\psi(\tau) \propto \frac{\tau_0^{\frac{T}{T_g}}}{\tau^{1+\frac{T}{T_g}}} \quad (4.15)$$

Au lieu de partir initialement d'un état de surface, on peut maintenant calculer la distribution des énergies (ou, de façon équivalente, la distribution des temps τ) rencontrées à un temps donné t_w . On obtient alors une distribution modifiée par le temps d'observation. Si nous considérons la probabilité d'être à t_w dans un piège près de l'horizon, il est raisonnable de supposer que ces états sont peuplés avec une distribution proportionnelle au poids de Gibbs (avec évidemment un cutoff à plus basses énergies) étant donné que ces états sont visités un grand nombre de fois. Nous avons ainsi :

$$P_E(E, t_w) \propto e^{-(\beta - \beta_g)E} \quad (4.16)$$

ce qui implique, en utilisant le changement de variables $P_\tau(\tau, t_w) = P_E(E, t_w) \left| \frac{dE}{d\tau} \right|$:

$$P_\tau(\tau, t_w) \propto \frac{\tau_0^{T/T_g - 1}}{\tau^{T/T_g}} \quad \tau \ll t_w \quad (4.17)$$

Dans la limite opposée des basses énergies, nous pouvons faire l'hypothèse que deux états très profonds sont visités avec la même probabilité étant donné que les optima de (4.3) sont des états décorrélés. Il est possible de prouver ce comportement pour le BTM, mais pour le NPP ceci reste une conjecture [80] comme *toutes les propriétés d'indépendance*. Dans tous les cas, il vient :

$$P_E(E, t_w) \propto \mathcal{N}(t_w) e^{\beta_g E} \quad ; \quad P_\tau(\tau, t_w) \propto \frac{\mathcal{N}(t_w)}{\tau^{1+T/T_g}} \quad \tau \gg t_w \quad (4.18)$$

Avec la prescription que $\int_{t_w}^\infty P_\tau(\tau, t_w) d\tau$ reste d'ordre un, nous avons $\mathcal{N} \sim t_w^{T/T_g}$. Plus généralement, les relations (4.17) et (4.18) peuvent se mettre sous la forme d'une loi d'échelle valide dans tous les régimes [52, 53] :

$$P_E(E, t_w) = e^{-(\beta - \beta_g)E} r \left(\frac{\tau_0 e^{-\beta E}}{t_w} \right) \quad (4.19)$$

où $r(u) = 1$ quand $u \ll 1$ et $r(u) \sim u^{-1}$ quand $u \gg 1$. En particulier, en moyenne :

$$\langle E(t) \rangle \sim -T_g \ln \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^{\frac{T}{T_g}} \quad (4.20)$$

où τ_0 est donné par (4.13). Dans Fig. (4.8), nous avons représenté différentes réalisations à différentes températures pour un système de 10000 spins dans le but de montrer la validité de (4.20). Pour différents N , des courbes similaires sont obtenues.

A partir de nos simulations NPP, nous avons obtenu la distribution (4.18) pour différents temps t_w . Fig. (4.9) montre la loi d'échelle $P_\tau^*(\tau, t_w) = (P_\tau(\tau, t_w))^{\frac{1}{1+T/T_g}}$ pour un système de $N = 1000$ spins à $t_w = 10^4$ pas Monte Carlo, pour des températures allant de $T = 0.7 T_g$ à $T = 0.95 T_g$. Les courbes sont encore en excellent accord avec les prédictions du BTM.

Fig. (4.10) donne la distribution de l'énergie d'un système de 50 spins pour des temps $t_w = 2 \times 10^4$ et pour trois températures différentes. La moyenne est réalisée sur différentes réalisations de l'histoire du bruit. Les lignes droites correspondent à une mesure plate pour les basses énergies et à la distribution de Gibbs pour la queue à haute énergie. L'accord avec le BTM est excellent.

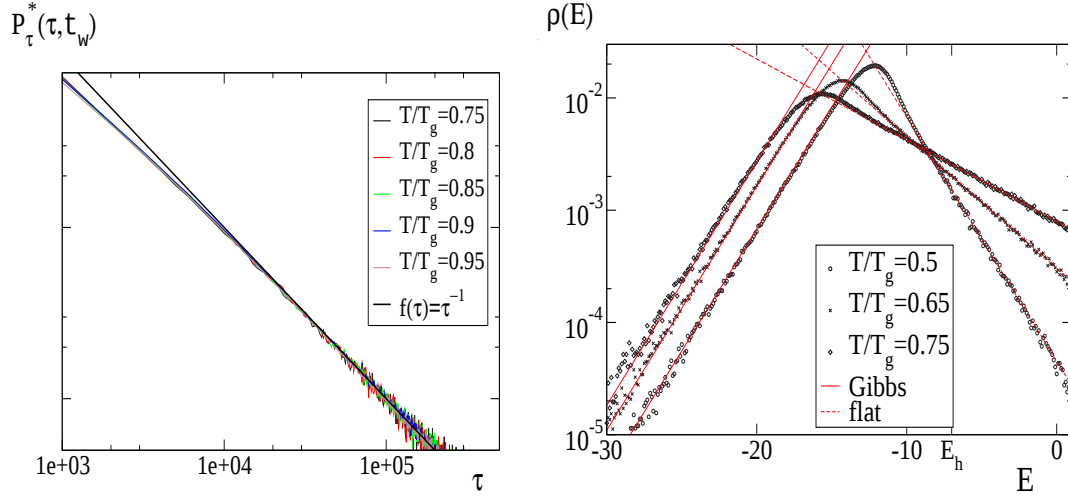


FIG. 4.9 – Distribution renormalisée des temps de piègeage pour $t_w = 10^4$ et pour $N = 1000$ spins.

FIG. 4.10 – Distribution de l'énergie pour différentes réalisations d'un système de 50 spins et à des temps $t_w = 2 \times 10^4$.

Corrélation entre pièges profonds

La corrélation entre états à une énergie donnée dans le NPP a fait l'objet d'études détaillées suite aux propositions de Mertens [80, 51, 45]. Bien que ces études soient sans aucun doute pertinentes pour notre travail, on ne peut pas transférer les résultats directement : alors qu'une étude statique considère la corrélation de *n'importe quel* couple de deux états en-dessous d'une certaine énergie, nous sommes ici forcés de considérer la corrélation entre états visités par la dynamique. Si par exemple nous demandons que deux états soient visités à la suite, étant donné un état nous sommes en train de considérer un sous-ensemble très spécifique pour le prochain état. En d'autres mots, une dynamique impose des corrélations entre des états d'énergies statistiquement indépendantes, et si l'indépendance émerge, ce ne sera que le résultat d'une propriété de la dynamique.

Un autre ingrédient important du BTM est que la corrélation tombe à zéro à chaque fois que l'on sort d'un piège :

$$C_{Single}^B(t_w, t_w + t) = \begin{cases} 1 & \text{si } s_i(t_w + t) = s_i(t_w) \quad \forall i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.21)$$

Dans le NPP, comme dans l'ensemble des systèmes de spins, une corrélation naturelle est l'autocorrélation de spins :

$$C_{Single}(t_w, t_w + t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i(t_w) s_i(t_w + t) \quad (4.22)$$

Il est alors utile de définir les fonctions de corrélation moyennées :

$$\begin{aligned} C(t_w, t_w + t) &= \langle C_{Single}(t_w, t_w + t) \rangle \\ C^B(t_w, t_w + t) &= \langle C_{Single}^B(t_w, t_w + t) \rangle \end{aligned} \quad (4.23)$$

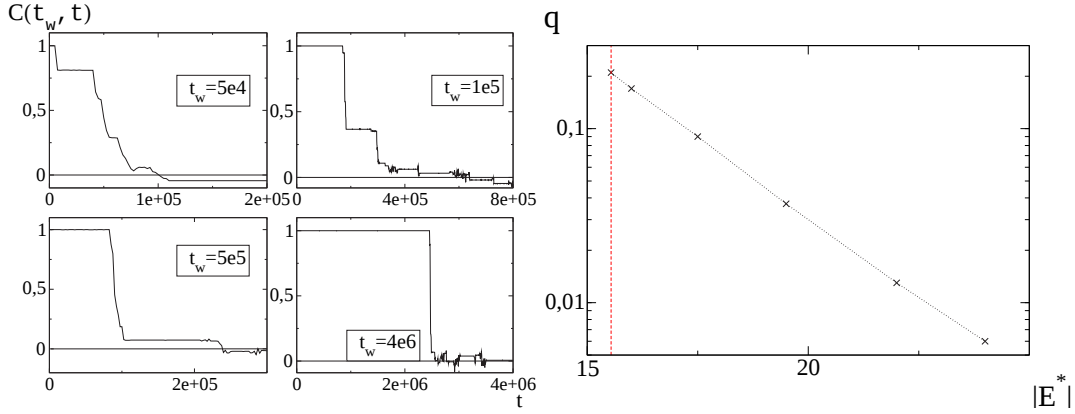


FIG. 4.11 – Fonctions de corrélation (4.22) pour des réalisations uniques. $N = 1000$. $T = 0.75T_g$. Pour des temps longs (4.22) devient (4.21).

FIG. 4.12 – Recouvrement q entre deux configurations successives ayant des énergies plus petites que E^* . $N = 1000$.

$\langle \cdot \rangle$ correspond à une moyenne sur l'histoire du bruit. Du fait des caractéristiques particulières du BTM, il apparaît que dans la phase de basse température, pour des longs temps d'attente, les deux corrélations coïncident. La raison est intéressante en elle-même : pour des temps longs, le système passe la plupart de son temps dans des états de basse énergie. De plus, quand bien même le passage entre deux pièges profonds demande proportionnellement de moins en moins de temps au fur et à mesure que t_w augmente, il implique le retournement de nombreux spins. Fig. (4.11) montre ce comportement pour différentes réalisations avec $N = 1000$ à $T = 0.75T_g$. Lorsque $t_w \rightarrow \infty$, nous voyons que la corrélation $C_{Single}(t_w, t_w + t)$ devient essentiellement un processus de saut unique, la raison étant que la route séparant deux pièges dont la durée typique de vie est t_w devient long en terme d'états visités.

Une autre façon de confirmer la tendance à une décorrélation plus forte à chaque passage près de l'horizon est de relever la première $\mathbf{s}_{first}$ et seconde $\mathbf{s}_{second}$ configurations visitées ayant des énergies plus petites qu'une énergie donnée E^* . Le recouvrement $q = \langle \mathbf{s}_{first} \bullet \mathbf{s}_{second} \rangle / N$ est alors d'autant plus petit que E^* est profonde (Fig. 4.12).

Comportements à temps longs

L'autocorrélation moyenne que nous étudions pour le NPP est donc donnée par :

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i(t_w) s_i(t_w + t) \rangle \quad (4.24)$$

Cette corrélation concerne l'observable :

$$\mathcal{O}(\{s_i\}) = \sum_{i=1}^N \xi_i s_i(t) \quad (4.25)$$

où les ξ_i sont des variables aléatoires gelées indépendantes pouvant prendre les valeurs ± 1 . Lorsque nous prenons la moyenne, il faut alors comprendre aussi que nous faisons la moyenne sur la réalisation des ξ_i ou, de manière équivalente, que nous prenons la limite $N \rightarrow \infty$.

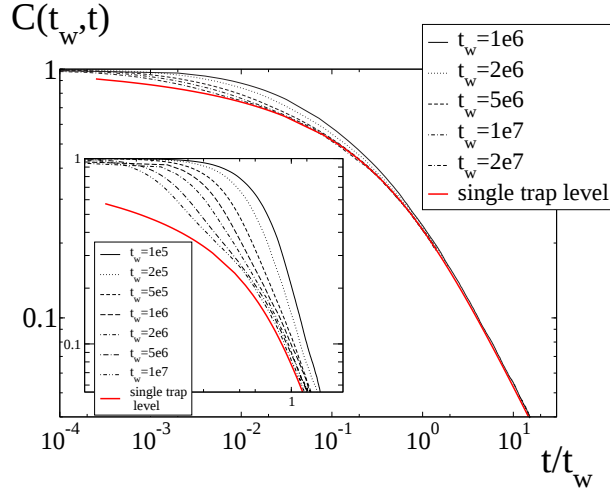


FIG. 4.13 – Fonctions d'autocorrélation- $N = 1000$ - $T = 0.75 T_g$. Insert : $N = 10000$ - $T = 0.9 T_g$. Pour chaque figure, la courbe du bas est la solution analytique de [53, 82] pour le BTM original.

A haute température ($T > T_g$), les fonctions (4.24) et (4.29) deviennent invariantes par translation temporelle : il n'y a pas de vieillissement et FDT est vérifié (Fig. (4.14)).

A plus basse température, ($T < T_g$), le système vieillit. Nous avons relevé l'autocorrélation (4.24) pour un système de $N = 1000$ spins à température $T = 0.75 T_g$ et un autre de $N = 10000$ spins à température $T = 0.9 T_g$ pour différents temps d'attente t_w en fonction de $\frac{t}{t_w}$. Les résultats sont donnés par Fig. (4.13). Premièrement, nous voyons que plus le temps d'attente t_w est grand, meilleur la loi d'échelle est. Nous voyons aussi que le comportement à temps longs est bien interpolé par les résultats analytiques de Bouchaud *et al* [52, 53, 82] :

$$C(t_w + t, t_w) \simeq \frac{\sin\left(\pi \frac{T}{T_g}\right)}{\pi} \int_{\frac{t}{t_w + t}}^1 du (1 - u)^{\frac{T}{T_g} - 1} u^{-\frac{T}{T_g}} \quad (4.26)$$

avec tout de même un long pré-régime de sous-vieillissement.

L'insert de Fig. (4.13) montre que plus la température est haute, plus le régime pré-asymptotique est long.

Dans cette partie, nous avons mis en évidence que dans la limite $t_w \rightarrow \infty$, le présent modèle devient strictement le BTM : les différences à temps courts sont dues aux états de transition situés à la frontière entre états de surface et pièges. Il faut cependant noter que près de la température critique, des corrections critiques à la loi d'échelle asymptotique $h(\frac{t}{t_w})$ sont aussi présentes dans le modèle original de pièges².

FDR hors équilibre

Une des hypothèses caractéristiques du BTM est la distribution exponentielle des énergies. Etant donné le rapport étroit avec le schéma champ moyen, et plus important, au scénario de 'crise entropique' des verres, il est difficile d'abandonner cette donnée. Par contre, lorsqu'il faut spécifier la manière dont les temps de transitions sont affectés par l'effet d'une

²Ce comportement nous a été communiqué par Eric Bertin.

perturbation (comme un champ magnétique), ou de façon équivalente comment un champ redistribue les états près de l'horizon, il est permis une grande liberté. En effet, étant donnés deux états d'énergies E et E' d'aimantations respectives M et M' , les probabilités de transition peuvent prendre plusieurs formes [53, 87, 88] :

$$P_{esc}(\{M, E\} \rightarrow \{M', E'\}) = e^{-\beta h[-(1-\zeta)M' + \zeta M]} P_0(E \rightarrow E') \quad (4.27)$$

où $P_0(E \rightarrow E')$ est le taux sans champ externe. Pour n'importe quel ζ , le bilan détaillé est vérifié. Ainsi, il est possible de montrer [53, 87, 88] que la réponse est donnée par :

$$\begin{aligned} R(t_w, t_w + t) &= \beta \left(-\zeta \frac{\partial C(t_w, t)}{\partial t} + (1 - \zeta) \frac{\partial C(t_w, t)}{\partial t_w} \right) \\ &\sim \beta \left[\zeta \frac{t_w}{t} + (1 - \zeta) \right] \frac{\partial C(t_w, t)}{\partial t_w} \end{aligned} \quad (4.28)$$

Si $\zeta = 0$, le taux est modifié seulement par la configuration d'arrivée (à première vue un choix bizarre), et le théorème de fluctuation dissipation est vérifié même dans la partie vieillissante. Si $\zeta = 1$, i.e. le taux ne dépend que de la configuration de départ, une FDR non linéaire est observée. La nonlinéarité de la relation ne permet pas d'interpréter la FDR comme résultant d'une température effective (voir [88, 61] pour une discussion détaillée).

En ce qui concerne notre réalisation microscopique, nous n'avons pas la liberté de choisir comment le champ magnétique agit : le seul choix raisonnable est de donner une prescription Métropolis avec un terme additionnel d'interaction magnétique dans l'énergie. En effet, par cohérence, la réponse du système associée à l'observable (4.25) est donnée par :

$$R(t_w, t_w + t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \langle s_i(t) \rangle}{\partial h_i(t_w)} = \int_{t_w}^{t_w+t} dt' \frac{\delta o(t)}{\delta h(t')} \quad (4.29)$$

où $o(t)$ est la valeur par spin prise par l'observable $\mathcal{O}$ (4.25). La réponse intégrée correspondante est alors obtenue numériquement par la donnée de :

$$\chi(t_w, t_w + t) = \frac{1}{N h} \sum_{i=1}^N \xi_i s_i(t_w + t) \quad t > 0 \quad (4.30)$$

dans la limite $h \rightarrow 0$. h est alors un champ extérieur appliqué à partir du temps t_w . Ce champ est couplé aux spins par un terme d'interaction linéaire V_h dans lequel les ξ_i interviennent aussi :

$$E_h = E + V_h \quad ; \quad V_h = -h \sum_{i=1}^N \xi_i s_i \quad (4.31)$$

La dynamique de Métropolis se fait toujours suivant (4.9) mais en considérant l'énergie (4.31).

Fig. (4.14) montre les FDR pour différentes températures au-dessus et en-dessous de la température critique. De façon évidente, il n'y a pas de violation de FDT. Ce résultat n'est pas surprenant en lui-même car le modèle de pièges unidimensionnel présente le même comportement [49]. Monthus [83] a d'ailleurs donné une preuve analytique pour les modèles de pièges d -dimensionnel. D'autre part, il est intéressant de voir que d'autres modèles très différents, dits de 'spins facilités', montrent aussi une absence de violation de FDT [60].

Comme nous allons le voir, ce résultat semble être général dans le cas d'observables qui sont des fonctions *douces* des spins. Pour comprendre cette absence de violation, remarquons que ceci correspond au cas $\zeta = 0$ du BTM, comme si les temps de transition ne

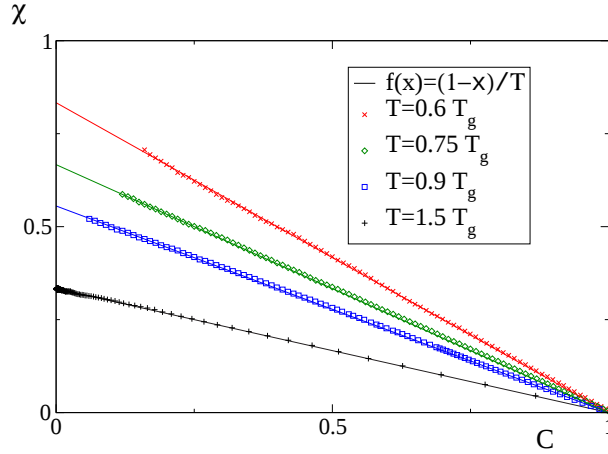


FIG. 4.14 – Relations de fluctuation-dissipation pour différentes valeurs de températures au-dessus et en-dessous de $T_g = 2$. Pour $T = 1.5T_g$, $N = 10000$, $t_w = 1e6$. Pour $T = 0.9T_g$, $N = 10000$, $t_w = 5e6$. Pour $T = 0.6T_g$, $N = 1000$, $t_w = 5e4$.

dépendaient pas de l'état initial, ce qui est pour l'instant assez facile à comprendre. En effet, une déformation douce du green de golf (voir Fig. (4.1)) ne change pas la profondeur des trous par rapport à leur bord : un simple retournement de spin suffit pour sortir du trou mais ne change pas l'énergie magnétique. Ce qui n'est cependant pas clair avec ce raisonnement en termes de BTM, c'est la raison pour laquelle le champ magnétique affecterait seulement le choix du piège d'arrivée. Pour clarifier ceci, nous allons développer un point de vue différent basé sur l'existence des états superficiels contrôlant la distribution des aimantations des pièges.

La distribution des états est la suivante : des pièges sont atteints par des états de surface ; les états profonds visités sont séparés par de nombreux états de surface de courte durée de vie, comme nous l'avons confirmé dans la section précédente. Si le système est perturbé depuis le début par un champ magnétique de faible amplitude, il y a une petite redistribution des énergies, mais les états de surface restent à la surface. Maintenant, considérons le temps qui précède la chute dans un piège profond. La considération ci-dessus implique que le système termine un parcours parmi de nombreux états de surface. Si nous faisons l'hypothèse naturelle que de tels états suivent une distribution de Gibbs même en présence d'un champ, nous pouvons conclure qu'avant le grand saut, la distribution de l'aimantation est donnée par :

$$P_{before}(M) = \frac{\int de P_{sup}(e, M) e^{\beta h M}}{Z_h} = \frac{e^{\beta h M} G(M)}{Z_h} \quad (4.32)$$

où $P_{sup}(e, M)$ est non nulle seulement quand $e > E_h$. Z_h est le facteur de normalisation. Après être tombé dans un piège, nous savons que l'énergie a changé radicalement. Cependant, puisque le processus de chute implique seulement un seul retournement de spin, l'aimantation reste essentiellement inchangée (du moins à l'ordre $O(1/N)$). Ainsi, la distribution de l'aimantation à l'intérieur d'un piège profond à un temps t donné est aussi de la forme :

$$P_t(M) = P_{after}(M) = \frac{e^{\beta h M} G(M)}{Z_h} \quad (4.33)$$

De ces relations découle naturellement FDT puisque :

$$\begin{aligned}
\langle M \rangle &= \frac{\int dM M e^{\beta h M} G(M)}{Z_h} \\
\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 &= \frac{\int dM M^2 e^{\beta h M} G(M)}{Z_h} - \left(\frac{\int dM M e^{\beta h M} G(M)}{Z_h} \right)^2 \\
&= \beta^{-1} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h}
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Insistons sur le fait que cet argument est valable pour n'importe quelle observable qui, au contraire de l'énergie elle-même, est *douce* dans l'espace des phases. Nous entendons par 'douceur' le fait que des configurations qui diffèrent par un nombre non-extensif de spins induisent des différences négligeables pour l'observable. Dans le cas opposé, nous les décrivons comme *rugueuse*. En outre, la démarche que nous avons suivi ici s'applique directement dans le modèle original de Bouchaud avec la prescription d'une décorrélation lente entre les pièges (par exemple une observable se décorrélant d'un facteur $(1 - 1/N)$ à chaque changement d'état). En effet, dans ce modèle il n'y a pas à proprement parler d'états de surface. Cependant, les pièges de haute énergie séparant les pièges de basse énergie sont distribués sous une forme de Gibbs. Ainsi, le raisonnement concernant les états de surface de notre modèle s'appliquent aussi aux états de haute énergie du BTM.

Nous venons donc de voir que FDT dans notre modèle résulte d'un poids de Gibbs des états séparant les pièges profonds. Les tests numériques confirment bien ce scénario :

1. Nous avons relevé l'énergie du dernier état visité par le système avant de tomber dans un piège. Fig. (4.15) montre les résultats avec et sans champ extérieur. Nous pouvons voir l'existence de l'horizon à champ nul $E_h = T_g \ln(a_{min})$ en-dessous duquel le système ne peut pas atteindre de piège par un seul retournement de spin. La comparaison avec Fig. (4.10) confirme que lorsqu'un champ extérieur est appliqué, les états de surface restent essentiellement au niveau de l'horizon sans champ et sont donc toujours distribués avec des poids de Gibbs. En outre, la déviation par rapport à E_h décroît plus vite qu'exponentiellement.
2. Une conséquence directe de notre dérivation concerne la densité de probabilité (4.33) de l'aimantation. Fig. (4.16) confirme la loi d'échelle $P(M) \propto e^{\beta h M}$ pour différentes valeurs de T et petits h .

D'après notre analyse, FDT est vérifié dans le cas d'observables douces. La situation est différente dans le cas d'observables rugueuses. Pour confirmer ce scénario, nous avons regardé la FDR dans le cas d'une observable ressemblant à l'aimantation mais restreinte à être non nulle seulement lorsque l'énergie est plus petite que l'horizon $E_h = -T_g \ln(a_{min})$:

$$\tilde{M}(\{s_i\}) = \begin{cases} \sum_{i=1}^N \xi_i s_i & \text{si } E(\{s_i\}) < E_h \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \tag{4.35}$$

La figure de fluctuation-dissipation est donnée par Fig. (4.17). La violation suit la relation :

$$\tilde{R}(t_w, t) = -\beta \frac{\partial \tilde{C}(t_w, t)}{\partial t} \tag{4.36}$$

ce qui correspond au cas $\zeta = 1$.

Ce résultat n'est pas surprenant : d'un côté, puisque $\tilde{M}$ s'annule dans les états de surface, elle n'affecte pas la dynamique entre les pièges et n'est donc pas sensible au piège d'arrivée. D'un autre côté, la probabilité de s'échapper d'un piège avec $\tilde{M}$ est donnée par :

$$P_{esc}(\tilde{M}, E) \propto e^{\beta(E - h\tilde{M})} \tag{4.37}$$

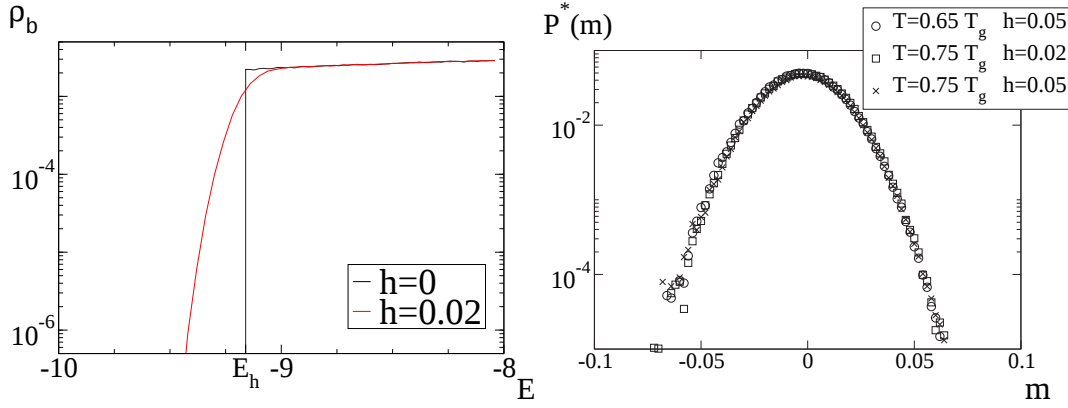


FIG. 4.15 – Densité en énergie des états précédents un piège. $N = 50$. $T = 0.75 T_g$.

FIG. 4.16 – Distribution renormalisée $P^*(M) = e^{-\beta h M} P(M)$ pour différentes valeurs de h et de T . $m = \frac{M}{N}$ est l'aimantation par spin.

de telle façon que $\zeta = 1$.

Il est alors possible de donner une image physique des FDR pour tous les ζ . Considérons une observable A combinaison linéaire de deux observables A_1 rugueuse (comme (4.35)) et A_2 douce :

$$A = \zeta A_1 + (1 - \zeta) A_2 \quad (4.38)$$

et $\langle A_1^2(t_w) \rangle = \langle A_2^2(t_w) \rangle \rightarrow 1$. Par définition A_1 vérifie (4.36) et FDT est vérifié pour A_2 . En utilisant la linéarité et le fait que pour des temps longs les autocorrélations de A_1 et de A_2 respectivement deviennent identiques (comme conséquence de la dynamique du BTM) on retrouve facilement le cas général (4.28). Pour finir sur ces FDR du BTM, il est amusant de remarquer que la FDR (4.28) n'est pas restreinte à des valeurs de ζ comprises entre 0 et 1. Par exemple, nous rapportons en Fig. (4.18) la FDR pour l'observable Parité $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{P}(\{s_i\}) = (-1)^{\frac{1}{2} |\sum_{i=1}^N s_i|} \quad (4.39)$$

Cette observable vérifie la relation (4.28) pour une valeur de ζ égale à 1.75.

Décroissance non exponentielle au-dessus de T_g

Le BTM a aussi des propriétés dynamiques intéressantes à l'équilibre pour des températures plus grandes que la température de transition T_g . Voyons comment ceci apparaît dans notre modèle microscopique. Considérons premièrement la fonction de partition canonique associée au hamiltonien (4.5) :

$$Z \sim \int_{E_{inf}}^0 dE e^{N \ln 2 - (\beta - \beta_g) E} \quad (4.40)$$

où $E_{inf} = -NT_g \ln 2$. Faisons le changement de variables :

$$n(E) = e^{-\beta(E_h - E)} \quad (4.41)$$

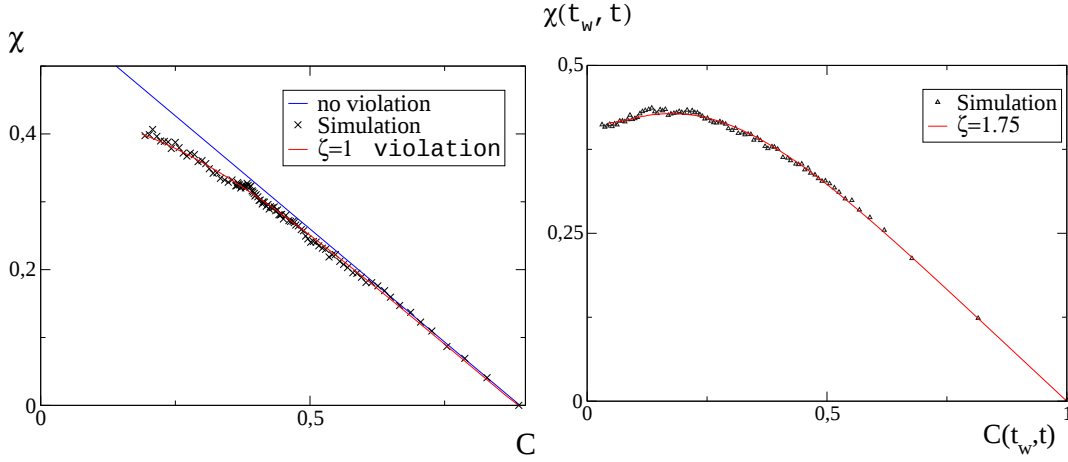
FIG. 4.17 – FDR pour l'observable (4.35). $N = 50$. $T = 1.5$. $t_w = 5e4$. $h = 0.005$.

FIG. 4.18 – FDR dans le cas de la parité.

$n(E)$ représente la probabilité de sortie d'un piège dont l'énergie est E avec la dynamique locale (4.9). Il s'en suit que Z peut s'écrire comme :

$$Z \sim e^{N \ln 2 - (\beta - \beta_g) E_h} \int_{e^{-\frac{T_g}{T} N \ln 2}}^{e^{-\beta E_h}} dn \, n^{\frac{T}{T_g} - 2} \quad (4.42)$$

Puisque E_h est non extensive et ne dépend pas de T , l'énergie libre dans la limite thermodynamique peut s'écrire :

$$\begin{aligned} F &= D - TN \ln 2 \\ D &\equiv -T \ln \left(\int_{2^{-\frac{T_g}{T} N}}^1 dn \, f(n) \right) \\ f(n) &= n^{\frac{T}{T_g} - 2} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Trois cas sont alors à distinguer :

- $T > 2T_g$
Dans ce cas $\int_0^1 dn \, f(n)$ est finie et D a une contribution non-extensive à l'énergie libre.
- $T_g < T < 2T_g$
 $\int_0^1 dn \, f(n)$ est encore finie et D a une contribution non-extensive. Cependant, $f(n)$ est singulière en $n = 0$.
- $T < T_g$
Cette fois-ci, $\int_\epsilon^1 dn \, f(n)$ diverge quand $\epsilon \rightarrow 0$. Par conséquent, D a une contribution extensive à l'énergie libre.

Nous voyons qu'en-dessous de $2T_g$ la mesure d'équilibre est anormalement peuplée par des états caractérisés dynamiquement par des faibles probabilités de sortie $n(E) \sim 0$. Ceci est l'origine des hétérogénéités temporelles dans la dynamique et coïncide naturellement avec la divergence de la variance des temps de piégeage (4.15). Au fur et à mesure que T diminue, l'effet des états de faible n dans la dynamique est de plus en plus prononcé [86, 82, 67, 47], et le temps d'équilibration diverge finalement à T_g lorsque ces derniers deviennent dominants. La Fig. (4.19) permet de comparer la fonction d'autocorrélation de spins à $T = \frac{3}{2}T_g$ et à

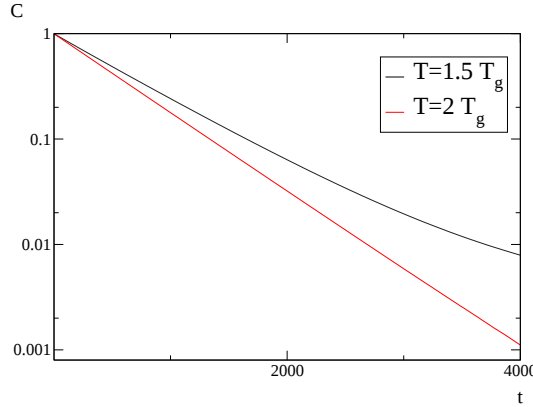


FIG. 4.19 – Relaxation à l'équilibre au-dessus de T_g . $N = 1000$.

$T = 2T_g$. Bien qu'il n'y ait pas de vieillissement et que le système équilibre, la fonction de corrélation a une longue queue dans le premier cas qui est absente dans le second.

Autres distributions de pièges

Le NPP peut aussi être utilisé comme base microscopique pour des modèles de pièges modifiés. On peut en effet considérer les énergies suivantes :

$$E^{\hat{\zeta}} = \left| \sum_i a_i s_i \right|^{-(1+\hat{\zeta})} \quad (4.44)$$

pour $\hat{\zeta} > 0$, correspondant à des fonctions de coût non extensives. Une dynamique Métropolis avec ces énergies donne aussi des résultats intéressants mais la dynamique *n'est pas* du type pièges. En effet, en reconsidérant les arguments ci-dessus, nous trouvons des temps de piégeages distribués suivant $P(\tau) \propto \tau^{-1} [\ln(\tau/\tau_0)]^{-(1+\hat{\zeta})}$. Ce cas a aussi été discuté par Bouchaud [52] : pour toute température, on observe des pièges qui deviennent systématiquement plus grands au fur et à mesure que le temps passe.

4.3 Approximations diophantines et modèles de pièges

La théorie des nombres est une mine d'or pour les modèles de verres sans désordre gelé. La raison principale étant qu'un programme ayant des difficultés à trouver la bonne solution d'un problème est bloqué à cause d'un grand nombre d'essais qui sont bons mais n'améliore pas la situation. Ces essais se comportent alors comme des nombres quasiment aléatoires. Plus précisément, considérons le problème des approximations diophantines : il est demandé par exemple de trouver des entiers n et m de telle sorte que $n\sqrt{2} + m\sqrt{3}$ est aussi proche que possible d'un entier pair non nul. Nous pouvons formaliser ce problème en disant que nous voulons minimiser une énergie s'écrivant :

$$E = \ln\{F(n\sqrt{2} + m\sqrt{3} + 2)\} \quad (4.45)$$

où $F(x)$ est la distance séparant x et son plus proche entier pair. On peut alors voir ce problème d'optimisation comme un processus de diffusion d'une particule dans un réseau

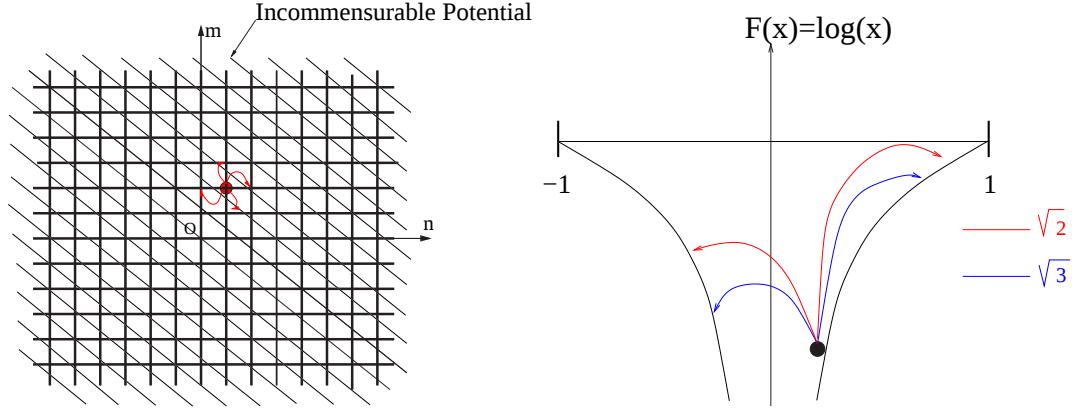


FIG. 4.20 – Diffusion 2d avec des pas irrationnels. Les diagonales représentent les valeurs entières de $n\sqrt{2} + m\sqrt{3} = \text{pair}$, pour lesquelles l'énergie est $-\infty$.

FIG. 4.21 – Diffusion 1d avec des pas irrationnels.

bidimensionnel (n, m) avec un potentiel périodique (4.45) incommensurable avec le réseau (Fig. 4.20) de telle façon que les minima $E = -\infty$ sont toujours manqués.

Fig. (4.21) montre le même problème pour lequel nous avons représenté cette fois-ci une seule période du potentiel et supposé des conditions de bords périodiques. Dans cette représentation, *chaque déplacement est un grand pas* car la particule va toujours au-delà des bords. Cette seconde représentation suggère qu'une succession de petits déplacements génèrent un nombre (pseudo) aléatoire dans l'intervalle $[-1, 1]$: nous pouvons donc nous attendre à avoir une mesure plate des états lorsque nous nous rapprochons de la situation optimale. Comme $E = \ln |x|$, la densité d'états en énergie E est exponentielle puisque :

$$P(E) = \left| \frac{dx}{dE} \right| \sim e^E \quad (4.46)$$

ce que nous avons vérifié. Maintenant, étant donné un point (n, m) constituant une bonne approximation d'un entier pair, le déplacement vers les plus proches voisins comme $(n+1, m)$ ou $(n, m+1)$ détruira complètement l'approximation puisque ce déplacement nécessite des sauts de $\sqrt{2} - 1$ ou $\sqrt{3} - 1$. On a alors un horizon au même titre que le modèle de pièges : il est nécessaire de réémerger pour obtenir un état plus profond.

Nous pouvons faire maintenant l'hypothèse que, globalement, le processus de diffusion présenté suivant Fig. (4.20) est une diffusion dans un réseau avec des temps de piègeage distribués suivant une loi de Lévy. Nous savons que pour de tels problèmes, les retours sont relativement fréquents à deux dimensions ce qui changent quelque peu le comportement [84]. De façon à rendre la comparaison plus simple, nous pouvons regarder la simulation à trois dimension $E = \ln F(p\sqrt{2} + q\sqrt{3} + r\sqrt{5} + \frac{1}{2})$. Fig. (4.22) montre le comportement de l'énergie, comportement exactement identique au BTM, le vol de Lévy donnant lieu à un processus de sous-diffusion [84]. En outre, nous avons vérifié que nous retrouvons les résultats du NPP concernant les distributions de temps de piègeage statique (4.15) et dynamique (4.19).

Insistons une nouvelle fois sur l'importance de l'horizon dans la dynamique, considérons le potentiel $\ln |x|$ avec $x \in [-1, 1]$ et une dynamique de Métropolis pour laquelle les configurations sont tirées au hasard dans l'intervalle $[-1, 1]$. On peut alors vérifier facilement que la dynamique est *complètement différente* de celle du BTM, du moins si $T = 0$. En effet, à cette

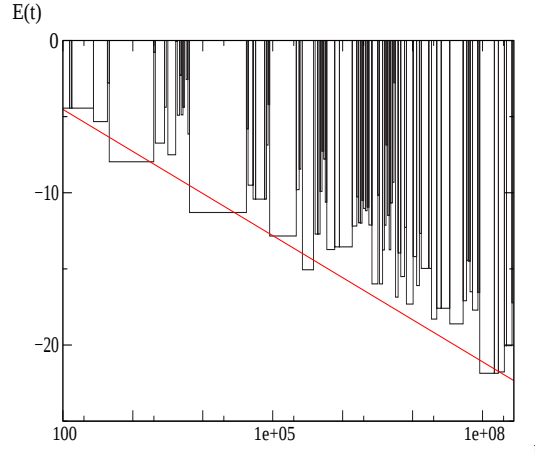


FIG. 4.22 – Approximation de rationnels suivant $p\sqrt{2} + q\sqrt{3} + r\sqrt{5}$, avec p, q, r entiers (voir texte)

température le BTM se trouve coincé dans le premier piège que le système rencontre alors qu'ici il suffit d'attendre assez longtemps pour qu'une nouvelle configuration proposée ait une énergie suffisamment basse. D'un côté nous avons une dynamique à la Bouchaud pour les sauts irrationnels et de l'autre une diffusion qui ressemble plus au modèle de Barrat-Mézard [43] si tous les états sont accessibles. Dans le cas de sauts très petits nous pouvons nous attendre à un 'crossover' entre ces deux régimes [48]. Nous étudierons explicitement ce cas dans le chapitre suivant.

4.4 Philosophie du BTM

4.4.1 Comportement de pièges

Dans ce chapitre nous avons vu deux réalisations microscopiques pour lesquelles le comportement de pièges émerge pour des temps longs. Ces réalisations nous ont permis de tirer des conclusions sur les ingrédients nécessaires pour avoir de tels comportements. Une première condition évidente est l'existence d'états avec une large distribution de temps de piègeage. Ceci, cependant, ne suffit pas. Comme il a été mentionné déjà plusieurs fois, le BTM est tel qu'une fois que le système a émergé d'un piège jusqu'au niveau de l'horizon, il est complètement réinitialisé. En outre, il est réversible dans le sens qu'étant donné un intervalle de temps délimitant deux sorties, l'histoire est équiprobable par rapport à un renversement du temps. L'irréversibilité apparaît seulement parce que le temps passé proche de l'horizon devient progressivement négligeable devant les temps de piègeage, bien qu'il ne soit jamais nul.

La question qu'on peut se poser est alors dans quelles circonstances peut-on avoir un niveau d'horizon avec une telle propriété ? Si nous considérons le NPP comme un problème de minimiser la hauteur d'une boîte contenant deux piles de pièces d'épaisseurs aléatoires, nous avons vu que l'horizon apparaît lorsque l'optimisation est de l'ordre de la plus petite pièce. Ensuite, n'importe quel déplacement de pièce amènera le système proche de l'horizon, et des améliorations ne résulteront qu'après des réarrangements globaux. On a alors un 'crossover' entre une dynamique aux temps courts irréversible où les changements sont globalement

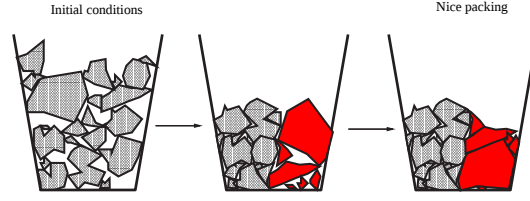


FIG. 4.23 – *Compaction rapide (gauche) aux premiers stades, puis réarrangements globaux aux étapes finales, comme dans le BTM (droite).*

favorables et une dynamique de réinitialisation pour des temps plus longs. Nous pouvons a priori conjecturer que ceci est général pour les problèmes d'empilement. Remarquons aussi dès maintenant que l'horizon dépend directement du nombre de pièces qu'on peut changer à chaque temps. Plus ce nombre est grand, plus l'horizon sera long à atteindre (voir chapitre suivant).

Les systèmes vitreux et la matière granulaire ont sans aucun doute un premier régime de compaction irréversible, pendant lequel un piège (quelque soit sa définition) est probablement suivi d'un piège plus profond. Ainsi, on peut envisager que le comportement du type modèle de pièges arrive pour des temps très longs, lorsque chaque amélioration demande une réorganisation complète : ceci arrive sûrement au niveau de l'optimisation de quelques grains (Fig. 4.23).

4.4.2 FDR

Comme il est dit en introduction de ce chapitre, les FDR sont devenues une étude naturelle dans les systèmes vieillissants et sont sûrement un moyen de discriminer les différents types de dynamique rencontrée. Une conclusion essentielle de ce chapitre est justement qu'une réalisation microscopique du modèle de pièges conduit naturellement à une non-violation de FDT pour des observables douces telles que l'aimantation dans un système magnétique. Bien que nous avons montré ce résultat pour un modèle spécifique, notre argument semble être assez robuste et rationalise les résultats de [49, 83] : l'énergie est rugueuse donc la sortie d'un piège nécessite seulement quelques pas, distance sur laquelle une observable douce n'a pas le temps de varier. Seules des trajectoires avec beaucoup de pas font changer l'observable et ceci ne se produit que près de l'horizon pour lequel le système est localement à l'équilibre. Il est intéressant de noter que notre notion de *douceur* est équivalente à la notion de *neutralité* au sens de Sollich [88] : l'observable est décorrélée de l'énergie, elle n'est pas ce qui est 'compactifié'.

Une fois de plus, nous avons confirmation que le comportement de pièges ne peut se produire que pour des temps très longs. En effet, dans l'exemple des verres de spins champ moyen, même dans le régime activé du vieillissement, il y a violation de fluctuation dissipation avec une température effective bien définie. Ceci veut dire que si un comportement de type pièges est attendu, il ne se produira qu'après la thermalisation de la température effective et ceci arrive pour des énergies d'ordre N au-dessus de l'énergie d'équilibre. Il serait intéressant de comprendre ce 'crossover' plus en détails car il peut être pertinent pour les problèmes de dimension finie.

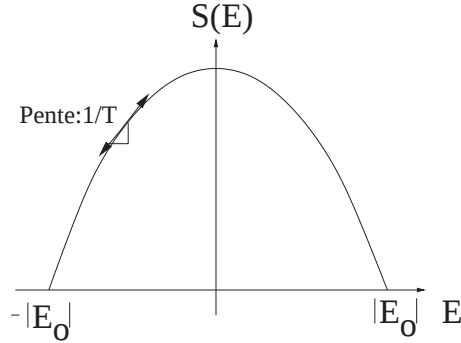


FIG. 4.24 – Courbe (parabole inversée) de l'entropie en fonction de l'énergie dans le REM. Lorsque $T > T_g$, l'énergie moyenne est donnée par le point où la pente de $S(E)$ vaut $1/T$. A mesure que T diminue, l'énergie moyenne glisse doucement le long de cette courbe. Pour $T < T_g$, le système se gèle dans l'état fondamental d'énergie E_0 pour laquelle l'entropie s'annule.

4.5 Comportement de pièges dans le REM

Dans ce paragraphe, nous essayons de comprendre physiquement quelles sont les raisons qui conduisent le modèle d'énergies aléatoires (REM) à un comportement de pièges à basse température. Notre étude montre alors que ce comportement est en fait très générique pour ce modèle et ceci à toute température. Une conséquence de ce résultat est qu'il semble compromis d'envisager une dynamique microscopique pour le REM.

4.5.1 L'horizon

Le REM est un modèle d'espace des phases où seule une information sur la distribution statique des énergies est donnée. Pour comprendre le comportement du modèle, une étude microcanonique doit être menée. Ainsi, le système peut se définir comme la donnée de 2^N états ($N \rightarrow \infty$) dont les énergies sont distribuées suivant une gaussienne :

$$\rho(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi NJ^2}} e^{-\frac{E^2}{2NJ^2}} \quad (4.47)$$

où J fixe l'échelle des énergies d'interaction magnétique. En effet, ce système est né d'une volonté de simplifier l'étude du p -spins (chapitre **Transition**) en prenant la limite $p \rightarrow \infty$ avant $N \rightarrow \infty$ afin de s'affranchir du caractère hamiltonien du système.

D'un point de vue thermodynamique, le système est dans une phase désordonnée à haute température. L'entropie du système est non nulle. En-dessous de la température $T_g = J/\sqrt{2\ln 2}$, le système se gèle dans l'état fondamental $E_0 = -NJ\sqrt{2\ln 2}$. L'entropie s'annule. La transition est du second ordre car l'approche du fondamental se fait continûment le long de la courbe *Entropie vs Energie* (voir figure(4.24)).

Il est alors intéressant de se demander quelle est la dynamique de descente en énergie lors d'une trempe à basse température. Les auteurs de [46] ont montré, après avoir associé à chaque état du système une configuration de spins indépendante de l'énergie de l'état considéré, qu'une dynamique microscopique purement activée, pour des temps très longs, donnait un comportement identique au BTM. Se pose alors une question fondamentale : quel est l'horizon de ce système ?

Pour répondre à cette question, nous pouvons utiliser le fait que la dynamique considérée dans [46] n'implique qu'un seul retournement de spins. Ainsi, à partir de chaque état, N états sont possibles pour s'échapper. Comme les énergies sont indépendantes et distribuées suivant une gaussienne (4.47), il est possible de donner la valeur la plus probable du minimum de ces N énergies en utilisant des arguments de statistique des valeurs extrêmes [72, 54]. En utilisant les résultats de [54], nous pouvons affirmer que cette valeur vaut :

$$E_{min} \sim -J\sqrt{N \ln N} \quad (4.48)$$

Les fluctuations relatives autour de cette valeur sont d'ordre $|E - E_{min}|/|E_{min}| \sim 1/\log N$. Ainsi, comme à basse température l'énergie moyenne du système vaut $-J^2 N/T$ (c'est-à-dire est d'ordre N), E_{min} est un horizon pour le système. Cet horizon³ est *indépendant du choix de la dynamique* à partir du moment que celle-ci concerne un nombre fini de retournements de spins. Le choix d'une dynamique purement activée ne semble donc pas restrictive en ce qui concerne le comportement du REM aux temps longs.

4.5.2 Quelle dynamique pour le REM ?

Le REM est très intéressant du point de vue thermodynamique. Mais qu'en est-il du point de vue de la dynamique ? Puisqu'à toute température finie, l'énergie moyenne du système échelle comme N , nous pouvons utiliser le raisonnement précédent pour étudier la dynamique de la phase haute température. Incidemment, à toute température finie, une dynamique *quelconque* d'un seul retournement de spin peut être très bien modélisée par une dynamique purement activée. Se pose alors un grave problème. En, effet, lors d'une dynamique purement activée, le temps de vie d'un état est typiquement donné par :

$$\tau(E) = \tau_0 e^{-\beta E} \quad (4.49)$$

où τ_0 est une échelle de temps microscopique. A température T , l'énergie moyenne du système vaut $\langle E \rangle = -J^2 N/T$. Ainsi, si le système est équilibré à une température T et si nous le refroidissons (ou chauffons) un peu, le temps caractéristique d'évolution sera d'ordre :

$$\tau_0 e^{\frac{J^2}{T^2} N} \quad (4.50)$$

Le temps est exponentiellement grand dans la taille du système. Ainsi, dans la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) une dynamique impliquant un nombre fini de retournement de spins conduit le REM à un régime hors équilibre à toute température. Par conséquent, seule une dynamique globale peut être appliquée au REM pour qu'il devienne ergodique à haute température.

Considérons alors une telle dynamique et estimons le temps nécessaire pour sortir d'un état (d'équilibre) d'énergie $\sim -N/T$. D'après [54], l'énergie du minimum de M énergies tirées suivant (4.47) est typiquement donnée par :

$$E_M \sim -J\sqrt{N \ln M} \quad (4.51)$$

Ainsi, le temps nécessaire doit être au moins tel que cette énergie soit de l'ordre de $-NJ^2/T$ (l'énergie moyenne) au bout de M essais. Il faut donc attendre de l'ordre de

$$M \sim e^{\frac{J\sqrt{N}}{T}} \quad (4.52)$$

³Retenons ici que les arguments de statistique extrême [54] semblent être un outil performant pour déterminer l'horizon d'un système.

essais pour sortir de l'état ! Une nouvelle fois, le REM est dans une situation hors équilibre.

Il semble donc que pour toute dynamique usuelle de type Métropolis ou Glauber, toute réalisation microscopique du REM laisse le système loin de l'équilibre et ceci à toute température finie. Par conséquent, d'un point de vue dynamique, le REM ne semble pas être un bon candidat pour comprendre les phénomènes de transition vitreuse. Cependant, nous verrons dans le dernier chapitre qu'il est possible d'envisager une dynamique pour un système comportant des énergies aléatoires distribuées suivant une gaussienne en s'affranchissant du caractère totalement aléatoire concernant le choix de deux énergies successives lors de l'évolution temporelle.

4.5.3 Réalisations du REM

L'intérêt du REM est tout de même manifeste et la question de la réalisation macroscopique d'un tel modèle est un challenge du point de vue des simulations numériques. Le problème principal est de pouvoir garder 2^N nombres (correspondant aux énergies) en mémoire !

A ce sujet, les modèles de collections de BTM (voir plus loin) sont très intéressants. En effet, imaginons une collection de N cellules de type BTM, chacune d'entre elles constituée de K spins. Si maintenant nous imposons une dynamique de retournement de N spins pris chacun dans une cellule alors l'énergie engendrée est la somme de N variables aléatoires indépendantes de même densité de probabilité. Cette énergie tend donc vers une variable aléatoire gaussienne de variance proportionnelle à N . Nous venons donc de réaliser, à l'aide de $N \times K$ nombres, un REM à taille finie avec K^N états ! L'approximation est d'autant meilleur que N est grand, K ne jouant qu'un rôle marginal pour toute valeur plus grande que 30 [80].

4.6 Variations sur le BTM

La fin de ce chapitre est consacrée à la réalisation microscopique de modèles construits sur une base identique au hamiltonien (4.5) avec la dynamique (4.9). L'objectif principal est de faire une étude aussi exhaustive que possible des différentes variations du BTM. Plusieurs raisons sous-tendent cette volonté. D'un côté, les différents modèles inspirés du BTM, comme le modèle de pièges à plusieurs niveaux [53], sont susceptibles d'induire de nouveaux problèmes d'optimisation. D'un autre côté, la réalisation microscopique de différentes variations du BTM permet, comme dans le cas du NPP, de comprendre les réponses et les FDR de ces systèmes.

4.6.1 Modèles de collections de BTM

Une critique à l'encontre du BTM est souvent le caractère irréaliste des sauts en énergie. Cependant, une étude des liquides de Lennard-Jones [67] a révélé le côté tangible d'une telle modélisation. Précédant cette observation, Vincent et Bouchaud [56] avaient proposé, pour les verres de spins, de penser le vieillissement comme une collection de systèmes mésoscopiques du type BTM. Dans ce cas, les variations d'énergies du système restent d'ordre L^3 si L est la taille de ces sous-systèmes. Ainsi, le système ne présente pas de grands sauts d'énergies. Il est intéressant alors de se demander dans le cadre du NPP quel problème d'optimisation réalise microscopiquement un tel système.

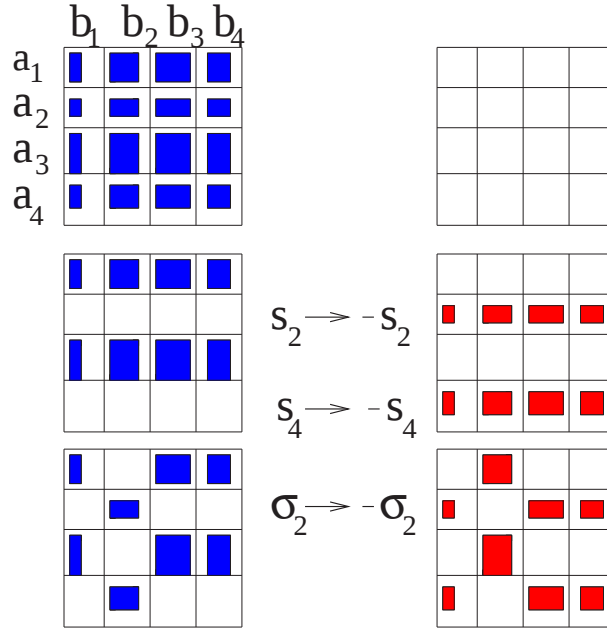


FIG. 4.25 – Problème d’optimisation correspondant à un système comportant deux parties de type BTM sans interaction. Le jeu consiste à répartir les petits carrés en deux ensembles tels que la somme des surfaces des carrés à l’intérieur de chacun soit la plus proche possible.

Imaginons donc que le système que l’on veuille reproduire est un système de N particules constituées de $\frac{N}{M}$ cellules élémentaires correspondant à des BTM qui n’interagissent pas. L’énergie correspondant à la réalisation microscopique de ce modèle vaut :

$$E = \sum_{i=1}^{\frac{N}{M}} \ln \left| \sum_{k=1}^M a_k^i s_k^i \right| = \ln \left(\prod_{i=1}^{\frac{N}{M}} \left| \sum_{k=1}^M a_k^i s_k^i \right| \right) \quad (4.53)$$

Lorsque $N = M$, le problème d’optimisation correspondant est celui de l’empilement de pièces dans une boîte (voir plus haut). Ce problème est intrinsèquement unidimensionnel dans le sens que les degrés de liberté ne concernent qu’une dimension des pièces. Prenons alors le cas $M = \frac{N}{2}$. L’énergie suivant Mertens s’écrit alors

$$\left| \sum_{i=1}^{i=M} a_i s_i \right| \left| \sum_{i=1}^{i=M} b_i \sigma_i \right|, \quad (4.54)$$

ce qui correspond cette fois à un problème d’optimisation concernant des objets bidimensionnels. En effet, cette dernière énergie s’écrit $\left| \sum_{i,j} a_i b_j s_i \sigma_j \right|$. Les objets en question sont des carrés de cotés a_i et b_j au nombre de $\left(\frac{N}{2}\right)^2$. Le jeu consiste alors à minimiser la différence de surface coloriée de deux carrés de surface $\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_i \times \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} b_j$ avec le jeu de petits carrés mentionné (Fig. (4.25)).

Une dynamique à un seul retournement de spins induit alors des règles de jeu assez subtiles faisant penser à un casse-tête chinois (la notion de casse-tête étant réellement pertinente dans le cas de problèmes NP-complets). Ces règles sont résumées dans Fig. (4.25).

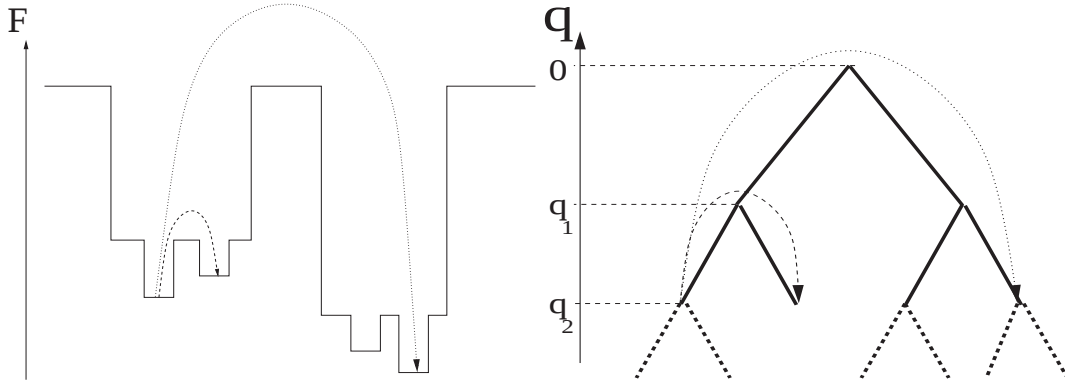


FIG. 4.26 – *Vision schématique du modèle de pièges à deux niveaux. À gauche, schéma de la structure de l'espace des phases où nous voyons 'des pièges dans des pièges'. À droite, les traits en pointillés épais montrent que plusieurs niveaux peuvent être définis. Les noeuds de l'arbre correspondent aux ancêtres des états qui sont liés en-dessous (la génération) (figure adaptée de [53]).*

Le principe est tout de même simple : un retournement du spin s_i (respectivement σ_j) correspondant à un a_i (b_j , resp.) échange les lignes (les colonnes, resp.) dont un côté est a_i (b_j , resp.). Remarquons alors que dans le même esprit que la diffusion avec des sauts irrationnels, le jeu revient rapidement à échanger de façon aléatoire un certain nombre de carrés (dans la figure, au plus quatre).

Dans le cas de M quelconque, il est assez facile d'étendre ce jeu à des problèmes d'optimisation concernant des objets de dimension M avec une dynamique assez complexe d'échanges.

Pour revenir aux phénomènes de vieillissement de Vincent et Bouchaud, si le nombre de cellules élémentaires est grand, l'énergie est effectivement douce. Cependant, une collection de BTM ayant une FDR intrinsèque non violée dans le régime de vieillissement conduit à un système pour lequel FDT est aussi vérifié par linéarité de la fonction de réponse.

4.6.2 Modèle de pièges à plusieurs niveaux

Les modèles de champ moyen des verres de spins donnent une distribution exponentielle des états métastables. Ainsi, il est difficile d'abandonner ce caractère pour les modèles d'espaces de phase. Au contraire, cette notion a été élargie à une généralisation du modèle de pièges prenant en compte 'des pièges dans les pièges' en gardant un caractère exponentiel de la distribution locale en énergie [53]. Pourquoi une telle généralisation ? En fait, l'interprétation de la brisure pleine des répliques [81] (exemple : le modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK) [81]) suggère que la distribution des énergies libres F restent localement exponentielle. En termes de modèles de pièges, l'exponentielle est alors caractérisée par le facteur de recouvrement q (corrélation statique) des états.

$$\rho_q(F) = e^{-x(q)(F^* - F)/T} \quad (4.55)$$

où F^* est l'énergie du piège ancêtre donnant lieu à une nouvelle génération de pièges (voir Fig. (4.26)). En supposant comme pour le BTM une probabilité de sortie des états qui ne dépend que de la profondeur des énergies libres prises par rapport à l'ancêtre alors ce modèle correspond à une structure en arbre [53] pour laquelle la notion d'ultramétrie apparaît

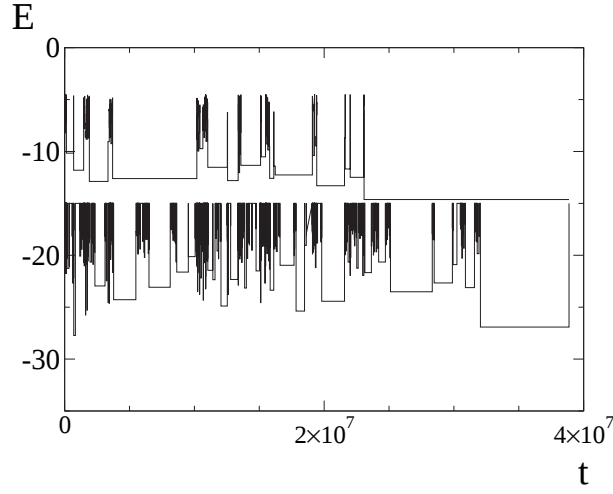


FIG. 4.27 – *Modèle de pièges à deux niveaux. Les caractéristiques de l'énergie (4.56) sont : $N = 100$, $T_g^{(1)} = 2$, $T_g^{(2)} = 1.8$ et $\epsilon = 0.1$ (voir texte). $T = 1.1$. Sont représentées séparément les évolutions temporelles des deux termes constituant l'énergie. Le premier terme est donné par la courbe du haut et le second par la courbe du bas. Pour une meilleur lisibilité, la courbe du haut a été décalée vers le haut par une translation de +5.5 en énergie et la courbe du bas par -5.5. Cette figure montre clairement le phénomène de 'pièges dans les pièges'.*

comme dans le modèle (SK). Cette généralisation est intéressante car elle permet de mettre en évidence deux types de dynamiques : une dynamique stationnaire entre les pièges les plus profonds dans la hiérarchie (ceux dont le recouvrement est grand) et une dynamique lente de vieillissement qui concerne le passage entre les structures principales de l'arbre. Par conséquent, ce modèle donne un comportement avec plusieurs échelles de temps dont les plus petites sont à l'équilibre. Une propriété intéressante est qu'il donne une image très simple et intuitive du spectaculaire phénomène de rajeunissement et de mémoire [57].

En modifiant le NPP, nous avons pu réaliser une caricature de ces modèles pour pouvoir en étudier la réponse. Nous allons seulement décrire la réalisation d'un modèle typique d'un système à deux niveaux sachant que la généralisation à plusieurs niveaux est immédiate. L'idée de la construction est la même de celle de la construction en arbre, i.e. au fur et à mesure qu'on descend dans l'arbre, des structures de plus en plus fines sont révélées. Ainsi, considérons l'énergie suivante :

$$E = T_g^{(1)} \ln \left| \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_i s_i \right| + T_g^{(2)} \ln \left| \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_i s_i + \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} b_i \sigma_i \right| \quad (4.56)$$

avec $a_i \in [0, 1]$ et $b_i \in [0, \epsilon]$ où $\epsilon \ll 1$. Essayons alors de comprendre la dynamique de ce système si l'on suppose qu'à chaque pas de temps un seul spin est retourné, ce spin pouvant être soit un s_i lié à un a_i , soit un σ_i lié à un b_i . Imaginons par exemple que $\left| \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_i s_i \right|$ soit très bien optimisé, c'est-à-dire que cette valeur est très proche de zéro. Alors, les retournements des s_i seront soumis à de très grands sauts en énergies pour ce terme. Du point de vue des a_i , le système se comporte comme un BTM à un seul niveau. D'un autre côté, il n'y a aucune raison pour que le terme $\left| \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_i s_i + \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} b_i \sigma_i \right|$ soit bien optimisé car les b_i interviennent. Ainsi, les σ_i sont susceptibles d'évoluer jusqu'à une bonne

optimisation de ce terme, se comportant alors à son tour comme un piège. Ce mécanisme conduit donc à 'des pièges dans les pièges' puisque les s_i sont gelés. Supposons maintenant que le premier terme de l'énergie ne soit pas bien optimisé. Comme il y a une séparation d'échelle entre les a_i et les b_i puisque $\max(b_i) \ll \max(a_i)$, il est peu probable que le deuxième terme s'optimise en premier. Il faut donc attendre que le premier tombe dans un nouveau piège pour avoir une nouvelle dynamique de piège pour les b_i . Ceci est tout à fait dans l'esprit du modèle de pièges à deux niveaux. Pour confirmer le comportement de 'pièges dans les pièges', nous donnons en exemple la figure (4.27) montrant l'évolution temporelle d'une réalisation unique d'un tel modèle.

De la même façon que dans le BTM, nous avons étudié la réponse d'un tel système. Nous avons alors obtenu une nouvelle fois une absence de violation de FDT (quelque soient $T_g^{(1)}$ et $T_g^{(2)}$). Les raisons sont évidemment similaires à celle du modèle à un seul niveau et nous pouvons conjecturer que ce comportement est vrai pour tout système à niveaux multiples : pour ces modèles, nous pouvons supposer que l'aimantation évolue de la même façon que dans le modèle à un seul niveau, c'est-à-dire par intermittence. Par ailleurs, la présence du champ ne devrait pas non plus modifier la caractéristique des états (états de surface ou pièges, relativement à un autre état). Ainsi, lorsque la partie de l'aimantation non gelée évolue, elle évolue comme si elle était à l'équilibre, en présence ou non de champ extérieur.

Chapitre 5

Réalisations microscopiques du modèle de Barrat-Mézard à température finie

Nous venons de voir que le NPP permettait une étude microscopique du modèle de pièges activé (BTM), avec la conséquence essentielle que ce modèle ne présente pas de violation de FDT dans le régime de vieillissement. Une question naturelle est alors de se demander s'il est possible de construire un modèle d'espace des phases totalement connecté présentant la particularité d'avoir une violation linéaire du FDT faisant ainsi apparaître une température effective bien définie. Pour essayer de répondre à cette question, nous allons étudier via le NPP un autre modèle d'espace des phases dont la dynamique est assez bien connue : le BMM.

5.1 Le modèle de Barrat-Mézard (BMM)

...du point de vue de l'espace des phases

Le modèle en question, communément appelé le modèle de Barrat-Mézard en honneur à ses initiateurs, ressemble beaucoup au BTM. La seule, mais essentielle, différence est que la dynamique n'est pas *purement* activée, c'est à dire que les taux de transitions (voir chapitre **Transition**) dépendent de la différence d'énergie entre les états de départ et les états d'arrivée. Ces taux sont habituellement ceux d'une dynamique de Glauber :

$$W(E \rightarrow E') = \frac{1}{1 + e^{(E-E')/T}} \quad (5.1)$$

ou ceux de Métropolis.

L'espace des phases est toujours un espace totalement connecté. La dynamique de ce modèle consiste alors à tirer avec une probabilité plate à chaque temps microscopique une énergie distribuée exponentiellement :

$$\rho(E) = \beta_g e^{\beta_g E} \quad (5.2)$$

et de considérer les taux d'acceptation (5.1). Barrat et Mézard [43] ont résolu la dynamique de ce système à température nulle. Dans ce cas, la dynamique, à l'opposé du BTM, n'est

pas bloquée dans sa recherche du niveau fondamental car les sauts négatifs d'énergie sans franchir de barrière d'énergie sont toujours admis. La notion d'horizon disparaît dans ce modèle.

Il faut alors comprendre que le vieillissement résulte de la difficulté de trouver des énergies de plus en plus basses sachant que l'on choisit à chaque fois des énergies parmi *l'ensemble du spectre*. Une propriété séduisante de cette dynamique à température nulle est qu'elle ne dépend pas de la densité en énergie des états. En effet, puisque le temps de piègeage est donné par $\tau^{-1} = \int_{-\infty}^E \rho(E)$, la relation de réciprocité $\psi(\tau) = \rho(E) \left| \frac{\partial E}{\partial \tau} \right|$ entre la distribution $\psi(\tau)$ de ces temps et la densité en énergie donne $\psi(\tau) = \frac{1}{\tau^2} \Theta(\tau - 1)$, indépendamment du choix de la distribution des énergies. Il est alors possible de montrer [43, 48] que les lois de vieillissement ne dépendent pas non plus de cette donnée. Dans le cas *a priori* arbitraire (comme originalement dans le BTM) d'une décorrélation totale entre les états successivement visités par le système, les lois de vieillissement sont données dans la limite usuelle des grands temps par :

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{t_w}{t_w + t} \quad (5.3)$$

Un moyen de différencier les comportements du BMM de ceux du BTM est de regarder l'allure de l'évolution de l'énergie pour une unique réalisation. En effet, nous avons déjà mentionné le paradoxe apparent de réversibilité dans le BTM. Pour le BMM à basse température $T < T_g/2$ (voir plus loin pour l'explication de $T_g/2$), le comportement est violemment irréversible comme on peut le voir sur Fig. (5.3). Pour une échelle de temps linéaire, seul un piège apparaît à température nulle ce qui est loin d'être le comportement observé dans le BTM.

Comme toujours, les physiciens se sont intéressés à la réponse de ce système. Il s'est alors avéré qu'il était possible de calculer exactement [88] la relation entre la corrélation et la réponse en gardant exactement la même forme de taux de transition en présence d'un champ extérieur¹ :

$$W(E, M \rightarrow E', M') = \frac{1}{1 + e^{(E - hM - (E' - hM'))/T}} \quad (5.4)$$

Pour une dynamique Métropolis, nous aurons :

$$P(E \rightarrow E') = \begin{cases} e^{-\beta(E' - hM' - (E - hM))} & \text{si } E' - hM' > E - hM \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.5)$$

A température nulle, ces deux dynamiques sont identiques et Sollich a montré [88] que la relation de fluctuation dissipation est *non linéaire* à cette température² :

$$R(t_w, t_w + t) = -\frac{2}{T_g} \frac{\partial C(t_w, t_w + t)}{\partial t} \quad (5.6)$$

Par précipitation, nous pourrions croire que cette relation est typique d'une relation de FDT définissant une température $2/T_g$. Il en serait le cas si la dérivée dans le membre de droite était une dérivée par rapport à t_w . Malheureusement, ça ne l'est pas.

Nous allons montrer dans cette partie comment réaliser une version microscopique de ce modèle afin de comprendre le comportement à température finie. D'autre part, nous avons

¹Rappelons que le choix d'une décorrélation totale implique que ces taux de transitions s'appliquent à une dynamique où M' est choisie indépendamment de M .

²Il est intéressant de remarquer que cette relation est identique à la relation du BTM dans le cas d'une observable totalement rugueuse à température $T_g/2$.

l'occasion d'étudier les comportements d'un système ayant les propriétés énergétiques sans champ extérieur du BMM avec des lois différentes de décorrélation des observables. Ce dernier point est d'une importance capitale car autant la décorrélation totale dans le modèle de Bouchaud est finalement intuitive, autant ici *elle ne l'est pas du tout*. Un esprit averti pourrait penser à une certaine redondance avec le travail de Eric Bertin [48] dédié au modèle de Barrat Mézard à température finie. Avec plus de sagesse, il remarquera alors que ce travail s'inscrit dans le cadre d'une décorrélation totale entre les pièges et que la question de la réponse n'est pas abordée. Cependant, ce travail remarquable a permis de déboucher sur une collaboration fructueuse permettant de comprendre les comportements observés dans différents modèles microscopiques liés au NPP [74]. *Vice versa*, la réalisation microscopique de tels modèles permet d'affiner la compréhension physique que l'on a des modèles d'espace de phase totalement connecté mais aussi d'en montrer les limitations. A cette fin, nous verrons que les résultats de ce chapitre débouchent sur une vision plus locale des modèles d'énergies aléatoires (chapitre suivant) permettant d'affiner notre compréhension des dynamiques dans l'espace des phases.

...du point de vue du NPP

Nous partons exactement du même hamiltonien que dans le chapitre précédent (4.5). Ainsi, le système subit une transition thermodynamique du premier ordre à une température T_g en-dessous de laquelle l'équilibre est localisé dans le niveau fondamental. L'entropie s'annule alors. Rappelons que la distribution des basses énergies est exponentielle (4.7).

La question posée dans le chapitre précédent est : Comment se caractérise la descente vers l'état fondamental lorsque la dynamique implique un seul spin à chaque pas de temps ? Dans ce chapitre, cette question reste notre préoccupation principale pour une dynamique où K spins au maximum peuvent être retournés. Nous gardons les taux de Métropolis, à savoir :

$$P(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_j\}) = \begin{cases} e^{-\beta(E_j - E_i)} & \text{si } E_j > E_i \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.7)$$

Les configurations $\{\sigma_i\}$ et $\{\sigma_j\}$ diffèrent d'un nombre maximal K de retournements de spins, chaque retournement se faisant avec une probabilité $\frac{1}{2}$.

Nous allons étudier le diagramme des phases de ce système en fonction du rapport K/N et de la température. Nous allons balayer une gamme de modèles d'espace des phases allant du BTM ($K = 1$) au BMM ($K=N$) en passant par des modèles BMM à taille finie, étudiés dans [48]. Notre étude est essentiellement focalisée sur le cas intermédiaire $1 \ll K \ll N$. D'un point de vue énergétique ce cas se comporte essentiellement comme le BMM. La différence se situe au niveau de la loi de corrélation des observables. En effet, à l'opposé de la situation $K = N$ pour laquelle la décorrélation entre deux états successifs est totale, la corrélation (4.22) évolue doucement. Elle décroît à chaque saut d'un facteur multiplicatif $(1 - K/N)$.

Comme dans le BMM [48], nous obtenons une transition dynamique à $T_g/2$. Au-dessus de cette température, la dynamique est principalement activée alors qu'en-dessous elle est entropique. Cette transition est loin d'être banale. En effet, nous verrons que les lois de vieillissement sont qualitativement différentes suivant le régime (activé ou entropique). Par ailleurs, nous verrons que les FDR tendent dans la limite $K/N \rightarrow 0$ vers des relations linéaires avec des pentes $1/T$ lorsque $T > T_g/2$ et $2/T_g$ lorsque $T < T_g/2$ définissant ainsi une température effective $T_{\text{eff}} = T_g/2$.

5.2 Programme

Le chapitre se décompose essentiellement en trois parties.

La première est consacrée à la réalisation du modèle BMM via le NPP. Nous profitons de cette partie pour rappeler les caractéristiques non triviales de ce modèle, à savoir la différence de comportements suivant que la température est plus grande ou plus petite que $T_g/2$. Nos résultats sont confrontés directement à ceux de Bertin [48] qui a étudié ce modèle strictement du point de vue de l'espace des phases et non de celui d'une réalisation microscopique.

Ensuite, nous faisons l'étude du NPP lorsqu'un grand nombre K de spins peuvent être retournés mais toujours dans la limite où $K/N \rightarrow 0$ où N est la taille du système. Cette version du NPP correspond à un modèle BMM avec un seuil en énergie en-dessous duquel le régime devient BTM [48]. Dans la limite $K \rightarrow \infty$, ce seuil est très bas en énergie laissant place à un modèle purement BMM du point de vue des énergies mais ayant des observables qui se décroissent doucement entre chaque état. Nous étudions explicitement ce cas. Signalons que durant la rédaction de cette thèse, Sollich a résolu le BMM (et le BTM) avec décroissance lente entre chaque état. Nos résultats sont en parfait accord avec son étude [90].

Enfin, le point final de notre étude se situe au niveau des réponses de ces systèmes, c'est-à-dire sur les relations de fluctuation-dissipation. Nous montrons alors, en parfait concordance avec les travaux de Sollich [90], que dans la limite $K/N \rightarrow 0$ pour le NPP (ou pour le BMM avec décroissance lente) émerge une température effective valant $T_g/2$.

5.3 Réalisations des modèles originaux

5.3.1 $K = 1$

Il n'y a pas de pièges ! La dynamique est bien celle du BTM aux temps longs. L'étude est faite dans le chapitre précédent.

5.3.2 $K = N$

Considérons le cas extrême opposé où tous les spins sont redistribués à chaque pas Monte Carlo. Dans ce cas, l'horizon disparaît puisque par construction tous les états sont connectés, la dynamique étant globale. Par ailleurs, puisque l'ensemble des spins est redistribué, l'autocorrélation de spins (4.22) entre deux états successifs est nulle. Nous sommes donc dans une situation où, tous les états sont connectés, la distribution en énergie aux basses énergies est exponentielle (4.7) et la corrélation choisie est identique à la corrélation de saut. Par conséquent, cette dynamique globale du NPP est une réalisation microscopique du BMM défini par les ingrédients justement mentionnés. La partie non exponentielle du spectre pour laquelle l'énergie de Mertens est plus grande que $\sqrt{N}$ n'a pas d'influence sur la dynamique à temps longs étant donné que ces états sont très peu visités.

La suite de ce paragraphe est consacrée à une justification quantitative de cette réalisation, appuyée par quelques simulations numériques ne laissant aucun doute à l'affaire.

Fonctions de corrélation

Dans le cas d'une complète redistribution des spins, nous avons dit que l'autocorrélation (4.22) était identique à la corrélation de saut (4.21). Cette corrélation est la base de la plupart des calculs de loi de vieillissement dans les modèles BMM et BTM. Dans le BMM, les lois de vieillissement ont des comportements différents suivant le secteur de temps considéré. Pour une fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$, les comportements asymptotiques $t \ll t_w$ et $t \gg t_w$

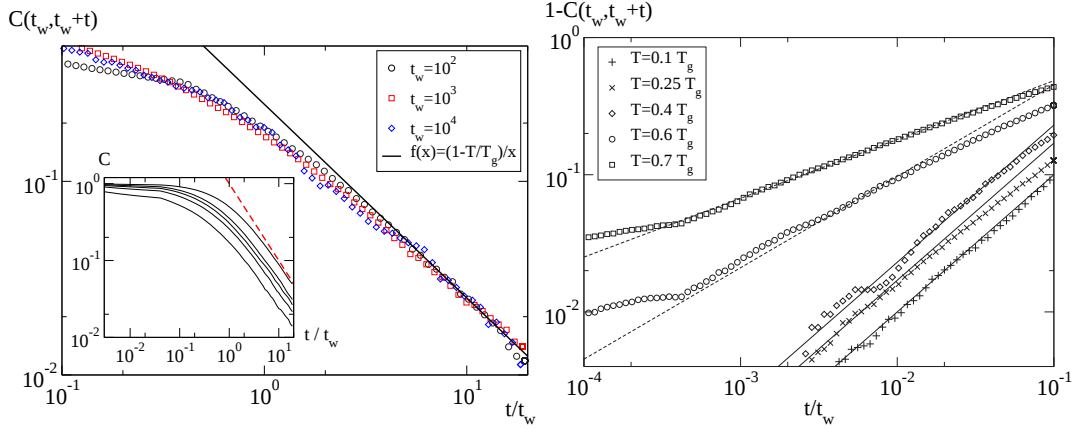


FIG. 5.1 – Lois de vieillissement pour l'autocorrélation de spins. $K = N = 50$, pour $T = 0.75 T_g$ et différents t_w ; les données montrent un comportement de vieillissement simple. La droite est la prédiction analytique de l'équation (5.9). Insert : autocorrélation pour différentes températures; de gauche à droite : $T/T_g = 0.75, 0.6, 0.5, 0.4, 0$ ($t_w = 10^3$). La droite en pointillés est proportionnelle à t^{-1} .

FIG. 5.2 – Comportement à temps courts de l'autocorrélation de spins $C(t_w, t_w + t)$ montrant la singularité avec un exposant $(1 - \mu)/\mu$ (droites) pour $\frac{1}{2} < \mu < 1$, exposant identique à celui de l'équation (5.10).

sont caractéristiques de la nature entropique ou activée de la dynamique [48], i.e. $T < T_g/2$ et $T_g/2 < T < T_g$ respectivement.

Dans la limite $t \gg t_w$, le comportement caractéristique du BMM est donné [43, 48] par :

$$C(t_w, t_w + t) \sim \frac{t_w}{t} \quad (5.8)$$

En fait, en reprenant les calculs de [48] établis pour une dynamique de Glauber, il est possible de calculer le comportement exact dans le cas des taux Métropolis :

$$C(t_w, t_w + t) \approx (1 - \mu) \frac{t_w}{t} \quad (5.9)$$

où $\mu = T/T_g$ est la température réduite. Nous voyons d'après la Fig. (5.1) que les simulations numériques du NPP concordent très bien avec ce comportement.

A temps courts ($t \ll t_w$), une analyse asymptotique de la fonction de corrélation dans le BMM montre l'apparition d'une singularité [48] pour des températures $T_g/2 < T < T_g$:

$$1 - C(t_w, t_w + t) \sim \begin{cases} \left(\frac{t}{t_w}\right)^{(1-\mu)/\mu} & \frac{1}{2} < \mu < 1 \\ \frac{t}{t_w} & \mu < \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.10)$$

Ces comportements sont en fait les comportements asymptotiques $t/t_w \rightarrow 0$. Cependant, cette différence de comportement apparaît quantitativement dans le NPP totalement redistribué (Fig.5.2). Les écarts à temps très courts viennent d'une part de l'exploration d'états non exponentiellement distribués (cette exploration devenant négligeable à temps longs) et, d'autre part, des effets de temps finis puisque les relations (5.10) sont obtenues seulement dans la limite asymptotique des temps t_w infinis.

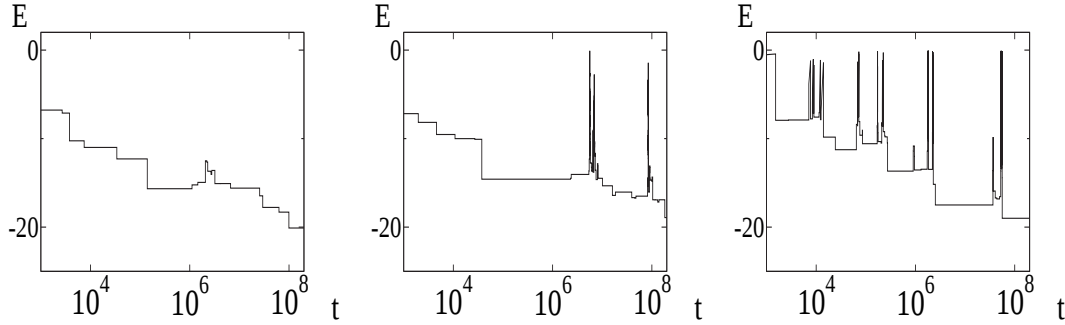


FIG. 5.3 – Evolution temporelle de l'énergie pour des réalisations uniques du BMM : de gauche à droite : $T/T_g = 0.35, 0.5$ et 0.65 . $T_g = 1$. Les retours à hautes énergies sont fréquents lorsque $T > T_g/2$. A cette température, la dynamique est similaire à celle du BTM, avec le fameux paradoxe de la réversibilité lorsque l'échelle des temps est linéaire.

5.3.3 Régime entropique et régime activé

Cette singularité dans les fonctions de corrélation est la signature d'une transition entre un régime activé et un régime entropique [48]. En effet, le BMM (par définition, la densité en énergie est exponentielle et est donnée par (5.2)) présente une telle transition à $T_g/2$ en-dessous de laquelle la dynamique procède essentiellement à une descente monotone en énergie, et au-dessus de laquelle des événements de type activés rentrent en jeu (voir Fig. (5.3)). La présence de cette transition dans les fonctions de corrélations à la fois du BMM et du NPP totalement redistribué confirme bien la réalisation microscopique du premier par le dernier.

Cette transition entre un régime entropique et un régime activé peut être vue sous un angle différent, mais évidemment non déconnecté du point de vue des corrélations. Elle peut être comprise, comme l'a proposé Bertin [48], en calculant l'énergie moyenne atteinte lors d'une transition. En-dessous de $T_g/2$, l'énergie décroît en moyenne à chaque changement d'états alors qu'au-dessus elle augmente. Visuellement, le phénomène est spectaculaire. En effet, Fig. (5.3) montre trois réalisations de l'évolution énergétique du BMM pour des températures plus grandes, égales et plus petites que $T_g/2$. Nous voyons clairement sur cette figure la tendance du système à diminuer son énergie lorsque $T < T_g/2$ et un comportement plutôt du type BTM au-dessus, même si la notion d'horizon n'est pas tangible. Quantitativement, l'énergie moyenne atteinte après un saut à partir de l'énergie E est donnée par :

$$\langle E' \rangle_E = \frac{\int_{-\infty}^0 dE' E' W(E \rightarrow E') \rho(E')}{\int_{-\infty}^0 dE' W(E \rightarrow E') \rho(E')} \quad (5.11)$$

Dans la limite des basses énergies ($E \rightarrow -\infty$), nous trouvons pour une dynamique de type Métropolis :

$$\langle E' \rangle_E = E + \frac{2\mu - 1}{1 - \mu} T_g \quad (5.12)$$

En-dessous de $T_g/2$, l'énergie diminue en moyenne à chaque saut. Le régime est entropique. D'un autre côté, lorsque $T > T_g/2$, l'énergie augmente en moyenne à chaque saut. Ainsi, le système suit une marche aléatoire dans l'espace des énergies avec un biais vers les hautes énergies, la condition de bord réflexive en $E = 0$ empêchant le système de s'égarer dans les

énergies positives. Si le temps était compté en nombre de sauts, le système serait dans un état stationnaire près de l'énergie $E = 0$. Cependant, plus l'énergie visitée est basse, plus le séjour dans l'état est long. Temporellement, la dynamique est dominée par l'accès à ces basses énergies et plus le temps passe, plus grande est la probabilité de rencontrer des états de basses énergies. Nous voyons donc que la phénoménologie de ce régime est très similaire au BTM. Le paradoxe de réversibilité et la tendance à descendre vers l'état fondamental sont de nouveau les caractéristiques de l'évolution énergétique. La compétition entre le biais vers les hautes énergies et des temps de piègeage de plus en plus grand est responsable de la singularité de la fonction de corrélation (5.10).

Cette transition est d'une importance capitale car nous verrons que la température $T_g/2$ joue un rôle crucial dans la réponse du système et que d'une façon générale cette transition entropique-activée peut donner un ensemble de phénomènes tout à fait intéressant à étudier (voir dernier chapitre).

5.4 Dynamique intermédiaire : $1 \ll K \ll N$

Nous venons de voir que les cas extrêmes $K = 1$ et $K = N$ donnent respectivement les comportements des modèles BTM et BMM. Ainsi, pour des valeurs de K/N comprises entre 0 et 1, nous pouvons nous attendre à des dynamiques intermédiaires passant continûment du BTM au BMM. Evidemment, le passage d'une dynamique à l'autre est assez subtile étant donné que les dynamiques entropiques et activées sont qualitativement différentes. Il semble alors assez clair que l'horizon aura un rôle très important dans ce passage, ce que nous expliquons plus loin. Une différence significative par rapport au BMM sera la décorrélation douce des observables. Par opposition au BTM où finalement cet ingrédient n'est pas dramatique pour les lois de vieillissement, nous allons voir que la décorrélation douce peut conduire à des comportements radicalement différents des modèles extrêmes.

5.4.1 Structure de l'espace des phases

La dynamique à un seul retournement de spin (chapitre précédent) a montré le rôle essentiel que jouait l'horizon, ingrédient indispensable du BTM. D'un autre côté, cet horizon disparaît lorsque $K = N$. Dans le cas intermédiaire $1 \ll K \ll N$, il reste possible de définir un horizon. En effet, utilisant le même argument que dans le cas du retournement d'un seul spin, nous obtenons l'énergie suivante (voir annexe A) :

$$E_h^K = -KT_g \ln N \quad (K \ll N) \quad (5.13)$$

en-dessous de laquelle l'évolution est toujours activée : une barrière d'énergie au moins égale à $(E_h^K - E)$ doit être franchie pour continuer l'évolution. Au contraire, lorsque les états visités ont des énergies E bien supérieures à E_h^K , alors l'influence de l'horizon ne se fait pas sentir.

Par conséquent, lorsque K est grand, l'horizon chute vers les basses énergies et laisse place à un ensemble d'états dont la dynamique est celle du BMM. Trois régimes doivent être alors distingués (Fig.(5.4)) :

1. $T_g > T > \frac{T_g}{2}$, $E > E_h^K$. Le système se situe au-dessus de l'horizon. La dynamique ressemble au régime activé du BMM, la seule différence étant alors la loi de décorrélation entre états, qui ici est lente par rapport au cas original. Typiquement l'autocorrélation de spin diminue d'un facteur $(1 - K/N)$ à chaque saut.

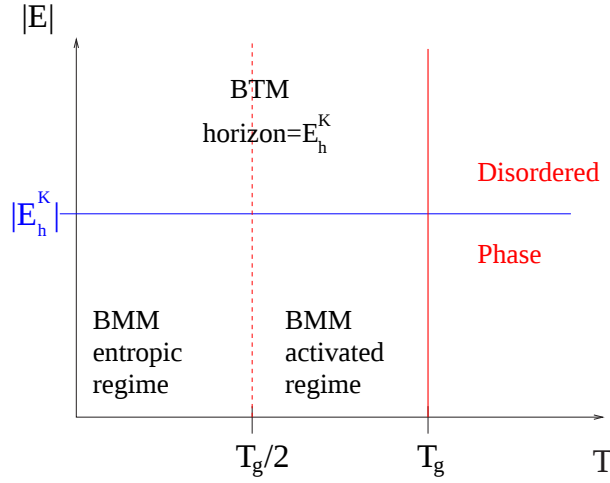


FIG. 5.4 – Diagramme schématisant des différents régimes attendus pour le NPP. Les variables de contrôle sont la température et l'énergie typique visitée par le système. De grandes valeurs de $|E|$ correspondent à des énergies profondes donc à des temps longs.

2. $T < \frac{T_g}{2}$, $E > E_h^K$. Comme dans (1), le régime est identique à celui du BMM mais dans sa phase entropique. Les observables usuelles ont tendance à se décorréler doucement.
3. $E < E_h^K$. Une fois que l'horizon est atteint, le système n'a pas d'autres choix que de réémerger au-dessus pour continuer son évolution. Le comportement est alors similaire au BTM et la température $T_g/2$ n'a plus de rôle spécifique.

Ainsi, nous voyons que le modèle NPP avec un nombre fini, mais grand, de retournements de spins, conduit naturellement à un 'crossover' entre un régime BMM et un régime BTM à toute température. La particularité du modèle induit alors une activation par rapport à un unique niveau E_h^K jusqu'à l'équilibration du système, par opposition aux comportements des verres de spins en champ moyen en-dessous du 'threshold'. Ce crossover est très intuitif du point de vue du problème de l'empilement. Il se produit lorsque que n'importe quelle tentative ne peut qu'empirer la situation (voir l'image du seau et des cailloux).

Bien qu'il eût été très intéressant d'étudier ce crossover, nous allons focaliser notre étude dans le régime précédant le régime BTM pour essentiellement une raison : les simulations étant restreintes aux capacités actuelles de l'informatique, il est difficile de faire des statistiques à des temps très longs. Quantitativement, nous savons qu'à température nulle, le temps de piègeage du BMM est donné par $\tau(E) = e^{-\frac{E}{T_g}}$ et que le temps écoulé t depuis une trempe à l'instant initial ($t = 0$) est donné par le temps du piège auquel se trouve le système à t . Comme le temps de crossover t_c est donné pour une valeur de l'énergie valant $-T_g K \ln N$, $t_c = N^K$. Par exemple, si $N = 100$ et $K = 5$, ce temps est d'ordre 10^{10} pas Monte Carlo, ce qui est déjà grand pour une seule réalisation.

Lorsque $1 \ll K \ll N$, par changement de température nous nous attendons donc à une transition pour le NPP entre régime activé et régime entropique, comme dans le cas du BMM. Cette transition est en effet très claire du point de vue de la visualisation de l'évolution énergétique pour une seule réalisation à différentes températures. Fig. (5.5) montre trois réalisations pour un système de 200 spins avec un retournement de 5 spins à chaque pas Monte-Carlo. Aucune différence qualitative n'est distinguable de la figure (5.3) concernant

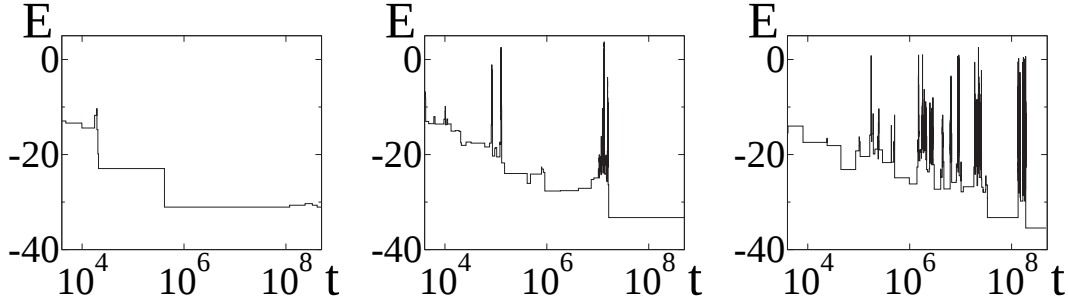


FIG. 5.5 – Evolution temporelle de l'énergie pour des réalisations uniques du NPP pour $K = 5$ et $N = 200$: de gauche à droite : $T/T_g = 0.35, 0.5$ et 0.65 . $T_g = 2$.

le BMM³.

Revenons un instant sur l'horizon (5.13). D'un point de vue de l'empilement des pièces, nous avons vu que lorsqu'une seule pièce pouvait être déplacée, l'horizon correspondait à l'épaisseur de la plus petite pièce. Dans une dynamique concernant K pièces, on peut considérer que l'horizon est la différence minimale de hauteur entre deux piles construites à partir de K pièces prises parmi les N de départ, ce qui correspond au cas de l'épaisseur d'une seule pièce pour un système en comprenant N^K (lorsque $K \ll N$). Nous avons vu que dans le cas d'un seul changement de pièce, l'horizon était donné par $E_{min} = -T_g \ln(\text{nombre de pièces})$. On retrouve donc $E_h^K = -KT_g \ln N$. Insistons alors sur le fait que cette approche pour déterminer l'horizon n'est pas complètement redondante avec celle de l'annexe A. En effet, l'approche de l'annexe est une *approche statistique* des valeurs extrêmes alors qu'ici, nous avons exprimé une contrainte liée à l'*impossibilité physique* de diminuer une différence de hauteur dans un problème d'empilement.

5.4.2 Lois de vieillissement

Dans le cas $K \ll N$, une solution analytique du problème semble assez difficile, au même titre qu'une solution analytique du BMM pour des observables douces (même si Sollich [90] a finalement tout résolu!). Nous allons donc utiliser des arguments d'échelle adaptés au régime étudié.

Premièrement, l'évolution temporelle de l'énergie instantanée (non moyennée) du régime entropique peut se décomposer en deux composantes : une valeur moyenne dont l'évolution est déterministe par monotonie du processus et une valeur fluctuante de moyenne nulle et de variance finie. Ces fluctuations ne dominent pas la dynamique et peuvent être considérées en première approximation comme une perturbation de l'évolution moyenne déterministe. Ainsi, il y a de fortes chances qu'une approximation consistant à négliger les fluctuations puissent donner des résultats pertinents, du moins pour les lois d'échelle liées au vieillissement.

Deuxièmement, lorsque $T > T_g/2$, la dynamique est dominée par des événements actifs de grande amplitude qui propulsent le système aux hautes énergies. L'approximation précédente n'est donc plus pertinente car ce sont les fluctuations qui dirigent la dynamique.

³Les échelles d'énergie sont différentes puisque dans la Fig. (5.3) $T_g = 1$, tandis que dans Fig. (5.5) $T_g = 2$.

Régime entropique : $T < T_g/2$

Pour commencer, prenons le cas d'une trempe à température nulle et estimons à l'aide d'arguments simples la corrélation à deux temps $C_o(t_w, t_w + t)$ d'une observable qui décroît typiquement d'un facteur $(1 - K/N)$ à chaque saut. L'autocorrélation de spins est une de ces observables. Après R sauts, correspondant au nombre de sauts effectués entre t_w et $t_w + t$, dans la limite $K/N \rightarrow 0$, la corrélation C_R vaut :

$$C_R = e^{-RK/N} \quad (5.14)$$

suivant la prescription $C_{R=0} = 1$. A l'instant initial le système est à haute énergie. Il subit ensuite une descente en énergie où seuls des états de plus basses énergies sont successivement visités. D'après l'équation (5.12), à chaque saut l'énergie diminue en moyenne de T_g lorsque les énergies visitées sont profondes (i.e. $|E| \gg T_g$). Ainsi, après R sauts, la différence d'énergie entre les temps t_w et $t_w + t$ est donnée dans la limite des grands t_w par :

$$E(t_w + t) - E(t_w) = -R \times T_g \quad (5.15)$$

D'un point de vue énergétique, le NPP loin de l'horizon se comporte comme le BMM. Incidemment, le temps de piègeage à une énergie E est donné par :

$$\tau_E = \tau_{mc} \left(\int_{-\infty}^E dE' \rho(E') \right)^{-1} \quad (5.16)$$

où $\tau_{mc} = K/N$ est l'unité de temps Monte Carlo associée aux simulations numériques. $\rho(E')$ est la densité d'énergie du NPP donnée par (4.7). Aux basses énergies, ce temps de piègeage se réduit à :

$$\tau(E) \approx \tau_{mc} \frac{\beta_g e^{-E/T_g}}{\mathcal{N}} \quad (5.17)$$

$\mathcal{N}$ est le préfacteur de normalisation de la densité en énergie (4.7). De façon similaire au BMM, le temps courant est de l'ordre du temps de vie du piège visité. Ainsi, pour des grands temps t' :

$$E(t') = -T_g \ln \left(\frac{\mathcal{N}}{\beta_g} \frac{t'}{\tau_{mc}} \right) \quad (5.18)$$

Cette équation combinée avec (5.15) et (5.14) donne :

$$C_o(t_w, t_w + t) = \left(\frac{t_w + t}{t_w} \right)^{-\frac{K}{N}} \quad (5.19)$$

Cette loi à température nulle est parfaitement vérifiée (Fig. (5.6)) par simulation de la dynamique du NPP à température nulle à l'aide d'un algorithme 'event-driven'. Ce dernier consiste à calculer la distribution des temps de piègeage pour une énergie E et à faire une dynamique Monte Carlo pour ces temps (et non pour les énergies) suivant cette distribution. Les résultats avec les simulations microscopiques du NPP pour des temps compatibles avec le temps de vie du thésard sont aussi très bons (Fig. (5.7), courbe du bas).

Pour des températures non nulles mais assez basses ($T < T_g/2$) telles que le processus activé ne soit pas le mécanisme principal d'évolution, nous pouvons utiliser le même genre

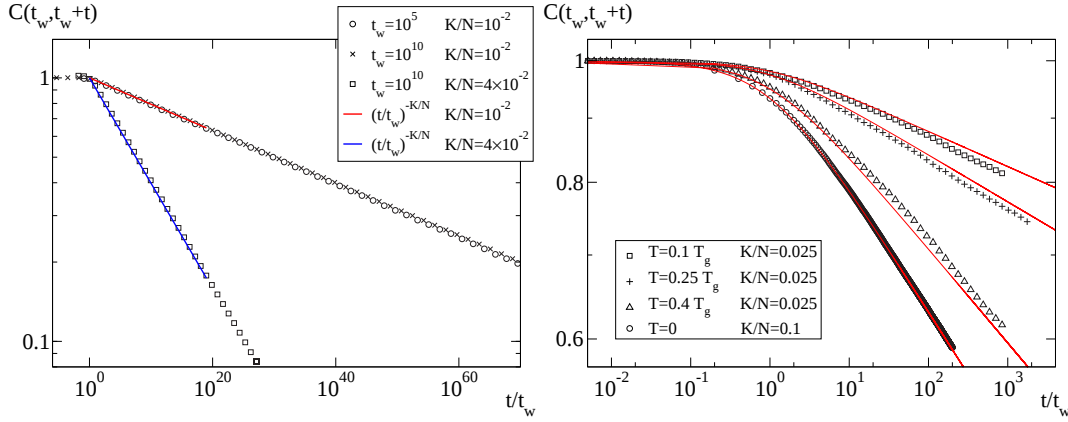


FIG. 5.6 – Fonctions de corrélation $C_o(t_w, t_w + t)$ d’une observable douce dans le cas de la simulation du NPP par un algorithme ‘event-driven’ (voir texte) sans prise en compte de la présence de l’horizon. La décroissance se fait d’un facteur $(1 - K/N)$ à chaque saut.

FIG. 5.7 – Simulations Monte-Carlo directes de la fonction d’autocorrélation de spins pour $T < T_g/2$ et pour des petites valeurs de K/N . Pour $T > 0$, $N = 200$ et $t_w = 10^4$; pour $T = 0$, $N = 1000$ et $t_w = 500$. Les énergies en jeu restent loin au-dessus de l’horizon. Les courbes pleines sont les prédictions données par Eq. (5.21) sans paramètre ajustable.

d’arguments. Seule est modifiée l’énergie moyenne perdue à chaque saut. D’après (5.12), nous trouvons alors :

$$E(t_w + t) - E(t_w) = -\frac{1 - 2\mu}{1 - \mu} RT_g \quad (\mu < \frac{1}{2}) \quad (5.20)$$

Toutes choses étant égales par ailleurs, la corrélation devient

$$C_o(t_w, t_w + t) = \left(\frac{t_w + t}{t_w} \right)^{-\eta \frac{K}{N}} \quad (5.21)$$

avec $\eta = (1 - \mu)/(1 - 2\mu)$. Une nouvelle fois, cette loi est bien confirmée par les simulations numériques du NPP (Fig. (5.7)).

D’après ces lois de vieillissement, deux points doivent être discutés :

- Dans le régime entropique, la loi de décroissance des observables a un impact crucial sur la loi de vieillissement associée. Cette loi est d’autant plus lente (exposant petit) que la corrélation entre deux états successifs est proche. Qualitativement, ceci se comprend assez bien car nous sommes en présence d’une descente en énergie. Ainsi, entre deux temps t_w et $t_w + t$, le système effectue en moyenne un certain nombre de sauts. Par conséquent, plus la corrélation entre deux états successifs est forte, plus la décroissance sera lente pour un couple $\{t_w, t_w + t\}$ donné. Au contraire du BTM pour lequel une fois sortie d’un grand piège la décroissance est immédiate par rapport au temps du piège, il n’y a pas de réorganisation via des états de hautes énergies avec des temps de vie très courts. Les lois de vieillissement sont donc très sensibles à la loi de décroissance de l’observable.
- Concernant l’importance du rapport K/N dans les lois de corrélation, la dépendance de K vis à vis de N peut conduire à des comportements radicalement différents dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$.

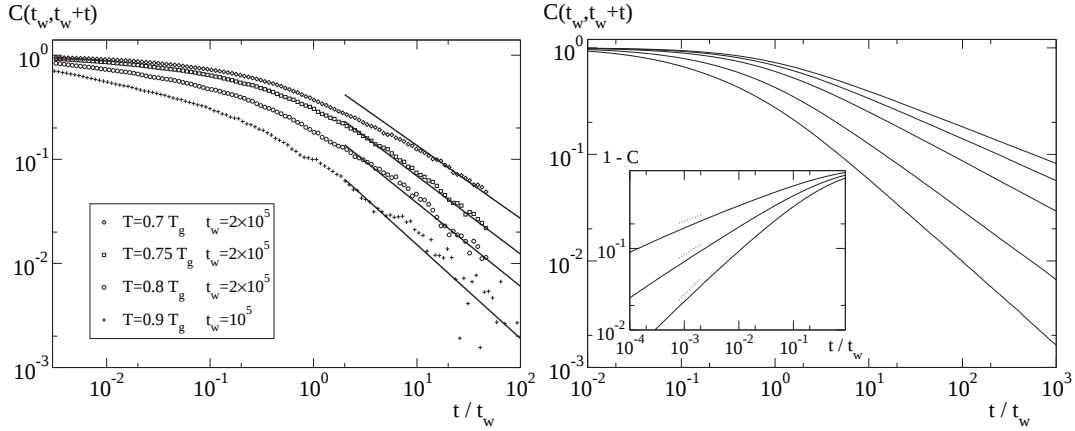


FIG. 5.8 – Fonction d'autocorrélation de spins pour le NPP dans le cas $1 \ll K \ll N$. Les lignes droites ont des pentes $\mu = T/T_g$ en échelle log-log de façon à comparer avec le BTM.

FIG. 5.9 – Fonctions de corrélation dans le BMM avec un facteur de décorrélation $(1 - x)$; ici, $x = 0.1$. De bas en haut : $T/T_g = 0.52, 0.55, 0.6, 0.7$ et 0.8 . Les queues dépendent de la température suivant un exposant proche de $-\mu$ caractéristique du BTM. Les déviations sont d'autant plus grandes que la température est proche de $T_g/2$. Insert : comportements à temps courts avec un exposant typique du BMM, à savoir $(1 - \mu)/\mu$ (pointillés).

Etudions le cas où K est une fraction finie de N , $K = \alpha N$. La loi de vieillissement (5.21) converge dans la limite thermodynamique vers une fonction

$$C_o(t_w, t_w + t) = \left(\frac{t}{t_w} \right)^{-\eta\alpha}$$

indépendante de N . Cette corrélation décroît vers 0 lorsque $t \rightarrow \infty$.

Lorsque K reste fini, soit $K/N \rightarrow 0$ dans la limite thermodynamique, alors la corrélation tend vers 1 et perd sa dépendance en temps. Dans ce cas, il y a une forte brisure d'ergodicité par opposition au scénario de faible brisure d'ergodicité [52, 62]. En choisissant α comme paramètre de contrôle, une transition vers un état de forte brisure d'ergodicité a lieu à $\alpha = 0$.

Régime activé : $T > T_g/2$

Dans ce régime, les arguments propres au régime entropique ne peuvent pas s'appliquer car les fluctuations jouent un rôle important dans le système.

D'un point de vue énergétique, nous savons que le système se comporte, loin de l'horizon, comme le BMM. Une question naïve mais légitime est de se demander si à l'instar du BTM, une loi lente de décorrélation tend asymptotiquement ($t_w \rightarrow \infty$) vers la loi du BMM original calculée avec la corrélation de saut. Les simulations numériques du NPP montrent (Fig. (5.8)) que les queues des fonctions de corrélation se comportent comme des lois de puissance avec des exposants dépendant de la température. Cependant, ces simulations ne permettent pas de tirer une conclusion claire sur le comportement. Afin donc de mieux comprendre ce comportement, nous avons simulé une version modifiée du BMM pour laquelle les observables considérées décroissent d'un facteur $(1 - x)$ à chaque transition en prenant $x \ll 1$. Les résultats numériques sont donnés par Fig. (5.9). Le comportement observé est

en fait hybride. Les temps courts ($t \ll t_w$) sont très similaires au BMM avec une singularité caractérisée par un exposant $(1-\mu)/\mu$ (voir plus haut), alors que les temps longs donnent un comportement dépendant de la température avec un exposant proche de celui trouvé dans le BTM, à savoir $-\mu$. Les déviations sont d'autant plus importantes que la température est proche de $T_g/2$, ce qui semble assez normal par continuité du comportement avec le régime activé.

Etant donné la similarité des résultats entre les simulations du NPP et celles du BMM modifié, cette étude confirme une nouvelle fois que le NPP, pour cette dynamique intermédiaire $1 \ll K \ll N$, peut être vu comme une version modifiée du BMM pour laquelle est prise en compte une loi douce de décorrélation des observables. Par ailleurs, nos résultats concordent avec ceux de Sollich concernant le BMM avec des observables se décorrélant doucement [90].

5.5 FDR dans le régime de vieillissement

Nous allons considérer dans cette partie la FDR liée à l'observable correspondant à l'autocorrélation de spins. Ainsi, nous considérons l'observable (4.25) du chapitre précédent accompagnée des notations concernant les réponses et réponses intégrées. Le résultat principal est que dans la limite de décorrélation lente ($K \ll N$), la FDR devient linéaire définissant ainsi une température effective. Dans le régime entropique, cette température est plus grande que T : elle est égale à la température de transition entre régime entropique et régime activé.

5.5.1 $K=N$ et le BMM

$T_g/2$ sépare deux types de dynamiques rencontrées dans le NPP avec un grand nombre de retournements de spins. Il est alors intéressant de comparer les FDR entre ces deux régimes. Fig. (5.10) montre les résultats numériques obtenus pour $T < T_g/2$ dans le cas d'une redistribution globale des spins. Comme espéré, les relations à température nulle sont en très bon accord avec les solutions de Sollich [88] pour le BMM. Nous rappelons que dans le cas du BMM, la FDR est donnée [89] par :

$$R(t_w, t_w + t) = -\frac{2}{T_g} \frac{\partial C(t_w, t_w + t)}{\partial t} \quad (5.22)$$

Les simulations numériques du NPP lorsque $T < T_g/2$ laissaient penser, aux erreurs numériques près, que cette relation de FDR était unique (mais non linéaire) pour toute température $T < T_g/2$. Cependant, les travaux de Sollich sur le BMM original (avec décorrélation totale entre les états) effectués pendant la rédaction de cette thèse [90] montrent que ceci n'est pas le cas et que des petites corrections doivent être apportées lorsque la température est finie. Ce que nous pensions alors être des erreurs numériques (dues par exemple aux contributions non linéaires de la réponse) sont en fait en très bon accord avec les simulations de Sollich. Il faut donc retenir que d'une part, malgré les apparences, cette FDR n'est valide seulement qu'à température nulle *lorsque* $K = N$, et d'autre part, la pente à l'origine de la courbe χ vs C est donnée par $2/T_g$ pour toute température $T < T_g/2$.

Au-dessus de $T_g/2$, la FDR dépend de la température mais semble être indépendante dans les limites asymptotiques $t \ll t_w$ et $t \gg t_w$ (Fig. (5.10)). Dans le premier cas, la pente de la courbe χ vs. C est $1/T$ et dans le deuxième, elle s'annule. De nouveau ces résultats sont en parfaite harmonie avec ceux de Sollich [90] pour le BMM lorsque $T > T_g/2$. Ainsi, la FDR permet de discriminer distinctement le régime activé du régime entropique. En effet, il suffit simplement de relever le comportement à temps courts de cette relation est de voir

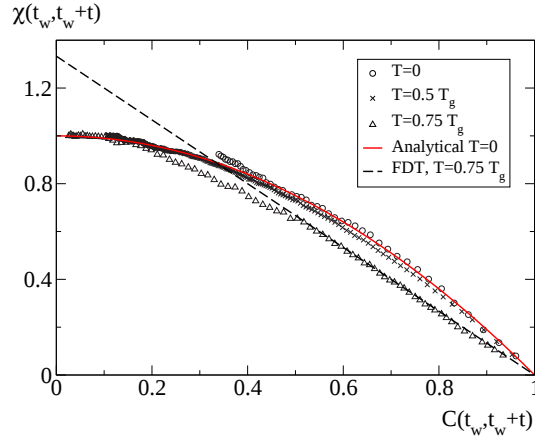


FIG. 5.10 – FDR dans le NPP pour $K = N = 50$ à différentes températures ($t_w = 10^4$) pour l'observable définie par (4.25); χ est mesurée en unité de T_g . Les simulations numériques à $T = T_g/2$ restent très proches de la solution analytique à température nulle du BMM (courbes pleines). Pour $T > T_g/2$, la pente initiale est donnée par $1/T$ (pointillés).

si la pente est donnée par la température du bain où par la température de transition entre régimes activé et entropique.

Une fois de plus, nous avons confirmation que le NPP muni d'une dynamique globale réalise le BMM. Le résultat principal de ce paragraphe étant qu'il existe un *indicateur* de la transition activée-entropique (propre au BMM) qui est la relation de fluctuation dissipation.

5.5.2 $1 \ll K \ll N$ ou l'émergence d'une température effective

$T > T_g/2$

Désormais sans véritable surprise, Fig. (5.11) montre que la FDR hors-équilibre tend vers une relation de type FDT à mesure que $\frac{K}{N}$ tend vers 0. Les raisons de ce comportement sont identiques à celles du BTM étant donné que le système visite souvent les états de haute énergie. La dynamique, elle, est dominée par le temps de vie des états de basse énergie.

$T < T_g/2$

Le cas du régime entropique est bien plus surprenant et très intéressant. En effet, à mesure que $\frac{K}{N}$ tend vers 0, la relation devient *linéaire* avec une pente donnée par $\frac{2}{T_g}$ (Fig. (5.12)) correspondant donc à une température effective *parfaitement définie* égale à la température de transition du régime activé vers le régime entropique. Remarquablement, la relation ne semble pas dépendre de la température à la condition que le régime soit activé. Une démonstration de cette FDR linéaire et unique pour $T < T_g/2$ est donnée dans l'annexe A. Notons alors que la pente obtenue est identique à la pente initiale dans le cas $K = N$ pour les mêmes valeurs de température. D'autre part, les travaux de Sollich [90] sur le BMM confirme cette relation linéaire dans la limite d'un facteur multiplicatif de décorrélation à chaque saut tendant vers 1.

Une fois de plus, la transition entre régime entropique et régime activé joue un rôle déterminant dans la description des phases de basse température.

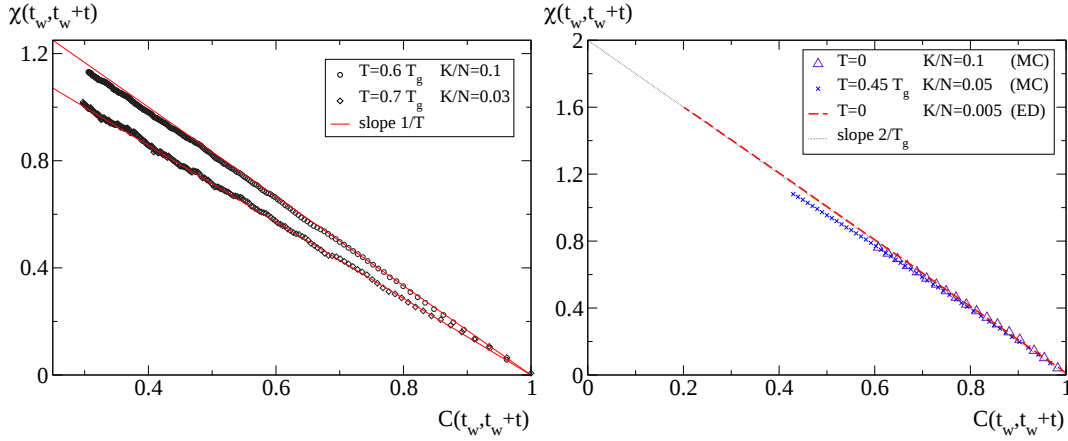


FIG. 5.11 – FDR pour $T > T_g/2$ dans le régime vieillissant du NPP pour $1 \ll K \ll N$: une relation linéaire avec une pente T^{-1} est observée. $N = 1000$ et $t_w = 10^5$ pour $T = 0.6T_g$; $N = 100$ et $t_w = 2 \times 10^5$ pour $T = 0.7T_g$.

FIG. 5.12 – FDR dans le régime entropique pour le NPP avec $1 \ll K \ll N$. Les données sont données soit par simulations Monte-Carlo directes (MC), soit par l'algorithme 'event-driven' en présence de champ. $t_w = 10^3$ pour MC et 10^{10} pour ED. Les données convergent vers une FDR linéaire dans la limite $K/N \rightarrow 0$ et $t_w \rightarrow \infty$.

5.6 Discussion

5.6.1 Influence de la distribution en énergie

Phases basse température

Du point de vue du NPP avec $K \rightarrow \infty$ (ou du BMM), la transition entre régime activé et régime entropique est contrôlée par le rapport $\mu = T/T_g$ entre la température et l'énergie caractéristique de la densité exponentielle (4.7). D'un autre côté nous avons signalé qu'à K fini, correspondant à un BMM avec énergie seuil en-dessous de laquelle il n'y a plus de directions descendantes [48], il fallait s'attendre à basse température à une transition entre un régime entropique et un régime activé due à l'absence des directions descendantes de l'énergie. Remarquablement, ce type de transition peut apparaître pour un modèle complètement connecté (i.e. $K = N$ ou pas de seuil pour le BMM) mais pour des distributions d'énergies non purement exponentielles. Par exemple, nous pouvons étudier le cas où $\rho(E)$ est composé de deux exponentielles :

$$\rho(E) \sim \begin{cases} e^{E/T_g^{(1)}} & \text{pour } E^* < E < 0 \\ e^{E/T_g^{(2)}} & \text{pour } E < E^* \end{cases}$$

Si $T_g^{(2)}/2 < T < T_g^{(1)}/2$, une trempe à partir des hautes températures conduit premièrement à un régime entropique tant que l'énergie moyenne $\bar{E}(t)$ reste au-dessus de E^* suivi d'un régime activé pour des temps longs lorsque $\bar{E}(t) < E^*$. Dans le cas $T_g^{(1)}/2 < T < T_g^{(2)}/2$, les régimes sont inversés. Par conséquent, un régime activé précède un régime entropique, ce qui est plutôt assez contre-intuitif. Cependant, le premier cas semble le plus général. En

effet, considérons naturellement la distribution gaussienne [82, 67] :

$$\rho(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-E^2/2E_0^2} \quad (5.23)$$

Pour toute température non nulle, ce système atteint un état d'équilibre dont la distribution est aussi une gaussienne de variance E_0^2 mais de moyenne non nulle $E_m = -E_0^2/T$ d'autant plus décalée vers les basses énergies que la température est basse. Supposons maintenant que nous fassions une trempe à partir des hautes températures vers des températures T telles que $T \ll E_0$, i.e. $|E_m| \gg E_0$. L'énergie moyenne visitée $\bar{E}(t)$ se dirige doucement vers E_m alors que la variance reste à peu près constante. Lorsque $\bar{E}(t)$ est proche de E_m , par exemple $\bar{E}(t) \approx E_m/2$, il est possible de linéariser $\rho(E)$ autour de $\bar{E}(t)$ et ainsi de trouver une distribution locale exponentielle :

$$P(E, t) \sim e^{E/\lambda(t)} \quad (5.24)$$

avec $\lambda(t) = E_0^2/\bar{E}(t)$. Cette approximation exponentielle est valide tant que $|E - \bar{E}(t)| \ll E_0^2/T$. En particulier, pour des énergies E telles que $|E - \bar{E}(t)| \approx T$, cette approximation est complètement justifiée. Il est alors naturel de définir une 'température' réduite dépendante du temps $\mu(t) = T/\lambda(t)$, jouant le même rôle que μ dans le BTM (ou le BMM). Puisque $|\bar{E}(t)|$ est une fonction croissante du temps, $\mu(t)$ l'est aussi. Ainsi, lorsque $\mu(t)$ atteint la valeur $1/2$, i.e. $\bar{E}(t) = E_m/2$, il faut s'attendre à une transition entre le régime de descente entropique et un régime activé. Aux temps longs, l'équilibre est atteint pour une valeur de $\mu = 1$.

Comportement à hautes températures

Un calcul thermodynamique pour les verres structuraux donne souvent une température de transition vitreuse thermodynamique à une température T_K dite de Kauzmann. Cependant, si maintenant nous procédons à des expériences de refroidissement de ces verres, le temps de relaxation devient très grand et semble diverger pour des températures plus grandes que T_K [76]. Souvent, d'ailleurs, une loi de type Vogel-Fulcher (4.1) donne une dépendance plutôt bonne de la divergence de ce temps de relaxation. Nous avons déjà signalé que le BTM donnait une divergence de ces temps suivant cette loi à la température de transition thermodynamique du système, donc à la température de Kauzmann équivalente. A la lumière des considérations précédentes, nous allons préciser le comportement haute température d'un modèle à deux exponentielles dont la dynamique est purement activée comme dans le BTM, ou activée comme dans le BMM à haute température. Choisissons donc comme plus haut une densité de niveaux en énergie définissant deux intervalles d'énergie caractérisés par deux exponentielles :

$$\rho(E) = \frac{1}{Z} \left(\alpha e^{E/T_g^{(1)}} \Theta(E - E^*) + e^{E/T_g^{(2)}} \Theta(E^* - E) \right) \quad (5.25)$$

avec $T_g^{(1)} > T_g^{(2)}$ et l'énergie E^* est choisie telle que $|E^*| \gg T_1$. Z est le facteur de normalisation et $\alpha = \exp(E^*(1/T_g^{(2)} - 1/T_g^{(1)}))$. Cette densité décroît à basse énergie comme $\exp(E/T_g^{(2)})$. Par conséquent, ce modèle possède une transition thermodynamique à température $T_K = T_g^{(2)}$. Calculons maintenant la moyenne de l'énergie du système pour des températures plus grandes que $T_g^{(1)}$. Il est facile de montrer que lorsque $|E^*| \gg (1/T_g^{(1)} - 1/T)^{-1}$, cette énergie moyenne vaut $E_m \approx (1/T_g - 1/T)^{-1}$ et la contribution des énergies inférieures à E^*

est négligeable. En somme, pour cette gamme d'énergie le système se comporte comme le BTM avec une densité $\propto \exp(E/T_g^{(1)})$. Lorsque T se rapproche de $T_g^{(1)}$ le temps de relaxation commence à diverger comme une loi de Vogel-Fulcher. Il diverge alors jusqu'à que l'approximation $|E^*| \gg (1/T_g^{(1)} - 1/T)^{-1}$ ne soit plus valide, i.e. lorsque $T \sim T_g^{(1)}(1 + T_g^{(1)}/|E^*|)$. Pour ces températures, le temps de relaxation est alors de l'ordre de $\exp(|E^*|/T_g^{(1)})$. Imaginons alors que $|E^*| \simeq 100 \times T_g^{(1)}$: le système atteint des temps de relaxation inacceptable pour des mesures expérimentales alors que l'énergie moyenne se situe très loin de l'énergie du fondamental qui échelle comme N . Cette apparente divergence des temps se produit à des températures au-dessus de la température de transition thermodynamique.

5.6.2 Interprétation de la FDR linéaire

La FDR linéaire de pente $T_g/2$ peut être obtenue analytiquement pour des observables douces, i.e. pour lesquelles le facteur de décorrélation entre chaque état tend vers 1 dans la limite thermodynamique. Les calculs explicites se trouvent dans l'annexe A. Dans ce paragraphe, nous essayons simplement de donner une image simplifiée des mécanismes physiques permettant d'obtenir cette température effective et ceci dans le cas de l'aimantation. Nous verrons dans le prochain chapitre une généralisation de cette température effective pour différentes sortes de processus entropiques, i.e. pour lesquels l'évolution temporelle de l'énergie est monotone et décroissante.

Comme dans le cas $K = 1$, un ingrédient conduisant à la linéarité de la FDR est que l'aimantation induite par l'application du champ h ne dépend pas de l'aimantation dans laquelle se trouve le système lorsque le champ est appliqué à t_w . En clair, la valeur de l'aimantation à t_w ne doit pas influencer les taux de transitions. C'est en effet le cas ici puisque la contribution énergétique aux taux de transitions est de l'ordre de Kh alors que l'aimantation totale varie plutôt comme Nh . Ainsi, dans la limite $K/N \rightarrow 0$, la contribution de l'aimantation initiale est négligeable. Ceci n'est pas le cas dans le BMM car la contribution énergétique aux taux de transitions est de l'ordre de Nh puisque les aimantations sont redistribuées aléatoirement. La valeur de l'aimantation initiale joue donc un rôle crucial dans l'obtention de la FDR.

Une fois que cette contribution est négligée, la linéarité de la FDR s'explique simplement : la relaxation vers l'aimantation induite par h se comporte de la même façon que la relaxation vers l'aimantation nulle à partir de n'importe quelle aimantation initiale induite par les fluctuations du système. Ainsi, pour $K = 1$, nous avons vu que la visite des états superficiels induisait une aimantation asymptotique constante $M^* = hN/T$ puisque la distribution était donnée par une forme de Gibbs :

$$\rho(M) \sim e^{-M^2/N + \beta h M} \quad (5.26)$$

Etant donné qu'à temps égaux, la corrélation vaut $\langle M^2 \rangle/N = 1$, la pente de la FDR vaut bien $1/T$. Cet argument s'applique aussi au régime activé $T > T_g/2$ du NPP lorsque $1 \ll K \ll N$ et du BMM modifié incluant des corrélations douces.

En ce qui concerne le régime entropique $T < T_g/2$, l'aimantation peut être obtenue en suivant le même raisonnement. Etant données les relations donnant les valeurs d'aimantation après un saut (équation (A.4) de l'annexe A), nous pouvons estimer la valeur moyenne de l'aimantation $\overline{M}$ après un saut comme étant la valeur la plus probable. Ainsi :

$$\overline{M} = \left(1 - \frac{K}{N}\right) M + 2K \left(1 - \frac{M^2}{N^2}\right) \frac{h}{T_g} \quad (5.27)$$

L'aimantation asymptotique peut s'obtenir de manière autocohérente en cherchant le point fixe $\bar{M} = M$ de cette relation. Aux ordres dominants, nous obtenons la solution $M^* = 2Nh/T_g$ donnant bien la pente $2/T_g$ de la FDR.

5.7 Etat des lieux et discussion

Dans ce chapitre, nous avons établi le diagramme de phases dynamiques du NPP introduit dans le chapitre précédent en fonction de la température et du nombre K de spins autorisés à se retourner simultanément. Nous avons alors vu qu'il était possible d'explorer toute une gamme de modèles d'espace des phases allant du BTM ($K=1$) au BMM ($K=N$) en passant par des versions modifiées du BMM ($1 \leq K \leq N$). Ce dernier cas est équivalent (du moins au-dessus de l'horizon) au BMM dans le cas d'observables douces. Etant données des observables se décorrélant d'un facteur $(1 - K/N)$, les lois de vieillissement du NPP (et donc du BMM) diffèrent radicalement du cas d'une corrélation de saut. Ainsi, nous avons obtenu des comportements hybrides, i.e. similaires à la fois au BTM pour les temps longs ($t \gg t_w$) et au BMM pour les temps courts ($t \ll t_w$) dans le régime activé. Dans le régime entropique, les corrélations s'éloignent du vieillissement simple en t_w/t et deviennent des lois du type $(t/t_w)^{-\eta K/N}$ avec $\eta = (1 - \mu)/(1 - 2\mu)$ et $\mu = T/T_g$. Notant $K = \alpha N$, avec $\alpha \geq 0$, une brisure forte d'ergodicité a lieu à $T_g/2$ lorsque $\alpha = 0$, par opposition à la brisure faible à T_g .

$T_g/2$ est une température très importante dans ce modèle car elle représente la température de transition entre les régimes activé et entropique (du NPP et du BMM). D'autre part, dans le cas *le plus réaliste microscopiquement* d'observables douces, les FDR tendent dans la limite thermodynamique vers des FDR linéaires si les moyennes sont nulles à chaque instant. La beauté de cette étude réside dans le fait que la température effective, ainsi bien définie, est celle du bain thermique dans le régime activé et $T_g/2$ dans le régime entropique ! Il semble donc que l'émergence, dans les modèles d'espace des phases, d'une température effective (bien définie) différente de celle du bain thermique soit très liée à la présence d'une dynamique entropique. De façon équivalente, la température effective définie dans les verres de spins résulte d'une dynamique entropique suivant laquelle le système procède à une descente en énergie puisque cette température est aussi définie lorsque $T \rightarrow 0$. Enfin, remarquons que la FDR apparaît une nouvelle fois comme un très bon indicateur du type de dynamique sous-jacente, ne faisant que confirmer l'importance d'une compréhension complète de la manifestation de la température effective.

Pour conclure, la température $T_g/2$ est intéressante pour deux raisons essentielles. D'une part, il est surprenant que cette valeur diffère de la valeur $T_{eff} = T_g$ habituellement rencontrée dans les verres de spins champ moyen [62] et les arguments de type Edwards [69, 73]. Pour être plus précis, ces théories prédisent une valeur :

$$T_{\text{eff}}^{-1} = \frac{\partial \ln \rho}{\partial E} \quad (5.28)$$

en associant $\ln \rho(E)$ à la complexité (ou entropie configurationnelle) du système. D'autre part, et c'est la conclusion essentielle de ce chapitre, c'est que nous avons triché ! En effet, cette température effective n'est exacte que dans la limite $K/N \rightarrow 0$, c'est à dire lorsque il y a forte brisure d'ergodicité du système ! Dans cette limite, le système ne se décorrèle plus. Il n'est donc pas légitime de parler d'évolution temporelle du système. Les deux points à retenir sont les suivants :

Un modèle d'espace des phases possédant une dynamique entropique est susceptible d'induire une température effective bien définie.

Il n'est pas possible d'utiliser les résultats du BMM pour la température effective puisque cette dernière s'obtient seulement dans la limite où le système n'évolue plus.

Chapitre 6

Dynamique locale dans l'espace des phases

Les modèles BMM et BTM ont en point commun de proposer une dynamique totalement connectée dans un espace des phases ayant une densité exponentielle d'énergie. Cette donnée statique permet d'un point de vue thermodynamique d'obtenir une transition vitreuse à une température non nulle en-dessous de laquelle le système se gèle dans un nombre fini d'états. D'un point de vue dynamique, diverses lois de vieillissement sont observées suivant les taux de transition entre chaque état (purements activés ou non), et d'autre part l'évolution de la corrélation (entre chaque état visité) des observables étudiées. Remarquablement, lorsqu'aucun champ extérieur n'est appliqué, ces lois dans le cas du BTM sont insensibles au choix des observables : une fois sortie d'un grand piège, le système visite des pièges peu profonds dont les durées de vie sont très courtes ; pour des temps longs, les observables ont toutes le même comportement, à savoir celui de la corrélation de saut. Ce point est sans doute la clef de voûte pour comprendre le don d'ubiquité de ce modèle. Du point de vue de la réponse, le comportement est sensible au type d'observables. Cependant, toute observable douce vérifie FDT.

D'un autre côté, les lois de vieillissement du BMM sont très sensibles à la loi de décorrélation de l'observable, que ce soit dans le régime activé ou dans le régime entropique. Un résultat très intéressant est celui de la violation de FDR. En effet, nous avons vu que dans le cas d'observables douces, la FDR tendait vers une FDR linéaire et unique dans le régime entropique. Malheureusement, dans ce régime les observables douces ne se décorrélaient plus.

Une question grandement légitime est alors de se demander s'il est possible de réaliser un modèle d'espace des phases (au même titre que le BMM et le BTM) ayant la propriété d'avoir un comportement de vieillissement caractérisé par une température effective bien définie, i.e. la FDR est linéaire, et différente de celle du bain thermique. Nous allons voir dans ce chapitre que ceci est possible et que contre toute attente le REM sera le candidat idéal sur lequel le bâtir. Ainsi, une dynamique locale, que nous définissons plus loin, permet au REM d'avoir une phase haute température dynamiquement bien définie pour laquelle le système relaxe en des temps finis (voir chapitre sur le BTM pour les problèmes liés à une dynamique microscopique du REM). Cette dynamique conduit naturellement à basse température à du vieillissement caractérisé par une température effective dont les caractéristiques sont très similaires à celles des verres champ moyen.

L'objectif principal de ce chapitre est de donner quelques pistes d'exploration des modèles d'espace des phases. Nos propositions sont le fruit de réflexions concernant le phénomène de

transition entre régime activé et régime entropique que nous avons étudié dans le chapitre précédent. En effet, pour le BMM cette transition se produit à des températures plus petites que la température de transition thermodynamique. Ainsi, il serait intéressant de proposer un modèle ayant une température de transition dynamique plus grande que la température de transition thermodynamique afin de se rapprocher du comportement des verres de spins champ moyen pour lesquels le système tombe hors-équilibre à des températures plus grandes que les températures de transition statique.

Nous proposons donc un modèle ayant les caractéristiques suivantes :

- Les énergies sont des variables aléatoires indépendantes distribuées suivant une densité gaussienne.
- Le système subit une transition thermodynamique du second ordre à une température T_c et une transition dynamique à une température T_d plus grande que T_c .
- Pour toute température plus grande que T_d , le système relaxe en temps fini vers son état d'équilibre.
- Lorsque $T < T_d$, dans la limite thermodynamique, le système est à jamais hors équilibre. L'énergie reste très proche d'une énergie seuil qui est l'énergie moyenne du système à l'équilibre lorsque $T = T_d$.
- Le temps de relaxation diverge comme une loi de puissance lorsque T s'approche de T_d par valeurs supérieures.
- Une trempe en température jusqu'à $T < T_d$ induit pour certaines observables douces du vieillissement en lois de puissance $(t/t_w)^{-\alpha}$ où α est un exposant fini indépendant de la taille N du système.
- Dans ce régime de vieillissement, FDT est violé mais la FDR est linéaire permettant de définir une température effective. Cette température est finie à température nulle et vaut la température du bain lorsque $T = T_d$.

Ces caractéristiques sont très similaires à celles des verres de spins champ moyen. Insistons alors sur l'objectif de ce chapitre : il consiste à donner des ingrédients permettant autant que possible de réconcilier les descriptions d'espace des phases et les descriptions champ moyen des phénomènes vitreux.

Le plan du chapitre est le suivant :

- Dans un premier temps, pour tout modèle composé d'énergies indépendantes distribuées suivant une certaine distribution, nous proposons un moyen de prendre en compte une connectivité non triviale entre les énergies du système : étant donné un état d'énergie comprise dans une tranche d'énergie d'épaisseur dE , il est possible de jouer sur la probabilité que cet état soit lié à un autre état suivant l'énergie de ce dernier, et ceci pour une densité en énergie donnée. Les modèles BMM et BTM ne présentent pas ce caractère puisque les états sont connectés indépendamment de leur énergie. Nous verrons alors que ces modèles peuvent être vus comme des cas particuliers de notre description.
- Ensuite, nous appliquons une de ces connectivités au REM, c'est-à-dire à un système ayant une densité gaussienne en énergie. Nous montrons alors qu'il est possible d'obtenir une phase haute température pour laquelle le système relaxe rapidement vers l'équilibre.
- Nous continuons en étudiant la phase basse température. Cette phase apparaît à une température plus grande que la température de transition thermodynamique. Nous donnons les lois de divergence des temps de relaxation et nous étudions numériquement les fonctions de corrélation de certaines observables douces après une trempe en température. Nous en profitons alors pour déterminer numériquement et analytiquement les FDR et montrons qu'une température effective est bien définie. En outre, nous proposons

un processus de thermalisation de la température effective.

- Enfin, nous finissons par proposer quelques pistes que nous pensons qu’il serait bon de développer dans le futur.

L’étude de ce chapitre n’est pas complètement aboutie car ce sont des travaux qui sont nés en fin de thèse. Cependant, nous pensons qu’il est important de les signaler pour montrer des voies prometteuses de la description en terme d’espace des phases permettant de donner un nouveau souffle à ce genre d’approche sachant que le modèle que nous proposons n’a jamais été aussi proche à notre connaissance de la phénoménologie des modèles hamiltoniens comme le p -spins.

6.1 Connectivité locale

Dans cette section, nous introduisons une notion de connectivité dans l’espace des énergies. Afin de mieux comprendre notre démarche, nous commençons par rappeler quelques propriétés de systèmes vérifiant le bilan détaillé et décrits par des états discrets en énergie.

6.1.1 Description discrète

Considérons un système composé de M états d’énergies E_i , $i = 1, \dots, M$. Chaque état i , d’énergie E_i , est relié à un certain nombre d’états d’énergies E_j , $j \neq i$. Alors le bilan détaillé est vérifié pour ce système si, à chaque pas Monte Carlo, la probabilité à partir d’un état i de proposer une transition vers un état connecté j est égale à la probabilité de proposer j à partir de i , ce qu’on note respectivement :

$$P(i, j) = P(j, i) \quad (6.1)$$

et si une fois ces couples i, j choisis, les taux de transitions vérifient :

$$w(i \rightarrow j) e^{-\beta E_i} = w(j \rightarrow i) e^{-\beta E_j} \quad (6.2)$$

Souvent, seule la deuxième condition (6.2) est donnée car la première est implicite dans la plupart des simulations. Par exemple, pour un système de N spins de type Ising une dynamique de retournement d’un seul spin pris au hasard conduit à la relation (6.1) puisque la probabilité $P(i, j)$ pour chaque couple de configurations connectées i, j est donnée par $1/N$ indépendamment de i et j . Nous allons voir que dans une description d’espace des phases décrit par un continuum d’énergie, l’équivalent de cette première relation peut permettre d’entrevoir une multitude de systèmes.

6.1.2 Description continue pour des énergies indépendantes

Un système¹ composé d’énergies aléatoires indépendantes peut être décrit dans la limite thermodynamique par une densité d’états en énergie $\rho(E)$. Ceci ne serait *a priori* pas possible si les énergies étaient corrélées (voir [68] pour une discussion et des exemples). Toujours dans la limite thermodynamique (ou de façon équivalente la limite continue en énergie), notons maintenant $f(E, E')$ la fonction de répartition des états d’énergie comprise entre E' et $E' + dE'$ connectés à un état d’énergie comprise entre E et $E + dE$.

Une manière d’imposer le bilan détaillé à ce système (défini par $\rho(E)$, $f(E, E')$ et un choix de dynamique de type Métropolis ou Glauber) est de le soumettre aux prescriptions

¹Il faut comprendre ici système comme étant un échantillon unique.

équivalentes à (6.1) et (6.2). La relation correspondant à (6.1) s'écrit :

$$\rho(E)f(E, E') = \rho(E')f(E', E) \quad (6.3)$$

En notant $w(E \rightarrow E')$ le taux d'acceptation² de la transition entre deux états d'énergie respective E et E' une fois que ces énergies ont été tirées, la prescription (6.2) correspondante s'écrit :

$$w(E \rightarrow E') = w(E' \rightarrow E)e^{-\beta(E' - E)} \quad (6.4)$$

En notant $W(E \rightarrow E')$ le taux de transition total entre deux énergies E et E' ,

$$W(E \rightarrow E') = w(E \rightarrow E')f(E, E'), \quad (6.5)$$

la relation (6.4) devient grâce à (6.3) :

$$\rho(E)e^{-\beta E}W(E \rightarrow E') = \rho(E')e^{-\beta E'}W(E' \rightarrow E) \quad (6.6)$$

A partir de la relation (6.3), il est possible de donner des formes générales que peut revêtir $f(E, E')$ (et $f(E', E)$). En effet, nous pouvons écrire $f(E, E')$ comme³ :

$$f(E, E') = \exp(s(E, E') + A(E, E')) \equiv S(E, E')e^{A(E, E')} \quad (6.7)$$

où $s(E, E')$ est une fonction symétrique de E et E' , i.e. $s(E, E') = s(E', E)$. $S(E, E')$ est donc une fonction positive symétrique. $A(E, E')$ est une fonction antisymétrique : $A(E, E') = -A(E', E)$. En prenant le logarithme de (6.3), nous obtenons :

$$A(E, E') = \frac{1}{2}(\ln(\rho(E')) - \ln(\rho(E))) \quad (6.8)$$

Ainsi, la partie antisymétrique de $\ln f(E, E')$ est fixée. Au contraire une grande liberté est permise pour $S(E, E')$ avec la seule condition de normalisation de $f(E, E')$, i.e. $\int dE' f(E, E') = 1$ où l'intégrale porte sur toutes les énergies du système. C'est sur cette donnée de $S(E, E')$ que nous allons agir.

Pour résumer, si nous considérons une dynamique Métropolis, un choix général de dynamique dans un espace des phases continu en énergie est donné par :

$$\begin{aligned} W(E \rightarrow E') &= \begin{cases} e^{-\beta(E' - E)}f(E, E') & \text{si } E' > E \\ f(E, E') & \text{si } E > E' \end{cases} \\ f(E, E') &= e^{\frac{1}{2}(\ln(\rho(E')) - \ln(\rho(E)))} S(E, E') \end{aligned} \quad (6.9)$$

Comme par construction $f(E, E')$ vérifie (6.3), nous pouvons facilement montrer que cette dynamique vérifie le bilan détaillé (6.6). L'équation maîtresse associée à ce processus s'écrit formellement :

$$\frac{1}{\Gamma_0} \frac{\partial P(E, t)}{\partial t} = -P(E, t) \int dE' W(E \rightarrow E') + \int dE' P(E', t) W(E' \rightarrow E) \quad (6.10)$$

Γ_0 sera désormais pris égal à l'unité.

²Attention ! : le taux de transition w est identique au taux W des chapitres précédents concernant le BMM et le BTM.

³Il suffit de prendre $s(E, E') = (\ln(f(E, E')) + \ln(f(E', E)))/2$ et $A(E, E') = (\ln(f(E, E')) - \ln(f(E', E)))/2$.

Le principe de notre construction est de choisir une forme particulière de $S(E, E')$ pour une densité gaussienne d'énergie de façon à obtenir les propriétés discutées dans l'introduction du chapitre. Ce choix correspond en fait à restreindre aux énergies voisines les énergies accessibles à partir d'un état. Il est important de comprendre que notre choix est *arbitraire* et que tout autre choix de $S(E, E')$ est légitime. A ce sujet, il serait intéressant dans le futur de dégager des comportements génériques suivant les propriétés de $\rho(E)$ et de $S(E, E')$.

Avant de rentrer dans la description du modèle, notons que le BTM et le BMM s'inscrivent dans ce cadre général de formulation. En effet, pour ces modèles tous les états d'énergies sont accessibles avec une mesure plate : $f(E, E') = \rho(E')$.

6.2 Définition du modèle

6.2.1 Densité d'états

Nous allons étudier un système dont les énergies sont *indépendantes* et distribuées suivant une loi gaussienne centrée :

$$\rho_G(E) = \frac{1}{\sqrt{N\pi J^2}} \exp\left(-\frac{E^2}{NJ^2}\right) \quad (6.11)$$

Par souci de consistance nous rappelons rapidement les propriétés thermodynamiques de ce modèle (le REM [54]), à savoir qu'il existe une énergie critique définie par :

$$E_c = -J\sqrt{\ln 2N} \quad (6.12)$$

en-dessous de laquelle il n'y a plus d'états accessibles au système. Incidemment, il existe une température critique :

$$T_c = \frac{NJ^2}{|E_c|} \quad (6.13)$$

en-dessous de laquelle le système se gèle dans un nombre fini d'états d'énergie E_c . L'entropie s'annule alors. Pour des température $T > T_c$, une méthode de point de col donne une énergie moyenne égale à :

$$\langle E \rangle_T = -\frac{NJ^2}{2T} \quad (6.14)$$

Cette énergie est extensive, ce qui est à mettre en contraste avec le cas d'une densité purement exponentielle d'état. Cette propriété est d'ailleurs à l'origine des difficultés pour appliquer une dynamique microscopique à ce modèle (voir chapitre sur le BTM). Lorsque $T < T_c$, l'énergie vaut celle de l'état fondamental, soit E_c .

6.2.2 Choix de la connectivité

Etant donnée cette distribution en énergie, nous pouvons créer toute sorte de modèles en jouant sur la connectivité des états. Par exemple, si tous les états sont connectés, le système peut ressembler fortement au BTM ou au BMM suivant la forme des taux de transitions.

Notre modèle est basé sur une connectivité locale des énergies. Concrètement, les états accessibles à partir d'un état d'énergie dans $[E, E + dE]$ auront des énergie E' située dans une fenêtre $[E - KJ, E + KJ]$ où $K \ll N$. Par conséquent la fonction symétrique $S(E, E')$ comporte une fonction fenêtre du type $F_E(E') = \Theta(E - E' + KJ)\Theta(E - E' - KJ)$ où $\Theta(\bullet)$

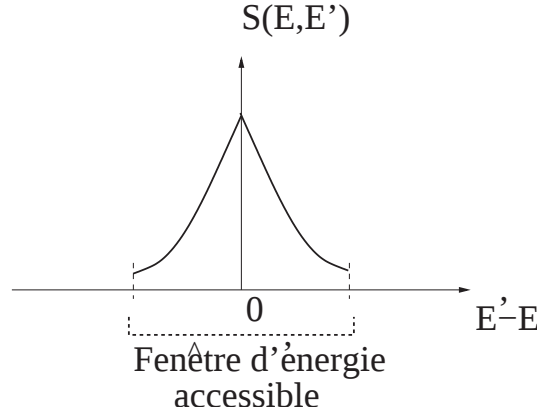


FIG. 6.1 – Allure de la fonction symétrique intervenant dans la connectivité des états en énergie. Seules des énergies dans la fenêtre indiquée en pointillés sont permises.

est la fonction d'Heaviside. Par souci de clarté, nous notons désormais F_E cette fenêtre. Finalement nous choisissons (*a priori* arbitrairement) :

$$S(E, E') = e^{-\frac{\beta_d}{2}|E'-E|} F_E \quad (6.15)$$

La forme typique de cette fonction symétrique est donnée par Fig. (6.1). En utilisant (6.9), nous obtenons :

$$f(E, E') \sim e^{-\frac{E'^2}{2NJ^2} + \frac{E^2}{2NJ^2} - \frac{\beta_d}{2}|E'-E|} F_E \quad (6.16)$$

Il est maintenant nécessaire de normaliser $f(E, E')$. Avant de procéder à cette normalisation, faisons tendre N vers l'infini tel que $K/N \rightarrow 0$. Dans ce cas, f est donnée par :

$$f(E, E') \sim e^{\frac{\beta_E}{2}(E'-E) - \frac{\beta_d}{2}|E'-E|} F_E \quad (6.17)$$

où désormais nous adoptons la notation $\beta_E = 2|E|/NJ^2$. Par exemple, à haute température, nous avons la relation $\beta_{\langle E \rangle_T} = \beta$ où $\langle E \rangle_T$ est l'énergie moyenne du système. Nous pourrions croire que la partie $\frac{\beta_E}{2}(E' - E)$ n'est plus antisymétrique. Cependant pour des énergies $E' \in [E - KJ, E + KJ]$, dans la limite $K/N \rightarrow 0$, $\beta_{E'}$ est constant et vaut β_E , justifiant donc le caractère antisymétrique de $\frac{\beta_E}{2}(E' - E)$.

Sous cette forme, il est facile de normaliser $f(E, E')$. Nous obtenons après intégration sur E' :

$$\begin{aligned} f(E, E') &= \frac{1}{Z(E)} e^{\frac{\beta_E}{2}(E'-E) - \frac{\beta_d}{2}|E'-E|} F_E \\ Z(E) &= \frac{2}{\beta_E - \beta_d} \left(e^{\frac{\beta_E - \beta_d}{2} KJ} - 1 \right) + \frac{2}{\beta_E + \beta_d} \left(e^{-\frac{\beta_E + \beta_d}{2} KJ} - 1 \right) \end{aligned} \quad (6.18)$$

De la même façon que précédemment, la présence de $Z(E)$ ne modifie en rien les propriétés de $f(E, E')$ puisque ce facteur, dans la limite $K/N \rightarrow 0$, et *seulement* dans cette limite, est constant sur la fenêtre F_E des énergies accessibles.

Nous allons nous placer dans la limite $K \rightarrow \infty$, toujours en respectant $K/N \rightarrow 0$. Dans ce cas, la deuxième exponentielle de $Z(E)$ tend vers 0 quelque soit la valeur de l'énergie. $Z(E)$ se simplifie et vaut donc :

$$Z(E) = \frac{2\beta_E}{\beta_d^2 - \beta_E^2} + \frac{2}{\beta_E - \beta_d} e^{\frac{\beta_E - \beta_d}{2} KJ} \quad (6.19)$$

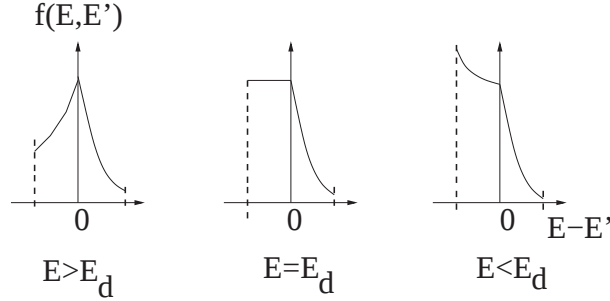


FIG. 6.2 – Allure de la fonction de répartition des énergies des états connectés à un état d'énergie comprise entre E et $E + dE$. En-dessous de E_d , l'exponentielle devient croissante pour les énergies supérieures. Dans le cas d'une grande fenêtre, la contribution des énergies inférieures devient négligeable. La distribution vers ces énergies est toujours exponentiellement décroissante.

Pour résumer, le modèle que nous proposons peut être défini par les propriétés suivantes :

- L'évolution du système est donnée par une équation maîtresse dans l'espace des énergies se mettant sous la forme :

$$\frac{\partial P(E, t)}{\partial t} = -P(E, t) \int_{-|E_c|}^{|E_c|} dE' W(E \rightarrow E') + \int_{-|E_c|}^{|E_c|} dE' P(E', t) W(E' \rightarrow E) \quad (6.20)$$

où $E_c = -J\sqrt{\ln 2}N$ est l'énergie de l'état fondamental.

- Les taux de transitions $W(E' \rightarrow E)$ sont donnés par :

$$W(E \rightarrow E') = \begin{cases} e^{-\beta(E'-E)} f(E, E') & \text{si } E' > E \\ f(E, E') & \text{si } E > E' \end{cases}$$

$$f(E, E') = \frac{1}{Z(E)} e^{\frac{\beta_E}{2}(E'-E) - \frac{\beta_d}{2}|E'-E|} F_E$$

$$Z(E) = \frac{2\beta_E}{\beta_d^2 - \beta_E^2} + \frac{2}{\beta_E - \beta_d} e^{\frac{\beta_E - \beta_d}{2} KJ} \quad (6.21)$$

où $\beta_E \equiv 2|E|/NJ^2$. $\beta_d < \beta_c$ où $\beta_c = \sqrt{\ln 2}/J$ correspond à la température de transition thermodynamique.

- N et K sont pris dans la limite infinie sous la contrainte $K/N \rightarrow 0$.

Ces caractéristiques ne sont évidemment pas parlantes. Essayons alors de rappeler ce que nous avons fait : nous sommes partis d'une densité gaussienne en énergie et nous avons restreint les connexions entre états suivant leurs énergies, l'objectif étant de connecter seulement des états ayant des énergies proches en énergie. Pour réaliser une telle dynamique, le respect du bilan détaillé impose des répartitions spécifiques (prescriptions (6.3) et (6.6)) pour le choix de ces énergies. Justifions le choix de notre répartition. En examinant les deux dernières relations de (6.21), deux régimes doivent être distingués suivant la valeur de β_E . En effet, si $\beta_E < \beta_d$, alors $f(E, E')$ est donnée par deux exponentielles décroissantes lorsque $E' > E$ et $E' < E$ (Fig. (6.2)) dont les pentes à l'origine sont qualitativement du même ordre. Ainsi, il y a à peu près autant d'états accessibles de part et d'autre de E . Au contraire, lorsque $\beta_E > \beta_d$, la distribution des énergies $E' > E$ est une exponentielle croissante alors que les énergies $E' < E$ restent distribuées suivant une exponentielle décroissante. Ainsi, dans ce régime, la proportion relative d'états d'énergie plus petite que E devient négligeable lorsque $K \rightarrow \infty$. La limite $\beta_E = \beta_d$, i.e. $E_d = -NJ^2\beta_d/2$, sépare donc deux types d'état suivant leur énergie (ceci dans la limite $K \rightarrow \infty$ suivant laquelle nous

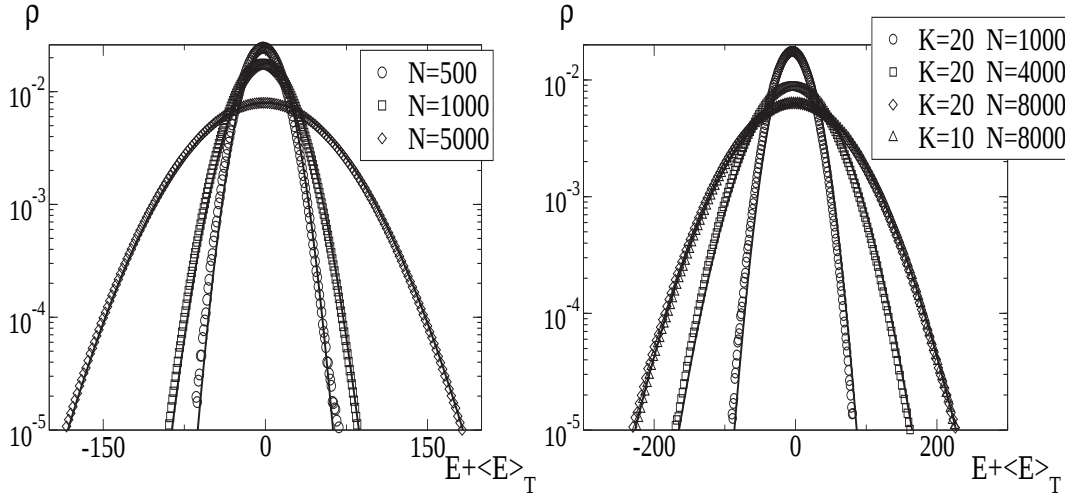


FIG. 6.3 – Distribution ρ des énergies à l'équilibre à haute température. $J = 1$. $T_d = 3$. $T = 5$. Pour ces simulations $K = 20$. L'énergie moyenne de la distribution est déplacée à zéro. Les courbes avec des symboles sont les réalisations numériques. Les courbes pleines sont les prédictions de l'équilibre de Boltzmann. Plus N est grand, plus la distribution est proche de celle de Boltzmann.

FIG. 6.4 – Même distribution mais à basse température. A l'instant initial, le système se trouve à son énergie moyenne pour éviter toute la phase de vieillissement. Plus le rapport K/N est petit, plus la distribution est proche de celle de Boltzmann.

travaillons). Si maintenant nous donnons une dynamique du type Métropolis, nous voyons que pour des énergies $E - E_d \gg NJ/K$, les états se comportent tous comme des points-selles alors que pour des énergies $E_d - E \gg NJ/K$, les états se comportent tous comme des minima. En prenant $E = \langle E \rangle_T$, ces deux régimes correspondent respectivement à $T > T_d$ et $T < T_d$. Par conséquent, la structure statique de l'espace de phases plus la donnée d'une dynamique Métropolis montre que le système se comporte qualitativement comme les verres de spins champ moyen (ou de façon identique comme la théorie de couplage de modes pour les liquides) pour lesquels un seuil en énergie libre partage les états en points-selles et en minima. C'est dans ce cadre de pensée que nous allons maintenant étudier plus en détail ce modèle.

6.3 Relaxation à l'équilibre

Etudions premièrement les propriétés du système à l'équilibre. En utilisant toujours le fait que $Z(E)$ et β_E sont constants sur la fenêtre F_E , il est possible de montrer que la solution stationnaire (si elle existe) de l'équation maîtresse (6.20) est donnée par l'équilibre de Boltzmann avec une dégénérescence gaussienne :

$$P_{eq}(E) \sim e^{-E^2/NJ^2 - \beta E} \quad (6.22)$$

justifiant ainsi que ce modèle vérifie bien le bilan détaillé. A ce titre, les simulations Monte Carlo de la dynamique proposée confirme bien cette distribution lorsque $N \rightarrow \infty$ pour

des températures⁴ $T > T_d$ mais aussi pour $T > T_c$ (Fig. (6.3) et (6.4)). Dans ce dernier cas, à l'instant initial, l'énergie du système vaut l'énergie moyenne pour éviter le régime de vieillissement. Lorsque⁵ $T < T_c$, la distribution se concentre autour de E_c dans une fenêtre de taille finie (à l'opposé de $\sqrt{N}$ à haute température).

Dans ce qui suit, nous analysons le mode de relaxation lorsque $T > T_d$ et montrons que dans la limite $K \rightarrow \infty$, les temps de relaxation divergent comme une loi de puissance.

6.3.1 Phase haute température

Il est intéressant de se demander comment fonctionne la relaxation à l'équilibre lorsque $T > T_d$. Dans l'esprit de la transition entre régime activé et régime entropique étudiée dans le chapitre précédent, une quantité pertinente pour l'évolution du système est l'énergie moyenne gagnée à chaque saut d'état. Comme d'habitude, à partir de l'énergie E , l'énergie gagnée Δ_E (ou perdue suivant le signe) s'écrit :

$$\Delta_E = \frac{\int_{E-KJ}^{E+KJ} dE' E' W(E \rightarrow E')}{\int_{E-KJ}^{E+KJ} dE' W(E \rightarrow E')} - E \quad (6.23)$$

Dans la limite $K/N \rightarrow 0$, il est possible de montrer que ce gain s'annule pour l'énergie $E_{\text{nulle}} = \langle E \rangle_T = -\frac{NJ^2}{2T}$. Pour des énergies supérieures le gain est négatif et inversement pour des énergies inférieures. La dynamique dans l'espace des énergies à température donnée est donc très intuitive et peut s'interpréter comme 'une dynamique de Langevin' dans un potentiel d'énergie $V(E)$ dont le minimum est situé en $\langle E \rangle_T$ qui est la valeur moyenne de l'énergie à température T mais aussi la valeur la plus probable. Pour une discussion plus détaillée et plus technique, nous renvoyons le lecteur à l'annexe B de cette deuxième partie.

Une propriété essentielle de notre description est qu'il est facile de montrer que le temps microscopique associé à un essai pour sortir d'un état d'énergie $E - E_d \gg NJ/K$ est fini. En effet, en utilisant les deux dernières relations de (6.21), ce temps est donné dans la limite $K/N \rightarrow 0$ par :

$$\begin{aligned} \tau(E) &= \tau_0 \left(\int_{E-KJ}^{E+KJ} dE' W(E \rightarrow E') \right)^{-1} \\ &= \frac{1}{2} \tau_0 Z(E) \left((2\beta + \beta_d - \beta_E)^{-1} + (\beta_d + \beta_E)^{-1} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (6.24)$$

qui est fini pour toute température $T > T_d$ et pour toute énergie $E - E_d \gg NJ/K$. Comme à l'équilibre $\langle E \rangle_T = -NJ^2/2T$, la donnée $T > T_d$ implique que $E - E_d \sim NJ^2(\beta - \beta_d)/2$ est d'ordre N . Ainsi, l'écart-type étant d'ordre $\sqrt{N}$, $T > T_d$ implique $E - E_d \gg NJ/K$, ce qui montre la consistance du calcul.

Nous n'avons donc plus, dans la limite thermodynamique, de problèmes de divergence des temps microscopiques rencontrés dans le REM. Par ailleurs, comme à chaque sortie l'énergie gagnée (ou perdue) est finie, le temps microscopique naturel de ce problème est $\tau_0 \propto 1/N$. En effet, pour des temps d'ordre 1, le système à haute température doit thermaliser, c'est-à-dire qu'après un changement de température Δ_T , il doit être capable de parcourir des distances énergétiques d'ordre $\Delta_T N$.

⁴A haute température, nous avons aussi vérifié que toute observable vérifiait FDT.

⁵Pour réaliser ces simulations, chaque fois qu'une énergie tirée est plus petite que E_c , le système reste à l'énergie à laquelle il se trouvait puisque par définition de la distribution gaussienne, il n'y a pas d'états en-dessous de E_c .

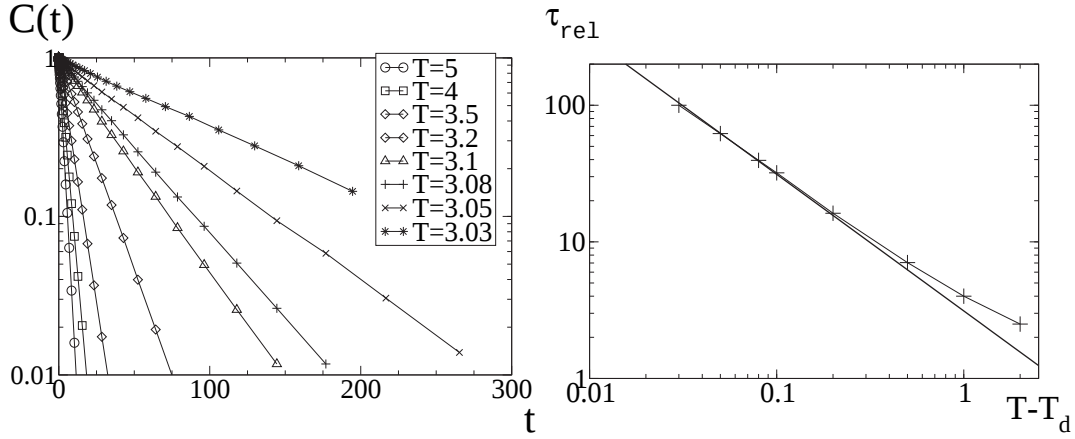


FIG. 6.5 – Temps de relaxation du système à haute température. $N = 5 \times 10^5$. $K = 1000$. A gauche est montrée la relaxation d'observables se décorrélant d'un facteur $1 - 1/N$ à chaque saut. Le temps est compté en nombre de 'sweep' (temps Monte Carlo divisé par N). Les relaxations sont exponentielles. De gauche à droite, $T = 5, 4, 3.5, 3.2, 3.1, 3.08, 3.05, 3.03$. $T_d = 3$. A droite, la figure montre l'évolution des temps caractéristiques des exponentielles. La droite épaisse en trait plein est une loi de puissance avec un exposant -1 .

6.3.2 Divergence des temps de relaxation

Pour toute température $T > T_d$, le système relaxe rapidement vers l'équilibre et tout le poids de la probabilité est concentré sur l'énergie moyenne. Ce n'est seulement que lorsque la connectivité vers des états descendants va diminuer que le ralentissement de la dynamique se fera sentir. Cette diminution se caractérise alors avec des poids de plus en plus fort pour des connexions vers les états de haute énergie. Au fur et à mesure que E s'approche de E_d , la distribution des connexions vers les hautes énergies devient de plus en plus plate pour devenir complètement plate à E_d (Fig. (6.2)). Comme des énergies d'ordre K peuvent être atteintes, $Z(E)$ est de l'ordre de K . Par conséquent, en utilisant la formule (6.24), nous voyons qu'à cette énergie, le temps caractéristique Monte Carlo pour obtenir une énergie plus petite que E_d est de l'ordre de K/N . Après N pas Monte Carlo (définissant un pas de temps microscopique), ce temps est d'ordre K qui tend vers l'infini dans notre modèle. Par conséquent, lorsque $T = T_d$ le temps de relaxation est infini. Le système devient hors-équilibre. Nous trouvons une nouvelle fois un comportement symptomatique des verres champ moyen, à savoir que le temps de relaxation diverge car l'espace des phases est de moins en moins connecté vers des basses énergies.

Etablissons maintenant quantitativement cette divergence. Pour ceci, nous pouvons calculer le temps de vie de l'état d'énergie la plus probable, i.e. l'énergie moyenne, pour $T > T_d$ étant donné qu'à haute température l'essentiel de l'information thermodynamique et dynamique est concentré sur cet état. En utilisant la formule (6.24), nous calculons :

$$\tau(\langle E \rangle_T) = \tau_0 Z(\langle E \rangle_T) (\beta + \beta_d) \quad (6.25)$$

A l'approche de T_d , seul le terme $Z(\langle E \rangle_T)$ diverge. Par ailleurs, selon (6.21), cette divergence est en puissance -1 . Ainsi, nous trouvons une divergence du temps de relaxation du type :

$$\tau_{relax} \sim (T - T_d)^{-1} \quad (6.26)$$

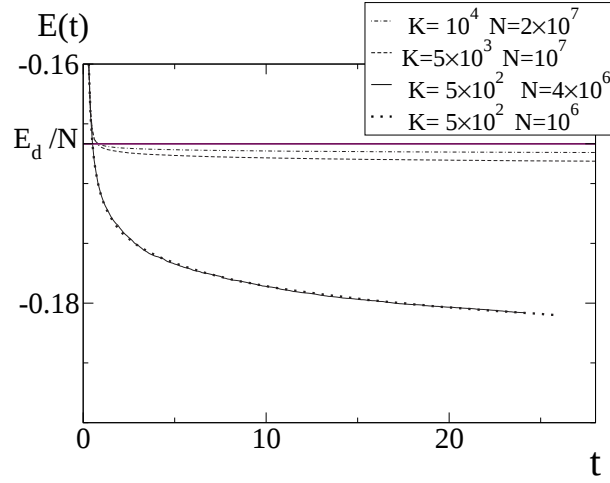


FIG. 6.6 – Evolution temporelle de l'énergie par particule lors d'une trempe en température. Le temps est microscopique (temps Monte Carlo divisé par N). Premièrement, en des temps d'ordre 1 le système atteint l'énergie E_d/N . Ensuite, la descente est fortement ralentie. Nous voyons qu'elle l'est d'autant plus que K est grand, indépendamment de N . En effet, pour un même K , différents N donnent le même comportement (courbes du bas superposées). Dans la limite $K \rightarrow \infty$, l'énergie par particule ne descend jamais en-dessous de E_d/N .

Cette divergence est bien vérifiée par les simulations numériques (Fig. (6.5)). De nouveau, le comportement 'divergence des temps de relaxation en loi de puissance' ressemble à celui des verres champ moyen.

Maintenant nous allons étudier le comportement lorsque $T < T_d$

6.4 La phase basse température

Quelle est la dynamique du modèle partant initialement d'une situation à l'équilibre à $T_i > T_d$ et subissant une trempe en température jusqu'à une température finale $T_f < T_d$? Premièrement, nous voyons sur Fig. (6.6) que le système décroît rapidement jusqu'à l'énergie E_d . Ensuite les choses se gâtent. En effet, pour des énergies $E_d - E = \alpha N$ où α est un réel positif non nul, le temps microscopique d'évolution échelle comme $e^{\alpha K/J^2}$. Ainsi, pour tout temps le système reste dans un environ de taille finie autour de E_d lorsque $K \rightarrow \infty$. Ce comportement est bien confirmé par les simulations numériques (Fig. (6.6)). E_d se comporte donc comme un seuil en-dessous duquel le système ne visite pas d'énergie dans la limite $K \rightarrow \infty$. Lorsque pour un paramètre quelconque P , un processus est bloqué dans sa descente en énergie dans la limite $P \rightarrow \infty$ mais reste possible lorsque P est fini, le mécanisme d'évolution est dit activé. Par exemple, pour le p -spins, $P = N$ la taille du système. Ici $P = K$. Une nouvelle fois, le comportement est très similaire aux verres de spins champ moyen : en-dessous d'une énergie seuil, la dynamique est activée.

6.4.1 Lois de corrélation sans champ

Nous n'avons pas encore fait l'étude analytique de la descente en énergie et des lois de vieillissement de différentes observables. Cependant, les simulations numériques donnent

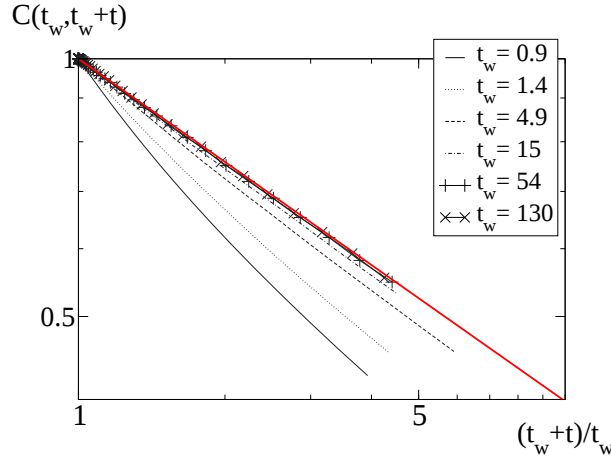


FIG. 6.7 – Fonctions de corrélation à température nulle pour une observable se décorrélant d'un facteur $(1 - 5 \times 10^{-4})$ à chaque saut. La loi d'échelle $t_w/(t_w + t)$ devient de plus en plus pertinente à mesure que t_w augmente. Les temps ici sont donnés en temps microscopique, c'est-à-dire que ce sont les temps Monte Carlo divisés par N . $N = 10^6$ donc $K = 500$. La droite épaisse en trait plein est une loi de puissance avec un exposant -0.4 .

des résultats très encourageants. En effet, en considérant des observables se décorrélant d'un facteur $(1 - K/N)$ à chaque saut, nous avons observé numériquement que les lois de corrélation à deux temps tendent vers une forme de vieillissement de la forme :

$$C(t_w, t_w + t) = \left(\frac{t_w + t}{t_w} \right)^{-\alpha} \quad (6.27)$$

où α est un paramètre positif qui ne dépend ni de K , ni de N , dans la limite $K \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, $K/N \rightarrow 0$. Ainsi, à l'opposé du modèle BMM où nous avons des corrélations qui n'évoluaient plus pour des observables douces, i.e. des observables dont le facteur de décorrélation tend vers 1 dans la limite thermodynamique, nous obtenons pour notre modèle un comportement asymptotique bien défini. En outre, ce comportement est une nouvelle fois qualitativement similaire aux lois de vieillissement des verres champ moyen.

Nous donnons comme exemple le cas de la température nulle. A cette température, nous voyons que les lois tendent vers un exposant $\alpha \sim -0.4$ (Fig. (6.7)). Lors de l'obtention de ces lois, les énergies restent supérieures à $E_d - 10 \times N/K$.

Il serait vraiment intéressant de déterminer analytiquement les lois obtenues. Pour l'instant, contentons-nous de donner un argument très qualitatif montrant qu'il est possible pour ce genre de dynamique d'obtenir des lois ne dépendant pas de K/N . Etudions en effet un cas simplifié pour lequel $Z(E)$ est donné par :

$$Z(E) = J e^{-KE/NJ} \quad (6.28)$$

et plaçons-nous à température nulle. Supposons maintenant que l'énergie perdue à chaque saut soit indépendante de E et soit typiquement égale à J . Alors en utilisant les méthodes pour déterminer la divergence du temps de relaxation, il est possible de montrer que le temps de vie typique d'un état est donné par :

$$\tau(E) = \frac{Z(E)}{NJ} \sim \frac{e^{-KE/NJ}}{N} \quad (6.29)$$

En exprimant le temp courant comme la somme de ces temps sur les énergies visitées, nous trouvons par passage à une intégrale de Riemann :

$$t \sim \frac{N}{K} e^{-KE/NJ} \quad (6.30)$$

Ainsi, nous avons la relation $E(t_w) - E(t) = \frac{NJ}{K} \ln(t/t_w)$, donnant pour la corrélation d'une observable se décorrélatant d'un facteur $1 - \alpha K/N$:

$$C(t_w, t_w + t) \sim \left(\frac{t_w}{t} \right)^\alpha \quad (6.31)$$

Evidemment, ces calculs sont dépourvus de toute justification. Nous les donnons simplement pour comprendre d'où peut venir le vieillissement dans des régimes entropiques typiques de ceux que nous rencontrons ici.

Résumons le scénario que nous obtenons lorsque nous faisons une trempe à basse température : Premièrement, le système relaxe rapidement vers les énergies E_d . A partir de ce seuil, le système vieillit et son énergie ne décroît plus macroscopiquement.

Sans prétendre résoudre les verres de type champ moyen, nous voyons tout de même que cette approche est très prometteuse car elle donne des comportements très similaires. Une confirmation supplémentaire de cette similarité est celle de l'étude de la réponse. En effet, nous allons montrer que le modèle présenté suit une FDR linéaire dont on peut extraire une température effective plus grande que celle du bain thermique. En outre, lorsque $T = T_d$, $T_{\text{eff}} = T_d$ et $T_{\text{eff}} \neq 0$ pour $T = 0$.

6.5 FDR pour des régimes purement entropiques

Lorsque le régime est entropique, c'est-à-dire que le système procède à une descente en énergie, plus ou moins ralentie par le nombre décroissant de directions ascendantes, il est possible de définir dans certains cas une température effective ne dépendant pas a priori du modèle considéré. En effet, lorsque :

1. le régime est entropique, i.e. à chaque saut d'état le système diminue en moyenne d'une énergie finie Δ ,
2. à partir d'une énergie E , le système est capable d'atteindre des énergies E' telles que $|E' - E| \gg \Delta$,
3. les observables impliquées sont des *observables douces indépendantes de l'énergie*. Par 'douce', nous rappelons que cela implique qu'à chaque saut d'état, le facteur de décorrélation de l'observable tend vers 1 dans la limite thermodynamique. L'exemple le plus simple est celui de l'aimantation pour une dynamique à un seul retournement de spin puisque le facteur de décorrélation est $1 - 1/N$,
4. la dynamique est de type Métropolis,

il est possible (annexe C) de démontrer la formule suivante pour la température effective, dans la seule condition que le système reste à énergie E pour un secteur de temps donné (un intervalle de temps permettant au système de se décorréler) :

$$\begin{aligned} \beta_{\text{eff}} &= \frac{2}{G(E, u)} \frac{\partial G(E, u)}{\partial u} \Big|_{u=0} \\ G(E, u) &= \int_{-\infty}^{E+u} dE' W(E, E') + e^{\beta u} \int_{E+u}^{\infty} dE' W(E, E') \end{aligned} \quad (6.32)$$

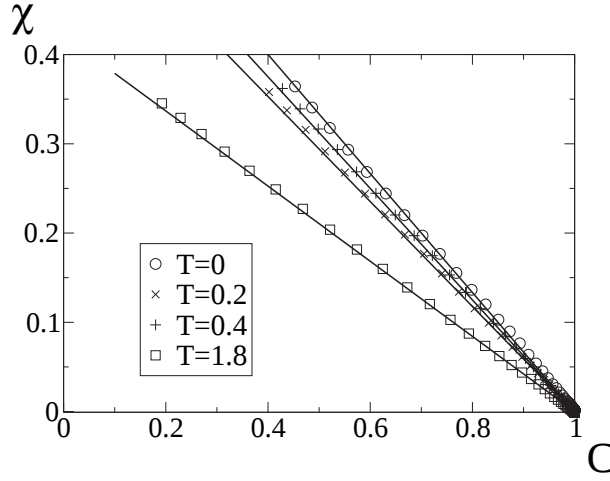


FIG. 6.8 – *FDR pour différentes températures $T < T_d = 3$. Les simulations ont été effectuées avec $N = 10^6$ et $K = 500$. Pour obtenir ces courbes, le système à l'instant initial est placé à une énergie $E = E_d - 3N/K$ et la corrélation est mesurée à partir de $t = 0$, ainsi que la réponse. Cette dernière est obtenue en prenant une loi stochastique d'évolution pour l'observable A donnée par $A' = A(1 - K/N) + \sqrt{2K}\zeta$ où ζ est une variable aléatoire gaussienne centrée réduite (voir équation (A.22) de l'annexe A).*

Quand bien même nous ne sommes pas arrivés à obtenir des lois de vieillissement pour la densité gaussienne avec dynamique locale, nous pouvons obtenir la FDR lors du régime de vieillissement. En effet, pour toute énergie $E > E_c$, les quatre conditions mentionnées pour obtenir la formule précédente sont vérifiées lorsque $T < T_d$ si évidemment nous choisissons de traiter des observables douces. En remplaçant $W(E, E')$ par son expression, nous obtenons :

$$G(u) = 2(\beta_E + \beta_d)^{-1} e^{(\beta_E + \beta_d)/2} - 2(\beta_E - \beta_d - 2\beta)^{-1} e^{(\beta_E - \beta_d)/2} \quad (6.33)$$

soit :

$$\beta_{\text{eff}}(E) = \frac{\beta(\beta_E + \beta_d)}{\beta + \beta_d} \quad (6.34)$$

Cette définition dépend a priori de E mais dans le cas d'observables douces se décorréant d'un facteur $1 - \alpha K/N$ à chaque saut, il suffit d'avoir fait de l'ordre de N/K sauts pour se décorréler complètement. Pour ce nombre de sauts, β_E a changé seulement d'un facteur additif $1/K$. Par conséquent, dans la limite $K \rightarrow \infty$, β_E reste constant lors de la décorrélation de l'observable. Cette formule est donc valide pour toute énergie. En particulier, nous avons vu que le système restait bloqué à E_d donc $\beta_E = \beta_d$. Dans ce cas :

$$\beta_{\text{eff}} = \frac{2\beta\beta_d}{\beta + \beta_d} \quad (6.35)$$

Cette relation est très bien vérifiée par les simulations numériques pour différentes températures $T < T_d$ (Fig. (6.8)). Il est alors remarquable d'obtenir une température effective non nulle à température nulle ($T_{\text{eff}} = T_d/2$) et égale à la température du bain à la transition dynamique. La seule différence avec le p -spins champ moyen, c'est que pour ce dernier la température effective a tendance à augmenter à mesure que T diminue alors qu'ici

elle diminue. Mentionnons à ce stade que nous sommes en train de mener des travaux montrant dans quelle mesure il est possible de tendre vers une température effective constante et égale à T_d lorsque nous considérons des taux de transitions différents.

Pour finir, remarquons que cette température effective décroît lorsque l'énergie visitée par le système diminue. Bien que cette définition de la température se fasse dans le cas $K \rightarrow \infty$, c'est-à-dire lorsque l'énergie reste à E_d , si par la pensée⁶ nous pouvions atteindre des temps astronomiques plus grand que $\sim e^K$, nous verrions un processus de thermalisation de la température effective. En effet, si $T_c < T < T_d$ le système diminue son énergie jusqu'à atteindre l'énergie moyenne pour laquelle $\beta_E = \beta$. Pour cette valeur nous voyons bien que $\beta_{\text{eff}} = \beta$. Encore plus intéressant, si $T < T_c$, nous pouvons adapter notre formule de la température effective lorsqu'une borne inférieure (E_c) limite les états accessibles et voir que celle-ci tend bien vers β à mesure que E s'approche de E_c (voir Annexe C).

6.6 Résumé et perspectives

Nous venons de voir un modèle présentant tous les aspects de la dynamique des verres champ moyens. La description est basée sur une description dans l'espace des phases avec une évolution locale dans les énergies, ce qui est radicalement différent des modèles BMM et BTM.

Plusieurs points nous semblent intéressants :

- Premièrement, le modèle que nous proposons semble s'inscrire dans une grande famille de systèmes qu'il serait intéressant d'étudier à travers les propriétés de la fonction symétrique de la répartition des connexions entre états. Cette *a priori* diversité dans les possibles comportements (par exemple, le BMM appartient à cette famille et est très différent de notre modèle) est un ingrédient encourageant pour comprendre la diversité des raisons pouvant donner lieu à du vieillissement.
- Deuxièmement, la formule (6.32) proposée pour la température effective des processus entropiques est très générale (confirmant une nouvelle fois l'aspect universel de cette notion) et donne des résultats incompatibles avec la température effective d'Edwards [69] aussi bien pour le BMM que le modèle gaussien en énergie avec dynamique locale. Au-delà de cette incompatibilité, il serait intéressant de voir dans quelles limites ces deux notions de température sont compatibles.
- Enfin, l'aspect le plus intéressant de notre démarche est qu'elle conduit à entrevoir un possible lien entre les modèles d'espace des phases et les descriptions microscopiques de type champ moyen puisque la phénoménologie que nous obtenons est très similaire à ces derniers. A notre connaissance, cette connexion entre ces deux approches n'a jamais été mise en évidence.

En conclusion, il semble donc indispensable d'approfondir la voie de recherche introduite dans ce chapitre pour affiner notre compréhension des phénomènes de dynamique vitreuse.

⁶Nous pourrions éventuellement amener physiquement (i.e. numériquement) le système à des énergies $E < E_d$.

Annexes

Annexe A

Réalisations du BMM

A.1 L’horizon lorsque $1 \ll K \ll N$

Avec K flips, il est possible de générer $\binom{N}{K}$ configurations, c’est-à-dire N^K lorsque $K \ll N$. La distribution du minimum d’un ensemble de M énergies distribuées suivant l’exponentielle (5.2) tombe dans la classe d’universalité de Gumbel [72] concernant la classification de la statistique des valeurs extrêmes. Cette distribution est très centrée autour de sa valeur la plus probable [54] donnée par $E_{\text{probable}} \simeq -T_g \ln M$. En effet, en notant e l’écart à cette valeur, la distribution de cet écart est donnée par :

$$P(e) = \beta_g \exp(\beta_g e - \exp(\beta_g e)) \quad (\text{A.1})$$

Les écarts absolus sont donc au mieux de T_g , à comparer avec E_{probable} qui diverge dans la limite thermodynamique, i.e. pour M grand. Ainsi, à chaque pas le minimum d’énergie généré par la dynamique à K retournements n’est pas plus basse que $E_h^K \simeq -KT_g \ln N$, ce qui définit un horizon pour cette même dynamique. Ainsi, pour des faibles valeurs de K , l’horizon est sensiblement le même que lorsque $K = 1$. Par conséquent, le processus devient activé assez rapidement. Par contre, lorsque K tend vers l’infini, tout en restant plus petit que N , cet horizon s’abîme dans les profondeurs de l’espace des phases laissant place à un régime où la dynamique est alors équivalente au BMM pour lequel toutes les énergies sont accessibles. La seule différence se situe dans la corrélation entre états successifs du système.

A.2 Dérivation de la température effective

Nous étudions, dans le contexte du BMM, l’émergence pour des observables douces d’une température effective $T_g/2$ bien définie. A cette fin, nous étudions premièrement le cas de l’aimantation pour un système composé de N spins et pour lequel K spins au maximum peuvent être retournés. Ainsi, l’aimantation est considérée indépendante de l’énergie et l’évolution de l’énergie est donnée par le BMM doté d’une dynamique Métropolis (5.5). Nous étudions la FDR pour $T < T_g/2$, en prenant les limites dans l’ordre suivant : $N \rightarrow \infty$, $h \rightarrow 0$ et $K \rightarrow \infty$. Ensuite, nous généralisons le résultat au cas plus général d’observables douces qui se décorrèlent d’un facteur $(1 - K/N)$.

A.2.1 L'aimantation à température nulle

Nous commençons par étudier le problème à température nulle avec comme observable douce, l'aimantation. Pour obtenir la FDR, il est nécessaire d'avoir la relation entre l'aimantation M avant un saut et l'aimantation M' après. Le système est pris à une énergie E , en présence d'un champ magnétique extérieur h .

Si K spins sont choisis au hasard et sont retournés avec une probabilité $\frac{1}{2}$, alors $K/2$ spins sont retournés en moyenne. En supposant que K est grand ($K \gg 1$), les fluctuations autour de cette valeur $K/2$ peuvent être négligées donnant ainsi une dynamique effective où $K/2$ spins sont exactement retournés. Les taux de transition restent ceux de Métropolis. Etant donnée une aimantation M , la probabilité pour un spin d'être positif (+), respectivement négatif (-) est donnée par :

$$p_M^\pm = \frac{1}{2} \pm \frac{M}{2N} \quad (\text{A.2})$$

avec $1 - p_M^- = p_M^+$. La probabilité de retourner $L \leq K/2$ spins (+), respectivement (-), vaut :

$$P_K^\pm(L) = \binom{K/2}{L} (p_M^\pm)^L (1 - p_M^\pm)^{\frac{K}{2}-L} \quad (\text{A.3})$$

En exprimant la différence d'aimantation par rapport au nombre de retournements, il est possible d'obtenir la distribution des aimantations en champ nul après un saut sachant qu'on se trouvait à une aimantation M . Dans la limite de K grand mais petit devant N , en utilisant l'approximation gaussienne de la loi de Bernoulli, cette distribution vaut :

$$\rho_K(M'|M) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_M}} e^{-\frac{(M' - (1 - \frac{K}{N})M)^2}{2\alpha_M}} \quad (\text{A.4})$$

$$\alpha_M = 8Kp_M^+p_M^- \quad (\text{A.5})$$

En prenant en compte les taux d'acceptation à température nulle, la distribution de l'aimantation $P(M'|E, M)$ après une transition est donnée par :

$$P(M'|E, M) = \frac{\rho_K(M'|M)}{\Gamma(E, M, h)} \int dE' \rho(E') \Theta(E - hM - (E' - hM')) \quad (\text{A.6})$$

$\Theta(\cdot)$ est la fonction d'Heaviside, et $\Gamma(E, M, h)$ est le facteur de normalisation correspondant au taux de sortie de l'état $\{E, M\}$:

$$\Gamma(E, M, h) = \int dM' \rho_K(M'|M) \int dE' \rho(E') \Theta(E - hM - (E' - hM')) \quad (\text{A.7})$$

Ainsi, la distribution $P(M'|E, M)$ s'écrit :

$$P(M'|E, M) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_M}} \exp\left(-\frac{(M' - (1 - \frac{K}{N})M - \alpha_M\beta_g h)^2}{2\alpha_M}\right) \quad (\text{A.8})$$

Remarquons alors que cette distribution est indépendante de l'énergie E . D'autre part, cette relation s'obtient, au facteur de normalisation près, simplement par multiplication de $\rho_K(M'|M)$ par le facteur $\exp(\beta_g h(M' - M))$.

Il est désormais possible d'exprimer successivement les relations entre aimantations successives :

$$M' = M(1 - \frac{K}{N}) + \alpha_M\beta_g h + \sqrt{\alpha_M} \zeta \quad (\text{A.9})$$

où ζ est une variable aléatoire gaussienne centrée réduite. Nous pouvons alors procéder par récurrence pour obtenir l'aimantation et la corrélation ($h = 0$) après R sauts. En notant M_w l'aimantation au temps t_w , temps à partir duquel le champ h est appliqué, et M_i l'aimantation après i sauts, nous obtenons la relation suivante après R sauts :

$$M_R = a^R M_0 + \left(\sum_{i=1}^R a^{R-i} \sqrt{\alpha_{M_i}} \zeta_i \right) + \left(\sum_{i=1}^R a^{R-i} \alpha_{M_i} \right) \beta_g h \quad (\text{A.10})$$

avec $a = 1 - K/N$. Les α_{M_i} sont indépendants des ζ_i et les ζ_i sont indépendantes les unes des autres. En multipliant par M_w cette relation, en choisissant $h = 0$ et en moyennant sur les réalisations du bruit, nous obtenons :

$$\langle M_R M_w \rangle_0 = a^R \langle M_w^2 \rangle_0 \quad (\text{A.11})$$

Puis en prenant simplement la moyenne de (A.10), nous obtenons :

$$\langle M_R \rangle_h = a^R \langle M_w \rangle_0 + 2\beta_g h K \left(\sum_{i=1}^{R-1} a^i \right) \quad (\text{A.12})$$

L'indice 0 indique que la moyenne est prise en champ nul. Comme $\left(\sum_{i=1}^{R-1} a^i \right) = \frac{1-a^R}{1-a}$ et $a = 1 - K/N$, (A.12) s'écrit :

$$\langle M_R \rangle_h = a^R \langle M_w \rangle_0 + 2\beta_g N h (1 - a^R) \quad (\text{A.13})$$

Puisque nous considérons le cas d'une aimantation de valeur moyenne nulle, $\langle M_w \rangle_0 = 0$. Dans ce cas, et *seulement* dans ce cas, en combinant (A.11) et (A.13) et en utilisant $\langle M_w^2 \rangle_0 = N$, il vient :

$$\langle M_R \rangle_h = 2\beta_g h (\langle M_w^2 \rangle - \langle M_R M_w \rangle) \quad (\text{A.14})$$

Cette relation n'est pas à proprement parler la FDR puisque la variable paramétrique reliant la corrélation et la réponse est le nombre R de sauts. Pour obtenir une relation impliquant les temps t_w et $t_w + t$, il faut moyennner cette relation sur la distribution des intervalles de temps t étant donné un nombre de sauts R . Considérons cette distribution en présence d'un petit champ h . Aux ordres dominants en h , cette distribution est la somme de la distribution en champ nul plus des termes proportionnels à Kh . En effet, le taux de sortie (A.7) d'un état d'énergie E et d'aimantation M en présence d'un champ h est donné par :

$$\Gamma(E, M, h) = e^{\beta_g (E - hMK/N) + \alpha_M \beta_g^2 h^2 / 2} \quad (\text{A.15})$$

et comme $M \sim Nh$, un développement au premier ordre de ces taux donne des termes proportionnels à Kh . Incidemment, les limites doivent être prises dans l'ordre suivant : $N \rightarrow \infty$, $h \rightarrow 0$, $K \rightarrow \infty$. Ainsi, la moyenne de (A.14) avec cette distribution sous champ, combinée aux limites indiquées, donne :

$$\frac{\partial \langle M(t_w + t) \rangle}{\partial h} \Big|_{h=0} = \frac{2}{T_g} (\langle M(t_w + t)^2 \rangle_0 - \langle M(t_w + t) M(t_w) \rangle_0)$$

En faisant les identifications suivantes :

$$\begin{aligned} \chi(t_w, t_w + t) &= \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M(t_w + t) \rangle}{\partial h} \Big|_{h=0} \\ C(t_w, t_w + t) &= \frac{1}{N} \langle M(t_w + t) M(t_w) \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

nous obtenons la relation désirée en prenant $C(t_w, t_w) = 1$:

$$\chi(t_w, t_w + t) = \frac{2}{T_g} [1 - C(t_w, t_w + t)] \quad (\text{A.17})$$

Notons que l'ordre des limites ne restreint pas trop le domaine de validité de cette relation. En effet, la même relation peut être démontrée (voir annexe C) dans le cas $K = 1$ et donc sûrement s'étendre à K fini par continuité avec $K \rightarrow \infty$. D'autre part, la même relation peut être obtenue pour une catégorie d'observables douces se décorréant d'un facteur $(1 - K/N)$ avec K fini (voir ci-dessous).

Insistons sur le fait que cette relation est seulement valide dans le cas où l'aimantation a une moyenne nulle à chaque temps. Cette prescription est très similaire aux prescriptions étudiées dans le BTM pour obtenir une unique FDR asymptotique ($t_w \rightarrow \infty$) [88].

A.2.2 Température finie

La FDR linéaire obtenue à température nulle a l'intéressante propriété d'être valide à toute température en-dessous de la température de transition entropique-activée $T_g/2$.

Pour commencer la preuve de ce comportement, remarquons que (A.4) est valide quelque soit la température du système. Au contraire, la distribution d'aimantation obtenue après un saut dépend de la température :

$$P_T(M'|E, M) = \frac{1}{\Gamma_T^h(E, M)} \rho_K(M'|M) \times \left(\int_{-\infty}^{E-h(M-M')} dE' e^{\beta_g E'} + \int_{E-h(M-M')}^0 dE' e^{-\beta(E'-hM'-(E-hM))} e^{\beta_g E'} \right) \quad (\text{A.18})$$

Désormais sont présents les termes activés, i.e. ceux de la forme $e^{-\beta \bullet}$. $\Gamma_T^h(E, M)$ est le taux de sortie à température T en présence du champ h , défini par la normalisation de $P_T(M'|E, M)$. En effectuant le changement de variables $x = E' - h(M' - M)$ dans les intégrales, nous obtenons :

$$P_T(M'|E, M) = \frac{\rho_K(M'|M)}{\Gamma_T^h(E, M)} e^{\beta_g h(M'-M)} \left(\int_{-\infty}^E dx e^{\beta_g x} + \int_E^{-h(M'-M)} dx e^{-\beta(x-E)+\beta_g x} \right) \quad (\text{A.19})$$

Par conséquent, la dépendance en $h(M' - M)$ est essentiellement factorisée sauf pour la borne supérieure de la deuxième intégrale. Lorsque $T > T_g/2$, cette borne est visitée souvent car le système procède à un retour systématique vers les hautes énergies proches de $E = 0$ et $h|M' - M| \sim Kh \ll 1$. A l'opposé, lorsque $T < T_g/2$, cette borne cesse d'être visitée et peut donc être remplacée par sa valeur typique, soit 0 dans la limite $h \rightarrow 0$. Ainsi, pour cette approximation, la distribution $P_T(M'|E, M)$ est une nouvelle fois obtenue en multipliant $\rho_K(M'|M)$ par le facteur $\exp(\beta_g h(M' - M))$, exactement comme dans le cas de température nulle :

$$P_T(M'|E, M) = P(M'|E, M) \quad (\text{A.20})$$

Puisque $P_T(M'|E, M)$ ne dépend pas non plus de E , l'obtention de la FDR est identique au cas de température nulle. Ceci montre qu'une température effective égale à $T_g/2$ est attendue dans tout le régime entropique $T < T_g/2$.

A.2.3 Généralisation aux observables douces

Plus généralement, nous pouvons considérer des observables $\mathcal{A}$ qui se décorrèlent par un facteur $(1 - K/N)$ à chaque transition. Dans ce cas, la valeur A de l'observable après un saut est donnée en fonction de la valeur A' avant le saut, suivant :

$$\langle A'A \rangle = \langle A^2 \rangle (1 - \frac{K}{N}) \quad (\text{A.21})$$

Un choix naturel et assez général d'évolution stochastique de l'observable $\mathcal{A}$ est le suivant :

$$A' = A(1 - \frac{K}{N}) + \zeta_A \quad (\text{A.22})$$

ζ_A est un bruit blanc gaussien dont l'amplitude est imposée à la fois par conservation de la variance de A , à savoir $\langle A'^2 \rangle = \langle A^2 \rangle$, et par la corrélation donnée par (A.21). Ainsi, à l'ordre dominant en K/N , la variance de ζ_A ne dépend pas de la valeur A . Elle est donnée par¹ :

$$\langle \zeta_A^2 \rangle = \frac{2K}{N} \langle A^2 \rangle \quad (\text{A.23})$$

Ainsi, Eq. (A.22) peut s'écrire comme Eq. (A.4) avec $\alpha_M = 2K\langle A^2 \rangle/N$. Dans ce cas, les relations (A.11) et (A.13) deviennent :

$$\begin{aligned} \langle A_R A_w \rangle_0 &= a^R \langle A_w^2 \rangle_0 \\ \langle A_R \rangle_h &= a^R \langle A_w \rangle_0 + 2\beta_g \langle A^2 \rangle h(1 - a^R) \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

La fin du calcul est alors rigoureusement la même que pour l'aimantation, et ceci pour toute température $T < T_g/2$.

Pour conclure, cette analyse montre qu'une observable douce générique satisfait une FDR linéaire avec une température effective $T_g/2$ lorsque $T < T_g/2$. En outre, il semble que le choix de la loi stochastique (A.22) n'est pas un ingrédient indispensable à l'émergence d'une température effective. En effet, l'annexe C montre que pour une dynamique d'un seul retournement de spins associée à une évolution énergétique du type BMM, l'aimantation suit aussi cette FDR. Dans ce cas, l'approximation gaussienne (A.4) ne tient plus.

¹Nous avons implicitement choisi le cas d'observables qui ne sont pas corrélées avec l'énergie puisque ζ_A ne dépend pas de l'énergie.

Annexe B

Dynamique locale

Dans cette annexe, nous étudions quelques propriétés dynamiques d'un système ayant une densité exponentielle en énergie et soumis à une dynamique locale que nous spécifions plus bas. Entre autres, nous établissons, dans la limite où la fenêtre d'énergie est petite, une équation d'évolution de la probabilité $P(E, t)$ de trouver le système à une énergie entre E et $E + dE$ au temps t . Le résultat intéressant est que la dynamique d'évolution de l'énergie est formellement identique à une équation de diffusion d'une particule dans un potentiel linéaire. Nous adaptons alors notre résultat pour comprendre de façon qualitative la relaxation du REM à connectivité locale qui peut aussi se voir d'une certaine façon comme un processus de diffusion.

B.1 Densité exponentielle en énergie

Considérons donc une distribution en énergie $\rho(E) = \beta_g e^{\beta_g E}$ et choisissons la partie symétrique de $f(E', E)$ (voir texte principale du chapitre concerné) donnée par :

$$\mathcal{S}(E, E') = \frac{1}{Z} e^{-\beta_d |E' - E|} F_E^\Delta(E') \quad (\text{B.1})$$

où β_d est positif et $F_E^\Delta(E')$ vaut 1 sur $[E - \Delta, E + \Delta]$ et 0 sinon. Z est un facteur de normalisation et vaut :

$$Z = (\beta_g/2 - \beta_d)^{-1} \left(e^{(\beta_g/2 - \beta_d)\Delta} - 1 \right) + (\beta_g/2 + \beta_d)^{-1} \left(1 - e^{-(\beta_g/2 + \beta_d)\Delta} \right) \quad (\text{B.2})$$

En outre, lorsqu'une énergie positive est tirée, le système reste à son énergie. L'équation maîtresse de ce processus (équation (6.20) du chapitre concerné) donne à température $T > T_g$ une solution stationnaire correspondant à l'équilibre de Boltzmann :

$$P_{eq}(E) \sim e^{(\beta_g - \beta)E} \quad (\text{B.3})$$

C'est une conséquence du bilan détaillé vérifié par les taux de transition $W(E \rightarrow E')$. Nous avons vérifié numériquement par méthode Monte Carlo la réalisation de cette distribution.

Nous allons maintenant voir que le système ralentit fortement lorsque la température s'approche de T_g , le mécanisme sous-jacent étant identique à la transition entre le régime activé et le régime entropique du BMM.

Pour résoudre la dynamique du système à haute température, il est intéressant de voir que dans la limite $\Delta/T_g \ll 1$, le problème se simplifie très fortement. Nous allons donc

considérer en premier lieu cette limite et généraliser le comportement obtenu pour des températures proches de T_g au cas Δ quelconque.

En développant l'équation maîtresse (6.10) aux premiers ordres non nuls en Δ , nous trouvons l'équation d'évolution suivante :

$$\frac{\partial P(E, t)}{\partial t} = \frac{2\Delta^2}{3} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial^2 E} + (\beta - \beta_g) \frac{\partial P}{\partial E} \right) \quad (\text{B.4})$$

dont la solution à l'équilibre est bien donnée par (B.3). Si nous notons $D = \frac{2\Delta^2}{3}$, D est un coefficient de diffusion dans l'espace unidimensionnel des énergies. Plus intrigant, si nous voyons E comme la position euclidienne dans un espace à une dimension, cette équation d'évolution est exactement l'équation de diffusion dans un demi-espace $([-\infty, 0])$ d'une particule soumise à un potentiel linéaire de la forme $V(E) = E$, ayant un coefficient de diffusion D et à une température $\frac{1}{\beta - \beta_g}$. La condition de normalisation de $P(E, t)$ conduit en intégrant (B.4) sur E entre $-\infty$ et 0 à une condition de bord réflexive (courant nul à $E = 0$) :

$$\left(\frac{\partial P(E, t)}{\partial E} + (\beta - \beta_g) P(E, t) \right) \Big|_{E=0} = 0 \quad (\text{B.5})$$

où nous avons implicitement supposé :

$$\lim_{E \rightarrow -\infty} P(E, t) = 0 \quad ; \quad \lim_{E \rightarrow -\infty} \frac{\partial P(E, t)}{\partial E} = 0,$$

ce qui est vrai seulement à haute température. Cette équation de diffusion avec ces conditions de bord a été résolue par Smoluchowski. En prenant comme condition initiale $E(t = 0) = E_i$, la solution s'écrit :

$$\begin{aligned} P(E, t) = & \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(E - E_i + D(\beta - \beta_g)t)^2}{4Dt}} \\ & + \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{D(\beta - \beta_g)E_i - \frac{(E + E_i + D(\beta - \beta_g)t)^2}{4Dt}} \\ & + \frac{\beta_g - \beta}{2} e^{(\beta_g - \beta)E} \operatorname{erfc} \left(\frac{-E - E_i + D(\beta - \beta_g)t}{\sqrt{4Dt}} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

où $\operatorname{erfc}(\bullet)$ est la fonction complémentaire erreur : $\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty dx e^{-x^2}$. Pour évaluer le temps de relaxation du système, il est d'usage de regarder la relaxation de la variance des grandeurs thermodynamiques du système. Ainsi, nous allons regarder comment se comporte $\langle E^2 \rangle_t - \langle E^2 \rangle_{eq}$ en fonction du temps et de la température. A cette fin, nous écrivons à partir de (B.4) l'équation d'évolution de $\langle E^2 \rangle_t$ et de $\langle E \rangle_t$:

$$\frac{\partial \langle E^2 \rangle}{\partial t} = 2D (1 - (\beta - \beta_g) \langle E \rangle) \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial t} = -2D (P(0, t) + \beta - \beta_g) \quad (\text{B.8})$$

La première de ces équations donne la moyenne souhaitée à l'équilibre, à savoir $(\beta - \beta_g)^{-1}$. L'équation du moment d'ordre trois aurait donné aussi la valeur souhaitée de $\langle E^2 \rangle_{eq} = \frac{1}{2}(\beta - \beta_g)^{-2}$. En choisissant $E_i = 0$ comme condition initiale dans la relation (B.6) (ce choix ne change rien quant aux propriétés de relaxation du système), nous avons l'expression de $P(0, t)$. Comme nous sommes intéressés au comportement lorsque les temps sont grands,

nous pouvons développer $P(0, t) + \beta - \beta_g$ au voisinage de $t = \infty$. Les premiers termes non nuls donnent :

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial t} = \frac{4}{\sqrt{D\pi}(\beta_g - \beta)^2} \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{D(\beta_g - \beta)^2 t}{4}} \quad (\text{B.9})$$

ce qui donne comme solution à l'ordre dominant :

$$\langle E \rangle_t = (\beta - \beta_g)^{-1} - \frac{16}{D\sqrt{D\pi}(\beta_g - \beta)^4} \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{D(\beta_g - \beta)^2 t}{4}} \quad (\text{B.10})$$

En reportant cette solution dans (B.7) et en ne gardant une nouvelle fois que les termes dominants aux grands temps, nous obtenons :

$$\langle E^2 \rangle_t - \langle E^2 \rangle_{eq} = \frac{128}{D\sqrt{D\pi}(\beta_g - \beta)^5} \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{D(\beta_g - \beta)^2 t}{4}} \quad (\text{B.11})$$

Ainsi, le temps de relaxation τ_{relax} diverge comme une loi de puissance :

$$\tau_{relax} \sim \frac{1}{(\beta_g - \beta)^2} \quad (\text{B.12})$$

Ceci n'est donc pas sans rappeler la divergence du temps de relaxation dans les modèles champ moyen de verres de spins et dans la théorie de couplage de modes pour les liquides. Cependant, le mode de relaxation est différent ici. En effet, dans les verres de spins, la relaxation est de plus en plus lente car le système voit un paysage d'énergie de moins en moins connecté alors qu'ici, la divergence de la relaxation vient de la compétition entre un processus entropique et un processus activé qui tend à devenir nulle proche de T_g . Quantitativement, nous pouvons calculer, comme nous l'avons déjà fait, l'énergie moyenne gagnée lors d'un saut pour $E < -\Delta$. Ce gain est donné à $T = T_g$ par :

$$\begin{aligned} \langle E' \rangle_E - E &= \frac{\int_{E-\Delta}^E dE' E' e^{\beta_g(E'-E)/2} + \int_E^{E+\Delta} dE' E' e^{-\beta_g(E'-E)/2}}{\int_{E-\Delta}^E dE' e^{\beta_g(E'-E)/2} + \int_E^{E+\Delta} dE' e^{-\beta_g(E'-E)/2}} - E \\ &= 0 \end{aligned}$$

Comme le gain est une fonction croissante de la température, nous sommes bien en présence d'une transition entre un régime essentiellement activé avec un gain positif au-dessus de T_g et un régime entropique avec un gain négatif en-dessous. Le mécanisme est donc identique à celui de la transition du BMM. Cependant, ici cette transition se situe à la température de transition thermodynamique alors que pour le BMM elle se produit à $\frac{T_g}{2}$ où T_g est la transition thermodynamique.

Pour justifier que cette divergence des temps en loi de puissance est effectivement le comportement attendu pour Δ finie, il suffit de remarquer que le mécanisme de divergence est indépendant de la fenêtre $\mathcal{F}_E$ considérée, la seule contrainte étant que cette fenêtre soit de taille finie. En effet, l'annulation du gain à $T = T_g$ ne dépend pas de la taille de la fenêtre. Il serait alors très surprenant de trouver un comportement qualitativement différent lorsque Δ est finie.

B.2 Densité gaussienne en énergie

Dans ce paragraphe, nous utilisons, abusivement peut-être, l'étude précédente pour donner une idée plus précise de la relaxation du modèle de densité gaussienne en énergie avec dynamique locale, défini dans le chapitre correspondant par (6.20) et (6.21).

Il est en effet amusant de remarquer qu'un développement de l'équation maîtresse (avec la dynamique Métropolis) en puissance de K donne une équation d'évolution pour les premiers termes non nuls se mettant sous la forme :

$$\frac{\partial P(E, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 P}{\partial^2 E} + \left(\beta + \frac{2E}{NJ^2} \right) \frac{\partial P}{\partial E} \right) \quad (\text{B.13})$$

avec $D = 2K^2/3$. Ainsi, le pendant de l'équation de diffusion (B.4), si analogie nous pouvons faire, est ici une équation de diffusion dans un potentiel en triangle $V(E) = |E - \langle E \rangle_T|$ mais avec une température dépendant de E et valant $|\beta + 2E/JN^2|^{-1}$. Ainsi, plus l'énergie est loin de $\langle E \rangle_T$, plus la température est faible et donc plus la 'force' est forte pour ramener le système à $\langle E \rangle_T$. A $\langle E \rangle_T$, le processus devient un processus de 'diffusion pure'. Evidemment, toute la terminologie ici est abusive car nous parlons de forces qui agissent dans l'espace des énergies et pas l'espace réel.

Annexe C

Température effective pour des dynamiques entropiques

Cette annexe est consacrée à l'obtention de la formule (6.32) concernant la température effective de processus entropiques :

$$\begin{aligned}\beta_{eff} &= \frac{2}{G(E, u)} \frac{\partial G(E, u)}{\partial u} \Big|_{u=0} \\ G(E, u) &= \int_{-\infty}^{E+u} dE' W(E, E') + e^{\beta u} \int_{E+u}^{\infty} dE' W(E, E')\end{aligned}\tag{C.1}$$

dans les conditions mentionnées dans le chapitre correspondant, à savoir :

1. Le regime est entropique, i.e. à chaque saut d'état le système diminue en moyenne d'une énergie finie Δ (qui peut a priori dépendre de l'énergie à laquelle le système se trouve),
2. A partir d'une énergie E , le système est capable d'atteindre des énergies E' telles que $|E' - E| \gg \Delta$,
3. Les observables impliquées sont des observables douces indépendantes de l'énergie de moyenne nulle.
4. La dynamique est de type Métropolis :

$$W(E \rightarrow E') = \begin{cases} e^{-\beta(E'_h - E_h)} f(E_0, E'_0) & \text{si } E'_h > E_h \\ f(E_0, E'_0) & \text{si } E_h > E'_h \end{cases}$$

Les indices h signalent que l'énergie considérée est l'énergie totale en présence de champ. L'indice 0 signale que l'énergie à considérer doit seulement être l'énergie sans champ. Ce choix de dynamique permet de prendre en compte différents modèles d'espace des phases à travers la donnée de la fonction de répartition des énergies des états connectés $f(E, E')$ (voir chapitre sur la dynamique locale).

La deuxième de ces conditions nous permet de dire que la fenêtre d'énergie accessible à partir d'une énergie E peut être prise comme infinie puisque les poids des états d'énergie loin de E ne contribuent pas. En effet, dans le cas contraire, à température nulle le système pourrait atteindre des énergies arbitrairement grandes, ce que nous avons interdit puisque Δ est finie.

Premièrement, nous étudions la situation pour laquelle l'observable considérée est l'aimantation et la dynamique est celle d'un seul retournement de spin. Nous généralisons le résultat aux observables gaussiennes dont la loi d'évolution est donnée par (A.22) de l'annexe A. Nous terminons enfin par appliquer cette formule (C.1) à plusieurs systèmes.

C.1 Cas fictif d'un retournement de spin pour l'aimantation

Considérons l'aimantation comme observable décorrélée de l'énergie et supposons qu'à un temps donné le système ait une aimantation M_0 et ceci sans champ extérieur. La probabilité $p(\uparrow \rightarrow \downarrow)$, respectivement $p(\downarrow \rightarrow \uparrow)$, d'avoir choisi un spin dirigé vers le haut pour le retourner, respectivement un spin dirigé vers le bas, est simplement donné par (A.2) :

$$p^- = p(\uparrow \rightarrow \downarrow) = \frac{1}{2} + \frac{M}{2N} \quad (C.2)$$

$$p^+ = p(\downarrow \rightarrow \uparrow) = \frac{1}{2} - \frac{M}{2N} \quad (C.3)$$

Donc après un saut, la nouvelle aimantation est donnée par :

$$M_1 = M_0 + X_{M_0} \quad (C.4)$$

où X_{M_0} est une variable de Bernoulli pouvant prendre les valeurs 2 et -2 avec les probabilités respectives (C.2) et (C.3). En multipliant cette dernière équation par M_0 et en prenant la moyenne sur le bruit, nous obtenons la relation $\langle M_1 M_0 \rangle = \langle M_0^2 \rangle + \langle M_0(1 - \frac{M_0}{N}) - M_0(1 + \frac{M_0}{N}) \rangle$, soit :

$$\langle M_1 M_0 \rangle = \langle M_0^2 \rangle (1 - \frac{2}{N}) \quad (C.5)$$

La généralisation de cette relation pour l'aimantation après R sauts est alors immédiate et nous avons :

$$\langle M_R M_0 \rangle = \langle M_0^2 \rangle \left(1 - \frac{2}{N}\right)^R \quad (C.6)$$

Remarquons que cette équation ne fait pas intervenir le temps, seulement le nombre de sauts que le système a effectué. Cette relation est donc vraie pour toute température et pour tout temps.

Lorsqu'un champ magnétique extérieur est appliqué, au fur et à mesure du temps la probabilité de choisir des spins vers le haut ou vers le bas devient de plus en plus biaisée étant donné que le système acquiert une aimantation. Imaginons donc qu'à un temps donné le système ait une aimantation M et une énergie E et que nous avons appliqué un petit champ magnétique h depuis le début. La probabilité d'avoir une aimantation $M + 2$, i.e. d'avoir retourné un spin dirigé vers le bas, est alors donnée par :

$$P^h(M + 2) = \frac{p^+ \int_{-\infty}^{E+2h} dE' f(E, E') + \int_{E+2h}^{\infty} dE' f(E, E') e^{-\beta(E' - E - 2h)}}{P_{esc}^h(E, M)} \quad (C.7)$$

avec $P_{esc}^h(E, M)$ la probabilité de s'échapper d'un état d'énergie E et d'aimantation M . En notant $G(E, \beta, x) = \int_{-\infty}^{E+x} dE' f(E, E') + \int_{E+x}^{\infty} dE' f(E, E') e^{-\beta(E' - E - x)}$ nous obtenons

$P_{esc}^h(E, M) = p^+ G(E, \beta, 2h) + p^- G(E, \beta, -2h)$ et par conséquent :

$$P^h(M+2) = \frac{p^+ G(E, \beta, 2h)}{p^+ G(E, \beta, 2h) + p^- G(E, \beta, -2h)} \quad (C.8)$$

$$P^h(M-2) = \frac{p^- G(E, \beta, 2h)}{p^+ G(E, \beta, 2h) + p^- G(E, \beta, -2h)} \quad (C.9)$$

En développant $G(E, \beta, 2h)$ en petit h et en utilisant $p^+ + p^- = 1$, il est facile de montrer qu'au premier ordre en h , ces deux équations deviennent :

$$P^h(M+2) = p^+ \left(1 + 4h \frac{\partial G(E, \beta, u)/\partial u}{G(E, \beta, u)} \Big|_{u=0} p^- \right) \quad (C.10)$$

$$P^h(M-2) = p^- \left(1 - 4h \frac{\partial G(E, \beta, u)/\partial u}{G(E, \beta, u)} \Big|_{u=0} p^+ \right) \quad (C.11)$$

En utilisant la même procédure de récurrence pour obtenir la relation (C.6), il est alors possible de montrer que si après R sauts, $\frac{\partial G(E, \beta, u)/\partial u}{G(E, \beta, u)} \Big|_{u=0}$ est resté constant, la relation suivante est vérifiée :

$$\langle M_R \rangle_h = \langle M_0 \rangle \left(1 - \frac{2}{N} \right)^R + 4 \frac{\partial G(\beta, u)/\partial u}{G(\beta, u)} \Big|_{u=0} h \left(\left(1 - \frac{2}{N} \right)^R + \left(1 - \frac{2}{N} \right)^{R-1} + \dots + \left(1 - \frac{2}{N} \right) \right) \quad (C.12)$$

où l'indice h indique que l'aimantation est obtenue en présence du champ. Nous avons utilisé le fait que dans la limite $N \rightarrow \infty$, $\langle M^2 \rangle = N$. La somme du membre de droite de cette équation est la somme d'une suite géométrique. Il est alors facile de trouver en notant $\beta^* = 2 \frac{\partial G(\beta, u)/\partial u}{G(\beta, u)} \Big|_{u=0}$:

$$\langle M_R \rangle_h = \langle M_0 \rangle \left(1 - \frac{2}{N} \right)^R + \beta^* h (N-2) \left(1 - \left(1 - \frac{2}{N} \right)^R \right) \quad (C.13)$$

En utilisant alors $\langle M_0^2 \rangle = N$ et la relation (C.6) on obtient $\langle M_R \rangle_h = \langle M_0 \rangle \left(1 - \frac{2}{N} \right)^R + \beta^* h \frac{N-2}{N} (\langle M_0^2 \rangle - \langle M_R M_0 \rangle)$, soit dans la limite thermodynamique :

$$\langle M_R \rangle_h = \langle M_0 \rangle \left(1 - \frac{2}{N} \right)^R + \beta^* h (\langle M_0^2 \rangle - \langle M_R M_0 \rangle) \quad (C.14)$$

Si nous imposons maintenant que l'aimantation a une valeur moyenne nulle, alors cette relation devient une relation de fluctuation dissipation avec comme variable paramétrique les sauts au lieu des temps :

$$\langle M_R \rangle_h = \beta^* h (\langle M_0^2 \rangle - \langle M_R M_0 \rangle) \quad (C.15)$$

La fin de la démonstration est alors identique à l'annexe A, et nous obtenons une FDR linéaire avec une température effective égale à β^{*-1} , confirmant la relation annoncée (C.1).

C.2 Généralisation aux observables gaussiennes

La généralisation du résultat précédent pour des observables génériques se décorréant d'un facteur $(1 - K/N)$ avec K fini ne semble pas trivial. De la même façon, nous allons

concentrer nos efforts sur des observables du type (A.22). La généralisation à toute observable douce n'est qu'une conjecture, fortement renforcée par l'étude du cas précédent. Ainsi, à chaque essai de transition, la nouvelle valeur A' de l'observable est donnée en fonction de l'ancienne valeur A par :

$$\rho_K(A'|A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(A' - (1 - K/N)A)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (\text{C.16})$$

où $\sigma^2 = 2K\langle A^2 \rangle/N$. Toutes choses étant égales par ailleurs, nous retrouvons l'équation (A.18) :

$$P_T(A'|E, A) = \frac{1}{\Gamma_T^h(E, A)} \rho_K(A'|A) \times \left(\int_{-\infty}^{E-h(A-A')} dE' f(E, E') \right. \\ \left. + \int_{E-h(A-A')}^0 dE' e^{-\beta(E' - hA' - (E-hA))} f(E, E') \right) \quad (\text{C.17})$$

où $\Gamma_T^h(E, A)$ est le facteur de normalisation associé. La seule différence avec (A.18) est que $f(E, E')$ généralise la densité du BMM (ou du BTM indifféremment). En explicitant $\Gamma_T^h(E, A)$ comme étant l'intégrale sur les énergies et sur les valeurs A' de l'observable du produit de $\rho_K(A'|A)$ et du facteur entre parenthèses, un développement en $h = 0$ permet d'obtenir :

$$P_T(A'|E, A) = \frac{1}{\Gamma_A} \rho_K(A'|A) (1 + \beta^* h(A' - A))$$

où Γ_A est le facteur de normalisation associée. β^* est exactement donné par (C.1). Pour finir, un développement en petit h de (A.19) donne la même relation avec $2\beta_g$ à la place de β^* . Comme ces deux expressions sont identiques est que la deuxième donne une température effective égale $1/2\beta_g$, nous retrouvons le résultat annoncé, à savoir (C.1).

C.3 Applications

C.3.1 Exemple du BMM

L'intérêt d'une telle formule, comme l'intérêt de toute formule, est qu'on peut l'appliquer à n'importe quel système vérifiant les prescriptions mentionnées plus haut. Ainsi, et c'est évidemment le premier test à effectuer, du BMM lorsque $T < T_g/2$. Dans ce cas, il suffit de remplacer $f(E, E')$ par $\beta_g e^{\beta_g E'}$ et nous trouvons :

$$G_{\text{BMM}}(E, u) = \frac{\beta}{\beta - \beta_g} e^{\beta_g(E+u)} \quad (\text{C.18})$$

Nous retrouvons bien $T_{\text{eff}} = T_g/2$.

C.3.2 REM à connectivité locale

Nous avons mentionné dans la fin du chapitre sur la dynamique locale que nous pouvions adapter la température effective lorsqu'une borne inférieure limitait l'accès aux basses énergies. C'est ce que nous allons faire dans ce petit paragraphe.

Etudions donc le REM à connectivité locale lorsque $T \ll T_c$ pour voir jusqu'où la température effective descend lors de la thermalisation du système. Lorsque l'énergie s'approche de l'état fondamental, i.e. $E < E_c + K$, E_c devient la borne inférieure des énergies accessibles. La définition de la température effective (C.1) pour un processus entropique ayant une borne inférieure E_c en énergie est donnée par :

$$G(E, u) = \int_{E_c}^{E+u} dE' f(E, E') + e^{\beta u} \int_{E+u}^{\infty} dE' f(E, E') e^{-\beta(E'-E)} \quad (\text{C.19})$$

Pour obtenir ce résultat, il suffit de remarquer que seule la borne inférieure des énergies a changé. L'ensemble des calculs est rigoureusement identique au cas d'une borne infinie.

Au premier ordre en $E - E_c$, nous pouvons calculer :

$$\beta_{\text{eff}}(E) = \frac{4\beta}{(2\beta - \beta_E + \beta_d)(E - E_c) + 1} \quad (\text{C.20})$$

Cette température effective dépend de E , il n'est donc pas raisonnable de dire que nous avons une relation linéaire pour la FDR. Cependant, il est une nouvelle fois remarquable de constater que cette valeur est égale à β lorsque $E - E_0 = 2/(2\beta - \beta_E + \beta_d)$ correspondant exactement à l'énergie à partir de laquelle le régime devient activé (il suffit pour cela de calculer l'énergie moyenne gagnée à chaque saut). Le vieillissement, s'il y a, ressemble alors beaucoup à celui du BTM pour lequel $T_{\text{eff}} = T$. Sinon, nous voyons que le système commence à thermaliser.

C.3.3 Le modèle d'oscillateur harmonique (OSC)

Ce modèle [50] est construit sur un ensemble de N oscillateurs linéaires indépendants. Si x_i est la position de la particule i alors l'énergie totale d'une configuration $\{x_i\}$ est simplement donnée par $E(\{x_i\}) = \frac{K}{2} \sum_i x_i^2$ où K est la constante de Hook. La dynamique consiste à proposer à chaque temps un changement de l'ensemble des x_i suivant $x_i \rightarrow x_i + \frac{r_i}{\sqrt{N}}$ où les r_i sont des variables aléatoires indépendantes distribuées suivant une gaussienne de moyenne nulle et de variance Δ^2 . Les taux d'acceptation sont du type Métropolis (5.5). Ce modèle conduit à un régime de vieillissement dans le cas des basses températures, le mécanisme étant entropique [50, 61] puisqu'à température nulle le système doit tendre vers $x_i = 0 \forall i$ demandant des sauts de plus en plus fins pour y parvenir. La fonction de corrélation est définie par :

$$C(t_w, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i x_i(t_w) x_i(t) \right\rangle \quad (\text{C.21})$$

où $\langle \bullet \rangle$ indique une moyenne sur l'histoire des réalisations du bruit. La réponse est obtenue en ajoutant un terme d'énergie $-h \sum_i x_i$ et en calculant :

$$R(t_w, t) = \left\langle \frac{\delta M(t)}{\delta h(t_w)} \right\rangle_{h=0} \quad (\text{C.22})$$

où $M(t) = \frac{1}{N} \sum_i \langle x_i(t) \rangle$. Un résultat intéressant pour ce modèle est qu'à température nulle, dans la limite des grands temps t_w , la relation de fluctuation dissipation devient linéaire avec une température effective égale à $2E(t_w)$.

Regardons alors dans quelle limite il est possible de comprendre cette température effective à la lumière des restrictions que nous nous sommes imposées pour établir la formule de

la température effective (C.1). Premièrement, à température nulle, le OSC est bien entropique. Deuxièmement, à partir d'une énergie E non nulle, toutes les énergies sont accessibles suivant la distribution [50] :

$$f(E, E') = \frac{1}{\sqrt{4\pi KE\Delta^2}} e^{-\frac{(E' - E - \frac{K\Delta^2}{2})^2}{4KE\Delta^2}} \quad (\text{C.23})$$

Il est facile de vérifier qu'à chaque pas de temps, la décorrélation tend vers 1 dans la limite thermodynamique prise avant la limite des temps infinis. Enfin, là où le bât blesse est que l'observable $M(t)$ est fortement dépendante de l'énergie considérée puisque $M(t)$ dépend de la position des x_i ainsi que l'énergie. Cependant, si nous appliquons les yeux fermés la formule (C.1), nous trouvons à température nulle :

$$G(E, u) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{u - K\Delta^2/2}{\sqrt{4KE\Delta^2}}\right) \quad (\text{C.24})$$

Comme à grand temps, l'énergie tend vers zéro, on peut développer la fonction erreur complémentaire dans cette limite, nous obtenons alors :

$$G(E, u) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{4KE\Delta^2}}{u - K\Delta^2/2} e^{-\left(\frac{u - K\Delta^2/2}{\sqrt{4KE\Delta^2}}\right)^2} \quad (\text{C.25})$$

Aux premiers ordres en E , nous trouvons alors $\frac{G(0)}{G'(0)} = 4E$ soit une température effective dépendant de E $T_{eff} = 2E$! Remarquablement, notre approche étant loin d'être rigoureuse, ce résultat est qualitativement le même que $T_{eff} = 2E(t_w)$ et est même exact pour $t \rightarrow t_w$.

Conclusions générales

Pour conclure cette thèse, nous rappelons les résultats essentiels obtenus dans les deux parties.

Dans la première partie, nous avons mis en évidence qu'il était possible d'utiliser des champs de forces oscillantes pour modéliser la symétrie de systèmes comportant des modes mous. A partir de l'utilisation de plusieurs champs orthogonaux, il est possible de réduire la symétrie $O(3)$ d'un système en une symétrie $O(2)$ mais aussi en une symétrie Z_2 de type Ising. Il serait très intéressant de montrer que les systèmes ayant les nouvelles symétries ont effectivement des comportements typiques de la nouvelle classe d'universalité correspondante (exposants critiques,...). Pour justifier cette possibilité d'agir sur les symétries, nous avons développé plusieurs types d'approximation. Le développement hautes fréquences semblent la méthode la plus prometteuse car elle permet déjà de justifier que plusieurs champs orthogonaux avec des fréquences bien choisies agissent indépendamment les uns des autres de façon à réduire successivement les symétries d'un système. Il serait alors intéressant de développer plus profondément cette méthode.

Dans la deuxième partie, nous avons montré des réalisations microscopiques de modèle visant à reproduire les phénomènes de transition vitreuse. Cette démarche peut sembler a priori incohérente puisque nous réalisons des systèmes microscopiques correspondant à des modèles théoriques. Cependant, ces réalisations ont permis de comprendre l'essence de ces modèles mais aussi de mettre en évidence des comportements jusque là non observés. Concernant l'essence de ces modèles, nous avons montré autant que possible que le modèle de Bouchaud correspondait à 'une situation du pire' : la dynamique de type pièges résulte de la nécessité de réorganiser tout un système pour avoir des chances de diminuer son énergie. Ce comportement induit de façon remarquable un théorème de fluctuation dissipation (identique à celui de l'équilibre) pour des observables douces dans le régime de vieillissement. De façon générale, nous avons alors mis en évidence qu'une température effective pouvait émerger des modèles d'espace des phases (comme le modèle de Bouchaud ou de Barrat-Mézard) lorsque la dynamique procédait systématiquement à une descente en énergie (dynamique entropique). Dans le dernier chapitre, nous avons alors considéré une famille assez large de ces modèles d'espace des phases en donnant des dynamiques dites locales : à l'opposé du modèle de Bouchaud, ou de Barrat Mézard, les énergies ne sont pas tirées aléatoirement parmi l'ensemble du spectre lors de l'évolution mais suivant une certaine répartition. Nous avons alors montré que certaines de ces répartitions combinées avec une répartition gaussienne des énergies donnaient des comportements très similaires aux systèmes hamiltoniens du type p -spins. Nous avons aussi montré que pour tout processus entropique, il était possible de définir une température effective grâce à la description en termes d'espace des phases. Ces nouveaux résultats pour les modèles d'espace des phases sont très encourageants en vue d'une harmonisation des approches liées aux phénomènes de transition vitreuse.

Bibliographie

Systèmes oscillants

- [1] Acharyya, M., and B.K. Chakrabarti, 1995, Phys. Rev. B **52**, 6550.
- [2] Acharyya, M., and B.K. Chakrabarti, 1994, dans Annual Reviews.
- [3] Agra R., F. van Wijland, and E. Trizac, submitted to European Journal of Physics.
- [4] Ajdari, A., and J. Prost, 1992, C. R. Acad. Sci. Paris **315**, 1635. Voir aussi : Derenyi, I., C. Lee and A. L. Barabasi, 1998, Phys. Rev. Lett. **80**, 1473 et références à l'intérieur.
- [5] Chakrabarti, B. K., and M. Acharyya, 1999, Rev. Mod. Phys. **71**, 847.
- [6] Dahmen, K.A., and J. P. Sethna, 1996, Phys. Rev. B **53**, 14872.
- [7] Das, J., M. Rao and S. Ramaswamy, 2002, Euro. Phys. Lett. **60**, 418.
- [8] Dhar, D., and P. B. Thomas, 1992, J. Phys. A : Math. Gen. **25**, 4967.
- [9] Dhar, D., and P.B. Thomas, 1993, Europhys. Lett. **21** (9), 965.
- [10] Dreyfus, R., Thèse de doctorat, Un nouvel instrument pour tirer sur des molécules, Université Denis-Diderot, Paris VII, soutenance en 2005.
- [11] S. B. Dutta, 2004, Phys. Rev. E **69**, 066115 .
- [12] Engel, A., and P. Reimann, cond-mat/0405393.
- [13] Flach, S., A. E. Miroshnichenko, and A. A. Ovchinnikov, Phys. Rev. **B65** 104438.
- [14] Gammaitoni, L., P. Hänggi, P. Jung and F. Marchesoni, 1998, Rev. Mod. Physics **70**, 223.
- [15] He, Y. L., and G. C. Wang, 1993, Phys. Rev. Lett **70**, 2336.
- [16] Herisson, D., and M. Ocio, 2002, Phy. Rev. Lett. **88**, 257202
- [17] Jiang, Q., H. N. Yang and G. C. Wang, 1995, Phys. Rev. B **52**, 14911.
- [18] Kawamura, H., 1992, Phys. Rev. Lett. **68**, 3785.
- [19] Kuramoto, Y., Chemical oscillations, Waves, and Turbulence, Springer (1984).
- [20] Lo, W. S., and R.A. Pelcovits, 1990, Phys. Rev. A **42**, 7471.
- [21] Lyuksyutov, I.F., T. Nattermann, and V. Pokrovsky, 1999, Phys. Rev. B **59**, 4260. pre-print [cond-mat 9802065]
- [22] Mattis, D. C., The theory of magnetism I : Statics and Dynamics, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. **17**, Springer-Verlag, Berlin (1988)
- [23] Morozov, A. N., and J. G. E. M. Fraaije, 2002, Phys. Rev. E **65**, 031803.
- [24] Perkovid, O. , K.A. Dahmen, B. W. Roberts, and J. P. Sethna, 1999, Phys. Rev. B **59**, 6106

- [25] Physics of Liquid Crystals, Second Edition. P. G. de Gennes and J. Prost, Oxford (1993); G. Srajer, F. Lomberg and R. B. Meyer, Phys. Rev. Lett, **67** 1102 (1991).
- [26] Pokrovsky, V.L., and G.V. Uimin, 1973, Phys. Lett. **45a**, 467.
- [27] Portelli, B., P.C.W. Holdsworth, M. Sellitto, and S.T. Bramwell, 2001, Phys. Rev. E **64**, 036111.
- [28] Rao, M., H. R. Krishnamurthy and R. Pandit, 1990, Phys. Rev. B **42**, 856.
- [29] Rao, M., and R. Pandit, 1991, Phys. Rev. B **43**, 4.
- [30] H. Risken, *The Fokker-Planck equation* (Springer, 1996)
- [31] Silveira, R. d., and M. Kardar, 1999, Phys. Rev. E **59**, 1355
- [32] Suen, J. S., and J. L.Erskine, 1997, Phys. Rev. Lett., **78**, 3567.
- [33] Tabiryan, N. V., A. V. Sukhov, and B. Ya. Zel'dovich, 1985, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **136**, 1; F. Simoni, Nonlinear Optical Properties of Liquid Crystals (World Scientific, Singapore, 1997).
- [34] Thomas, P. B., and D. Dhar, 1993, J. Phys. A : Math. Gen. **26**, 3973.
- [35] Tome, T., and M. J. de Oliveira, 1990, Phys. Rev. A **41**, 4251.
- [36] Trujillo, L., Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 2003.
- [37] Villain, J., R. Bidaux, J-P Carton and R. Conte, *J. Phys.* (Paris) **41**, 1263 (1980), pour une synthèse récente, voir :
Shender, E.F., and P.C.W. Holdsworth, in *Fluctuations and order : a new synthesis* Ed. M.M. Millonas, Springer-Verlag (1996); R. Moessner, 2001, Can J Phys. **79**,1283.
- [38] voir Yanagihara, H., and M. B. Salamon, cond-mat/0206426 et références à l'intérieur.

Modèles microscopiques d'espaces des phases

- [39] B. Abou, F. Gallet, cond-mat/0403561.
- [40] L. Angelani, R. Di Leonardo, G. Ruocco, A. Scala, and F. Sciortino, Phys. Rev. Lett. **85**, 5356 (2000).
- [41] L. Angelani, G. Ruocco, M. Sampoli, and F. Sciortino, J. Chem. Phys. **119**, 2120 (2003).
- [42] F. Bardou, J. P. Bouchaud, O. Emile, A. Aspect, and C. Cohen-Tannoudji, Phys. Rev. Lett. **72** 203 (1994).
- [43] A. Barrat, M. Mezard, J. Phys. I **5**(8), 941 (1995).
- [44] J.-L. Barrat and L. Berthier, Phys. Rev. E **63**, 012503 (2001).
- [45] H. Bauke, S. Franz and S. Mertens, cond-mat/0402010.
- [46] G. Ben Arous, A. Bovier, and V. Gaynard, Phys. Rev. Lett. **88**, 087201 (2002); Commun. Math. Phys. **236**, 1 (2003).
- [47] L. Berthier, Phys. Rev. E **69**, 020201(R) (2004)
L. Berthier, A. P. Young, J. Phys. : Condens. Matter **16**, S729 (2004).
- [48] E. Bertin, J. Phys. A : Math. Gen. **36**, 10683 (2003).
- [49] E. Bertin and J-P Bouchaud, Phys. Rev. E, **67**, 065105(R) (2003).
- [50] L. L. Bonilla, F. G. Padilla and F. Ritort, Physica A **250**, 315-326 (1998).
- [51] C. Borgs, J. Chayes, B. Pittel, Random. Struct. Algor. **19**(3-4), 247 (2001).
- [52] J.-P. Bouchaud, J. Phys. I (France) **2**, 1705 (1992).

- [53] J.-P. Bouchaud and D. S. Dean, J. Phys. I France **5**, 265, (1995).
- [54] J.-P. Bouchaud, M. Mezard, J. Phys. A : Math. Gen. **30**(23), 7997 (1997).
- [55] J.-P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**(4-5), 127 (1990).
- [56] J.-P. Bouchaud, E. Vincent and J. Hammann, J. Phys. I **4**, 193 (1994).
- [57] J.-P. Bouchaud, L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, M. Mézard, cond-mat/9702070, in ‘Spin-glasses and random fields’, A. P. Young Ed. (World Scientific)
- [58] K. Broderix, K. K. Bhattacharya, A. Cavagna, A. Zippelius, and I. Giardina, Phys. Rev. Lett. **85**, 5360 (2000).
- [59] S. Büchner and A. Heuer, Phys. Rev. E **60**, 6507 (1999).
- [60] A. Buhot and J.P. Garrahan, Phys. Rev. Lett. **88**, 225702 (2002).
- [61] A. Crisanti and F. Ritort, J. Phys. A : Math. Gen. **36**, 181 (2003).
- [62] L. F. Cugliandolo and J. Kurchan, Phys. Rev. Lett. **71**, 173 (1993); Phil. Mag. **B71**, 501 (1995).
- [63] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, and L. Peliti, Phys. Rev. E **55**, 3898 (1997).
- [64] L. F. Cugliandolo and J. Kurchan, J. Phys. Soc. Japan **69**, 247 (2000).
- [65] L. F. Cugliandolo and J. Kurchan, J. Phys. A : Math. Gen. **27**, 5749 (1994).
- [66] P. G. Debenedetti and F. H. Stillinger, Nature **410**, 259 (2001).
- [67] R. A. Denny, D. Reichman and J-P. Bouchaud, Phys. Rev. Lett., **90**(2), 025503 (2003).
- [68] B. Derrida, Phys. Rev. Lett., **45** 79 (1980)
B. Derrida, Phys. Rev. B **24**, 2613-2626 (1981).
- [69] S. F. Edwards dans *Granular Matter : an interdisciplinary approach*, A. Mehta, Ed. (Springer-Verlag, New-York, 1994).
- [70] W. Götze, *Liquids, freezing and glass transition*, Les Houches 1989, JP Hansen, D. Levesque, J. Zinn-Justin Editeurs, North Holland.
W. Götze, L. Sjögren, Rep. Prog. Phys. **55** (1992) .
- [71] T. S. Grigera, A. Cavagna, I. Giardina, and G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **88**, 055502 (2002).
- [72] E. J. Gumbel, *Statistics of extremes*, Columbia University Press, publié en 1958.
- [73] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer, Rev. Mod. Phys. **68**, 1259 (1996).
- [74] I. Junier and E. Bertin, cond-mat/0408484.
- [75] T. Keyes and J. Chowdhary, Phys. Rev. E **65**, 041106 (2002).
- [76] J. Kurchan, Rheology, and how to stop aging, cond-mat/9812347
- [77] J. Kurchan, Comptes Rendus de l’Académie des Sciences Series IV Physics, vol. 2, no. 2, 239-247(9) (2001)
- [78] J. Kurchan and L. Laloux, J. Phys. A : Math. Gen. **29**, 1929 (1996).
- [79] P. Mayer, H. Bissig, L. Berthier, L. Cipelletti, J. P. Garrahan, P. Sollich, V. Trappe cond-mat/0405402
- [80] S. Mertens, Phys. Rev. Lett. **84**, 1347 (2000)
S. Mertens, Theor. Comput. Sci. **265**, 79 (2001).
- [81] M. Mezard, G. Parisi and M. A. Virasoro, Spin Glass Theory and Beyond, World Scientific, New Jersey, (1989).
- [82] C. Monthus, J.-P. Bouchaud, J. Phys. A : Math. Gen. **29**(14) 3847 (1996).

- [83] C. Monthus, J. Phys. A-Math. Gen. **36** 11605 (2003).
- [84] C. Monthus, Phys. Rev. E, **68**(3) 036114 (2003).
- [85] E. La Nave, S. Mossa, and F. Sciortino, Phys. Rev. Lett. **88**, 225701 (2002).
- [86] T. Odagaki, Phys. Rev. Lett., **75**(20), 3701 (1995).
- [87] F. Ritort, J. Phys. A : Math. Gen. **36**(43), 10791 (2003).
- [88] P. Sollich, J. Phys. A : Math. Gen. **36**(43), 10807 (2003)
Voir aussi : S. Fielding , P. Sollich, Phys. Rev. Lett. **88**(5), 050603 (2002).
- [89] P. Sollich, F. Lequeux, P. Hebraud and M. E. Cates, Phys. Rev. Lett. **78**, 2020 (1997).
- [90] P. Sollich, *Trap Models with correlated magnetization*, to be published.
- [91] F. H. Stillinger, Science **267**, 1935 (1995).

Table des publications

Publications dans des journaux de physique

Ivan Junier et Jorge Kurchan *Europhys. Lett.* **63** (5), 674-680 (2003).

Ivan Junier et Jorge Kurchan *J. Phys. A : Math. Gen.* **37**, 3945-3965 (2004).

Preprint

Ivan Junier et Eric Bertin, cond-mat/0408484 (A paraître dans *Phys. Rev. E*)