



HAL
open science

Etude de l'influence du désordre sur les propriétés critiques du modèle de Potts

Christophe Chatelain

► **To cite this version:**

Christophe Chatelain. Etude de l'influence du désordre sur les propriétés critiques du modèle de Potts. Mécanique statistique [cond-mat.stat-mech]. Université Henri Poincaré - Nancy I, 2000. Français. NNT: . tel-00001376

HAL Id: tel-00001376

<https://theses.hal.science/tel-00001376>

Submitted on 3 Jun 2002

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.



U.F.R. Sciences et Techniques de la Matière et des Procédés
École doctorale PROcédés Mécanique Énergie MATériaux
Groupe de Formation Doctorale Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux

Thèse

présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy I

en Physique

par **Christophe Chatelain**

Étude de l'influence du désordre sur les propriétés critiques du modèle de Potts

Soutenue publiquement devant la Commission d'Examen le 30 juin 2000

Membres du jury :

Président :	Loïc Turban	Université Henri Poincaré, Nancy I
Rapporteurs :	Heiko Rieger	Université de Saarbrücken, Allemagne
	Jean Vannimenus	École Normale Supérieure, Paris
Examineurs :	Alain Billoire	Commissariat à l'Énergie Atomique, Saclay
	John Cardy	Université d'Oxford, Grande-Bretagne
	Bertrand Berche	Université Henri Poincaré, Nancy I
Invité :	Ferenc Iglói	Research Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hongrie

Laboratoire de Physique des Matériaux
Faculté des Sciences - 54500 Vandœuvre-lès-Nancy

*A la mémoire
de mes grand-parents*

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé à l'université Henri Poincaré de Nancy au sein du laboratoire de Physique des Matériaux, dont je tiens à remercier pour leur accueil et leur confiance les directeurs successifs Amand George et Philippe Mangin.

Je voudrais exprimer toute ma gratitude à Loïc Turban qui a gentilement accepté d'assurer la présidence du jury et dont les remarques au cours de l'élaboration de ce manuscrit, et plus généralement au cours de ces quatre années passées au sein du groupe de physique statistique, m'ont été précieuses. Je suis très reconnaissant à Heiko Rieger et Jean Vannimenus qui ont bien voulu accepter la charge de rapporteur. Je tiens également à remercier chaleureusement Alain Billoire, John Cardy et Ferenc Iglói pour leur participation au jury.

C'est avec plaisir que je remercie ceux qui ont été, ou sont actuellement, mes collaborateurs : Pierre-Emmanuel Berche, Enrico Carlon, Gabor Palágyi, Ferenc Iglói et Wolfhard Janke. Ce travail est également un peu le leur. Les discussions avec Dragi Karevski, Malte Henkel, Marco Picco, Marc-André Lewis, Jesper Jacobsen, Katarina Uzelac (et tant d'autres) ont contribué à forger ma compréhension du sujet. Merci à eux. Je voudrais également remercier Christian Senet pour la maintenance du système informatique et Anne pour avoir relu avec attention ce manuscrit.

Cette liste ne saurait être complète sans un témoignage de ma profonde gratitude à Bertrand Berche pour la confiance et l'amitié, dont il m'a honoré depuis quatre ans, et qui m'ont été d'un grand réconfort. J'ai beaucoup appris à son contact et je le remercie d'avoir su me communiquer son enthousiasme pour la physique statistique et pour la physique en général.

SOMMAIRE

Introduction	1
Généralités	3
1. Introduction	3
2. Phénomènes critiques	5
2.1. Homogénéité et lois d'échelle	5
2.1.1. Hypothèse d'homogénéité	5
2.1.2. Lois d'échelle et corrections d'échelles	6
2.1.3. Propriétés de surface	7
2.1.4. Effets de taille finie	8
2.1.5. Effets de taille finie pour les transitions du premier ordre	9
2.2. Groupe de renormalisation	10
2.2.1. Transformation du groupe de renormalisation	10
2.2.2. Flot de renormalisation et comportement critique	11
2.2.3. Effets de cross-over	13
2.3. Invariance conforme	14
2.3.1. Hypothèse conforme	14
2.3.2. Conséquences de l'invariance conforme	14
3. Modèle de Potts	17
3.1. Présentation du modèle de Potts	17
3.2. Formulation de Fortuin-Kasteleyn	17
3.2.1. Fonction de partition	17
3.2.2. Dualité	18
3.3. Comportement critique	19
4. Systèmes désordonnés	20
4.1. Modélisation du désordre	20
4.2. Exemples expérimentaux	21
4.3. Critères de pertinence	24
4.3.1. Transitions du second ordre	24

4.3.2. Transitions du premier ordre	26
4.4. Symétrie des répliques	27
4.5. Auto-moyennance et multifractalité	28
4.5.1. Quantités auto-moyennantes	28
4.5.2. L'exemple de la chaîne d'Ising désordonnée	28
4.5.3. Universalité de R_ϕ au point fixe désordonné	29
4.5.4. Spectre multifractal	30

Perturbations unidimensionnelles 31

1. Introduction	31
2. Désordre de type “McCoy-Wu”	32
2.1. Introduction bibliographique	32
2.1.1. Modèle de McCoy-Wu	32
2.1.2. Stabilité de la classe d'universalité	33
2.2. Propriétés critiques de la chaîne de Potts désordonnée . .	34
2.2.1. Présentation du modèle et détails des calculs	34
2.2.2. Effets de taille finie de l'aimantation	35
2.2.3. Profils d'aimantation	38
2.2.4. Multifractalité	41
2.2.5. Fonctions de corrélation dynamiques	43
3. Perturbation aperiodique	44
3.1. Introduction	44
3.1.1. Construction et propriétés des séquences aperiodiques	45
3.1.2. Critère de Luck	46
3.1.3. Exemples de séquences aperiodiques	46
3.1.4. Ligne critique	49
3.2. Propriétés hors-criticalité	50
3.2.1. Détails des simulations	50
3.2.2. Propriétés magnétiques	51
3.2.3. Exposants effectifs	58
3.3. Propriétés au point critique	59
3.3.1. Effets de cross-over	61
3.3.2. Propriétés critiques magnétiques	62
3.3.3. Propriétés thermiques critiques	64
4. Conclusion	65

Désordre bidimensionnel homogène 67

1. Introduction	67
1.1. Modèle d'Ising désordonné	67

1.2. Modèle de Potts à 3 et 4 états	69
1.3. Modèle de Potts $q > 4$	70
2. Propriétés critiques du modèle de Potts $q = 8$ désordonné	72
2.1. Détails des simulations	72
2.1.1. Algorithmes	72
2.1.2. Paramètres de la simulation	72
2.1.3. Modélisation du désordre	73
2.2. Ordre de la transition de phase	75
2.2.1. Configurations de spin	75
2.2.2. Distribution de probabilité	75
2.2.3. Temps d'auto-corrélation	76
2.3. Comportement critique de volume	77
2.3.1. Effets de taille finie de l'aimantation	77
2.3.2. Effets de taille finie de la susceptibilité magnétique	78
2.4. Comportement critique de surface	81
2.4.1. Effets de taille finie	81
2.4.2. Approche en température du point critique	82
2.5. Conclusion	83
3. Applications de l'invariance conforme	84
3.1. Introduction	84
3.2. Modèle de Potts désordonné en géométrie cylindrique	86
3.2.1. Charge centrale	86
3.2.2. Décroissance des fonctions de corrélation spin-spin	89
3.3. Modèle de Potts désordonné en géométrie carrée	93
3.3.1. Fonctions de corrélation en conditions de bords libres	93
3.3.2. Profil d'aimantation en conditions de bords fixes	95
3.3.3. Profil d'énergie en conditions de bords fixes	97
3.4. Discussion	98
3.5. Comportement critique de surface	100
3.5.1. Introduction	100
3.5.2. Profils conformes d'aimantation	100
4. Universalité et multifractalité	104
4.1. Introduction	104
4.2. Universalité des propriétés critiques magnétiques	105
4.2.1. Comparaison avec les développements perturbatifs	105
4.2.2. Comparaison de plusieurs distributions	107
4.3. Multifractalité des moments de la fonction de corrélation	112
4.3.1. Auto-moyennance	112
4.3.2. Spectre multifractal	113
4.3.3. Universalité du spectre multifractal	114
4.3.4. Distribution de probabilité	115
4.4. Symétrie des répliques	120
4.5. Multifractalité et invariance conforme des moments des profils	

4.5.1. Invariance conforme des moments	122
4.5.2. Exposants de surface	123
4.6. Conclusion	124

Modèle de Potts dilué tridimensionnel 125

1. Introduction bibliographique	125
1.1. Modèle d'Ising	125
1.2. Modèle de Potts	126
2. Diagramme de phase	127
2.1. Détails des simulations	127
2.2. Ligne critique	129
2.3. Ordre de la transition	131
2.3.1. Allure de la susceptibilité magnétique	131
2.3.2. Temps d'auto-corrélation	132
3. Régime du second ordre	133
4. Discussion et perspectives	135

Conclusion 137

Annexe 141

1. Simulations Monte Carlo	141
1.1. Principes de la simulation Monte Carlo	141
1.1.1. Introduction	141
1.1.2. Monte Carlo dynamique	141
1.1.3. Chaîne de Markov	142
1.1.4. Condition du bilan détaillé	142
1.1.5. Équation maîtresse de la dynamique	142
1.2. Grandeurs thermodynamiques	143
1.2.1. Moyennes thermiques	143
1.2.2. Erreur statistique	143
1.2.3. Ralentissement critique	144
1.2.4. Repondération de l'histogramme	145
1.2.5. Erreur statistique liée à la repondération de l'histogramme	146
1.3. Algorithmes locaux	148
1.3.1. Algorithme de Metropolis	148
1.3.2. Ralentissement critique	148
1.4. Algorithmes d'amas	149
1.4.1. Algorithme de Swendsen-Wang	149

1.4.2. Algorithme de Wolff	151
1.4.3. Approche générale de Kandel-Domany	152
1.5. Systèmes présentant un super-ralentissement critique . .	154
1.5.1. Super-ralentissement critique	154
1.5.2. Détermination de l'ordre et de la température de la transition	155
1.5.3. Ensemble multi-canonique	156
1.5.4. Algorithme multi-liaisons	157
2. Matrices de transfert	158
2.1. Application aux systèmes désordonnés	158
2.2. Matrice de transfert de connectivité	160
2.2.1. Formulation de Fortuin-Kasteleyn	160
2.2.2. Espace de connectivité	161
2.2.3. Matrice de transfert	162
2.2.4. Moyennes thermodynamiques	164
2.3. Groupe de Renormalisation de la Matrice Densité (DMRG)	168
2.3.1. Introduction	168
2.3.2. Principe de la DMRG	168
2.3.3. Algorithme de taille infinie	169
2.3.4. Algorithme de taille finie	170
Index	173
Liste des figures	175
Liste des tableaux	181
Bibliographie	183

INTRODUCTION

Les phénomènes critiques trouvent leur origine dans l'invariance par changement d'échelle, une symétrie présente dans de nombreux phénomènes physiques et à la base de leur compréhension théorique. Pour des combinaisons spécifiques des conditions extérieures (pression, température, champ magnétique,...), les corrélations entre les degrés de liberté d'un système en interaction décroissent très lentement et tendent dans la limite thermodynamique vers une loi algébrique. Ces conditions particulières sont réunies au point critique d'une transition de phase du second ordre. La longueur de corrélation, qui mesure la portée des corrélations, diverge à l'approche du point critique. La densité d'énergie libre et toutes les grandeurs thermodynamiques, qui en dérivent, présentent des singularités sous forme de lois de puissance caractérisées par un nombre fini d'exposants critiques dont l'ensemble de valeurs définit la classe d'universalité. En vertu du théorème fluctuation-dissipation, la divergence des dérivées secondes de l'énergie libre s'accompagne de celle des fluctuations de ses dérivées premières. Ainsi, comme l'a observé Cagniard de Latour en 1822, le mélange alcool-eau présente à son point critique une diffusion importante de la lumière qui lui donne un aspect laiteux et dont l'origine provient des fluctuations de densité critiques. Toutefois, l'importance de ces fluctuations n'a été comprise que très tardivement. La théorie phénoménologique des transitions de phase du second ordre développée par Landau néglige totalement les fluctuations critiques. Il faudra attendre la solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel par Onsager ^[177] en 1944 pour qu'on réalise que ces dernières constituent un ingrédient essentiel des transitions de phase du second ordre. La divergence de la longueur de corrélation au point critique correspond à la disparition de toute longueur caractéristique. Les fluctuations se développent par conséquent de manière similaire à toutes les échelles de longueur (comprises entre le pas de réseau et la taille du système) et la décroissance des fonctions de corrélation satisfait une relation de covariance par changement d'échelle. Ces idées ont fondé le cadre conceptuel du groupe de renormalisation dont Wilson fut dans les années '70 l'un des principaux instigateurs. Le groupe de renormalisation fournit un cadre général qui permet le calcul des exposants critiques et une compréhension des mécanismes conduisant à l'existence de classes d'universalité regroupant les systèmes dont les propriétés critiques sont identiques. Peu de temps après, l'hypothèse de covariance par dilatation a été étendue par Polyakov ^[188] à celle de covariance par dilatation de facteur d'échelle local, c.à.d. par transformation conforme. La théorie conforme, construite sur cette hypothèse, s'est révélée très prolifique en résultats exacts pour les systèmes bidimensionnels. Parallèlement à ces développements analytiques, la part des résultats numériques s'est considérablement accrue ces vingt-cinq dernières années. L'augmentation constante de la puissance de calcul disponible, mais aussi le développement d'algorithmes plus efficaces, font désormais des méthodes

numériques un outil complémentaire des techniques analytiques. Les simulations Monte Carlo, dont l'algorithme proposé en 1953 par Metropolis *et al.* ^[163] constitue un travail précurseur, ont progressé de manière significative ces douze dernières années avec le développement des algorithmes d'amas et des méthodes multi-canoniques. La diagonalisation numériquement exacte des matrices de transfert (c.à.d. la diagonalisation par des méthodes numériques de l'expression analytique de la matrice de transfert, limitée en principe par la précision machine), s'est enrichie de méthodes extrêmement puissantes telles que la "DMRG" qui permettent d'aborder des systèmes de très grande taille.

Les techniques analytiques et numériques dont il vient d'être brièvement question ont conduit à une connaissance très complète des propriétés critiques des systèmes homogènes. Motivée par la présence inévitable d'impuretés ou de défauts de structure dans un échantillon réel, l'étude de l'influence du désordre a fait l'objet depuis les années '60 de nombreux travaux, tant expérimentaux que théoriques. Une éventuelle modification de la classe d'universalité sous l'effet d'un désordre homogène peut être prédite par le critère de Harris ^[94]. Le modèle d'Ising bidimensionnel correspond à un cas particulier pour lequel le critère de Harris ne permet pas de conclure. C'est par ailleurs l'un des rares systèmes dont la solution exacte est connue dans le cas bidimensionnel pur. Le modèle d'Ising dilué a de ce fait focalisé une grande partie de l'attention. Les résultats analytiques obtenus par Shalaev en 1984 montrent l'apparition de corrections logarithmiques mais pas de modification de la classe d'universalité ^[207]. Calculs numériques et observations expérimentales confortent cette conclusion. Dans le cas des transitions du premier ordre, le désordre adoucit la transition selon un mécanisme proposé par Imry et Wortis et peut même conduire à une transition continue ^[109]. Ce passage d'une transition du premier ordre à une transition continue sous l'influence du désordre a notamment été observé numériquement pour le modèle de Potts bidimensionnel à huit états ^[49, 50].

C'est dans ce contexte que s'inscrit cette thèse. Nous présentons une étude numérique de l'influence d'une perturbation inhomogène couplée à la densité d'énergie sur les propriétés critiques du modèle de Potts. Le choix de ce modèle est motivé par la grande richesse qu'il présente dans le cas pur (transitions du premier ou de second ordre selon le nombre d'états par spin) et par la possibilité de réaliser des études numériques à l'aide de méthodes variées. Les résultats ont été obtenus au moyen de simulations Monte Carlo et par des techniques de matrice de transfert. Après un premier chapitre rassemblant quelques généralités utiles à la cohérence du texte, il sera question de perturbations corrélées dans une direction de l'espace. Nous présentons une étude d'une distribution aléatoire des couplages d'une rangée à la suivante et montrons qu'elle conduit à un comportement critique qui ne dépend pas du nombre d'états du modèle de Potts bidimensionnel. Dans un deuxième temps, nous montrons qu'une modulation aperiodique des couplages d'échange peut induire une transition continue pour le modèle de Potts à huit états. Le troisième chapitre est consacré au cas du désordre homogène dans le régime de premier ordre puis dans celui de second ordre du modèle de Potts bidimensionnel pur. L'accent est mis sur la validité des expressions conformes des fonctions de corrélation et du profil d'aimantation, testée en géométrie cylindrique et carrée. Les résultats sont comparés aux développements perturbatifs au voisinage du modèle d'Ising ($q = 2$). Le dernier chapitre présente des travaux en cours sur le modèle de Potts dilué à trois dimensions.

Chapitre 1

GÉNÉRALITÉS

1. Introduction

L'apparition d'une **transition de phase** dans un système à l'équilibre thermodynamique avec un thermostat trouve son origine dans la compétition entre énergie E et entropie S . A basse température, la minimisation de l'énergie libre $F = E - TS$ favorise les configurations de plus basses énergies. Au dessus d'une température T_c , le terme entropique l'emporte et les configurations les plus dégénérées, généralement désordonnées, prédominent. Dans la phase basse température, le système ne présente plus toutes les symétries de l'hamiltonien : on parle de **brisure de symétrie**. Les deux phases peuvent être distinguées en définissant un **paramètre d'ordre** qui ne prend une valeur non nulle que dans la phase ordonnée. Ainsi, la densité d'aimantation pourra être utilisée comme le paramètre d'ordre de la transition ferromagnétique-paramagnétique. On distingue les transitions du premier ordre, pour lesquelles le paramètre d'ordre s'annule de manière discontinue à la température de transition, des transitions d'ordre supérieur, aussi appelées continues.

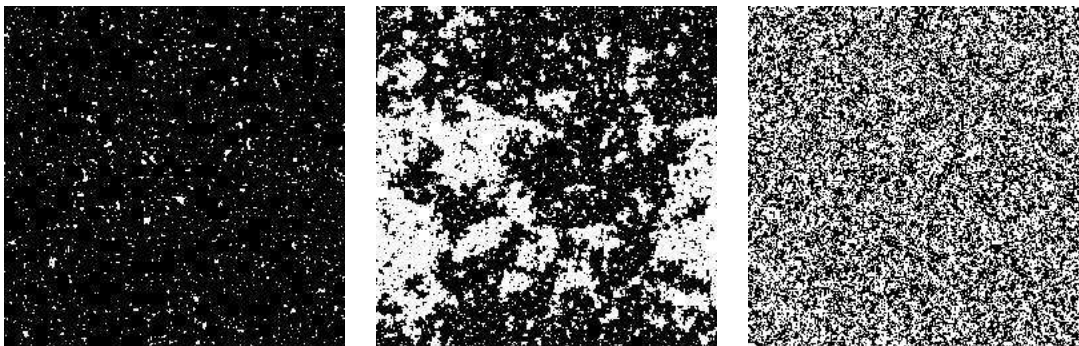


Figure 1.1.1 : Configurations typiques du modèle d'Ising pour les températures en dessous (à gauche), au voisinage et au-dessus (à droite) de la température critique. Chaque point correspond à un degré de liberté et sa couleur aux deux états possibles. Le modèle est défini au paragraphe 3.1

La plupart des modèles décrivant les propriétés thermodynamiques de systèmes physiques reposent sur une approximation de champ moyen, justifiée par l'hypothèse

d'une décroissance suffisamment rapide des fonctions de corrélation. Cette hypothèse n'est toutefois pas valide au voisinage d'une transition de phase du second ordre. En effet, on observe au point critique une décroissance algébrique des fonctions de corrélation qui entraîne l'apparition d'une singularité de la densité d'énergie libre et une divergence de ses dérivées d'ordre supérieur ou égal à deux. La divergence de la longueur de corrélation à l'approche du point critique se manifeste par l'apparition de fluctuations à toutes les échelles de longueur. La figure 1.1.1 illustre cette évolution des fluctuations avec la température.

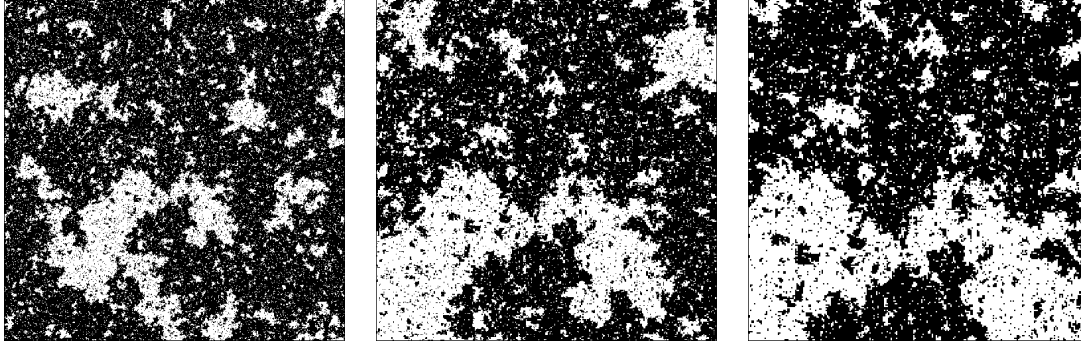


Figure 1.1.2 : Une même configuration du modèle d'Ising au voisinage de la température critique du système fini à des échelles de longueur différentes. La région centrale a été agrandie 2 puis 3 fois.

Le caractère fractal (ou plus exactement **auto-similaire**) des fluctuations engendre la covariance d'un système critique par changement d'échelle (figure 1.1.2). L'absence d'échelle de longueur impose un comportement en loi de puissance des grandeurs thermodynamiques au voisinage du point critique (tableau 1.1.1). Les exposants associés à ces lois de puissance sont appelés des **exposants critiques**. La disparition de toute échelle de longueur rend les détails microscopiques sans influence sur les propriétés critiques. On dit de deux systèmes présentant le même comportement critique qu'ils appartiennent à la même **classe d'universalité**. Les exposants critiques sont caractéristiques d'une classe d'universalité.

Longueur de corrélation	$\xi \sim t^{-\nu}, \quad \xi \sim h^{-\nu_h}$
Aimantation	$m \sim t^\beta, \quad m \sim h^{1/\delta}$
Susceptibilité magnétique	$\chi \sim t^{-\gamma}$
Chaleur spécifique	$C \sim t^{-\alpha}$
Fonction de corrélation spin-spin	$G_{\sigma\sigma}(\mathbf{r}) \sim r^{-(d-2+\eta)}$

Tableau 1.1.1 : Comportement des grandeurs thermodynamiques au voisinage du point critique, l'écart au point critique étant mesuré par la température réduite $t = T - T_c$ ou le champ magnétique h .

L'hypothèse d'homogénéité de la densité d'énergie libre permet d'établir des relations entre les exposants critiques. Elle trouve sa justification dans la théorie

plus vaste du groupe de renormalisation. Plus récemment, la théorie conforme a considérablement fait progresser l'étude des phénomènes critiques. Nous présenterons un bref aperçu de ces développements. Il sera suivi d'une description du modèle de Potts, servant dans cette thèse de système modèle à l'étude de l'influence du désordre. Enfin, une discussion très générale de l'influence du désordre sur les transitions du premier et du second ordre fera l'objet d'un dernier paragraphe.

2. Phénomènes critiques

2.1. Homogénéité et lois d'échelle

2.1.1. Hypothèse d'homogénéité

La covariance par changement d'échelle d'un système critique suggère la conservation de la partie singulière de l'énergie libre lors d'une dilatation de facteur d'échelle b illustrée par la figure 1.2.1. La densité d'énergie libre f_{sing} est par conséquent affectée d'un facteur multiplicatif b^d si d est la dimension de l'espace.

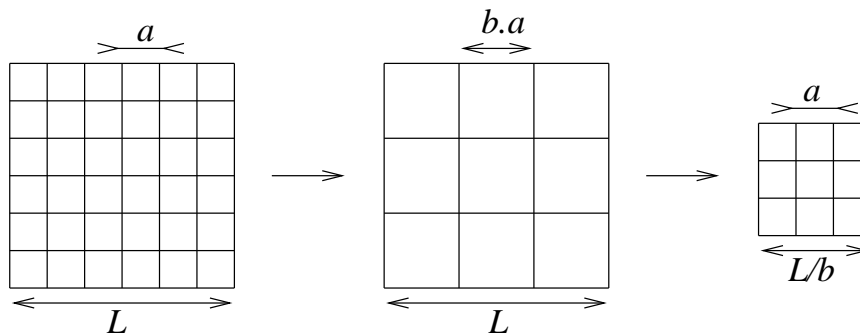


Figure 1.2.1 : Mécanisme de changement d'échelle.

Comme toutes les longueurs, la longueur de corrélation se transforme suivant la loi $\xi \rightarrow \xi/b$. Il en découle la loi de transformation des champs d'échelle :

$$\begin{cases} t \sim \xi^{-1/\nu} \longrightarrow t' = b^{1/\nu} \xi^{-1/\nu} = b^{y_t} t \\ h \sim \xi^{-1/\nu_h} \longrightarrow h' = b^{1/\nu_h} \xi^{-1/\nu_h} = b^{y_h} h \end{cases} \quad (1.2.1)$$

où l'on a posé $y_t = 1/\nu$ et $y_h = 1/\nu_h$. La densité d'énergie libre peut donc s'écrire comme une fonction homogène généralisée des champs d'échelle t et h :

$$f_{\text{sing}}(t, h) = b^{-d} f_{\text{sing}}(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (1.2.2)$$

Par dérivations successives de l'expression (1.2.2), chaque grandeur thermodynamique peut être exprimée comme une fonction homogène généralisée des champs d'échelle. On obtient par exemple après dérivation par rapport au champ h :

$$m(t, h) = b^{-d+y_h} m(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (1.2.3)$$

2.1.2. Lois d'échelle et corrections d'échelles

Le choix $h = 0$ et $b = t^{-1/y_t}$ dans (1.2.3) conduit au comportement en loi de puissance de l'aimantation avec la température :

$$m(t, h) = t^{(d-y_h)/y_t} m(1, 0) \sim t^{(d-y_h)/y_t} \quad (1.2.4)$$

et permet d'exprimer l'exposant critique β de l'aimantation en fonction des dimensions d'échelle y_t et y_h des champs t et h :

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t}. \quad (1.2.5)$$

On peut de la même manière relier tous les exposants critiques à y_t et y_h :

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t}, \quad \delta = \frac{y_h}{d - y_h}, \quad \gamma = \frac{2y_h - d}{y_t}, \quad \eta = d - 2y_h + 2. \quad (1.2.6)$$

Les **lois d'échelle** liant entre eux les exposants critiques avaient été conjecturées dans les années '60 à partir d'inégalités basées sur des arguments thermodynamiques. L'hypothèse d'homogénéité en donne une démonstration. Les relations (1.2.5) et (1.2.6) conduisent naturellement à [†]

$$\begin{cases} \alpha = 2 - \nu d & \text{(Josephson),} \\ \gamma = \beta(\delta - 1) & \text{(Widom),} \\ \alpha + 2\beta + \gamma = 2 & \text{(Rushbrooke),} \\ \gamma = \nu(2 - \eta) & \text{(Fisher).} \end{cases} \quad (1.2.7)$$

Les lois d'homogénéité et le comportement en loi de puissance des grandeurs thermodynamiques qui en découle ne sont valables qu'au voisinage immédiat du point critique. Lorsqu'on s'en éloigne, des déviations apparaissent qui conduisent à des **corrections d'échelle**. L'expression (1.2.4) par exemple peut s'écrire

$$m(t) \sim t^\beta \left(1 + b t^\omega + \dots \right), \quad (\omega > 0). \quad (1.2.8)$$

Le comportement dominant de l'aimantation est bien défini par l'exposant β mais les corrections d'échelles se manifestent loin du point critique par un exposant effectif :

$$\beta^{\text{eff}} = \frac{d \ln m}{d \ln t} = \beta + \frac{b \omega t^\omega}{1 + b t^\omega} + \dots \quad (1.2.9)$$

dont la figure 1.2.2 donne un exemple.

[†] La relation de Josephson n'est valable qu'en dimension $d \leq d_c$ où d_c est la dimension critique supérieure au delà de laquelle le comportement critique est de type champ moyen.

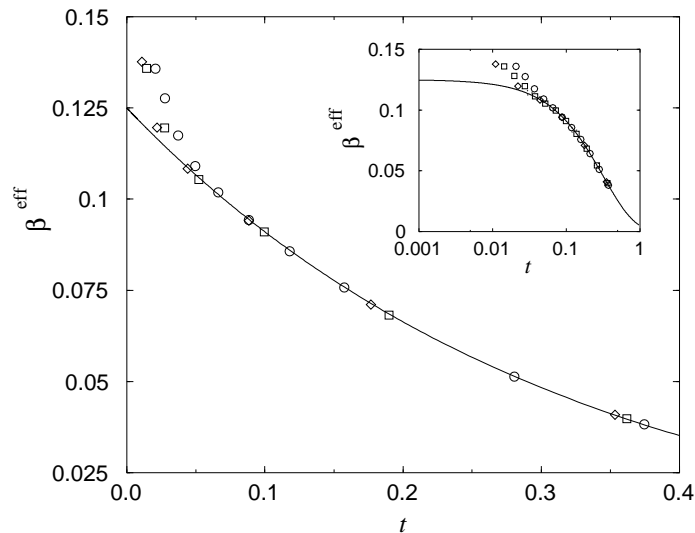


Figure 1.2.2 : Exposant effectif $\beta^{\text{eff}} = d \ln m / d \ln t$ en fonction de l'écart au point critique du modèle d'Ising homogène bidimensionnel calculé numériquement pour des systèmes de tailles $L = 64$ (\circ), 96 (\square) et 128 (\diamond). La courbe en trait plein correspond au résultat exact dans la limite thermodynamique.

2.1.3. Propriétés de surface

La présence d'une surface limite l'extension des fluctuations dans la direction perpendiculaire à la surface mais pas dans les directions parallèles. On peut donc s'attendre à une divergence de la longueur de corrélation dans les directions parallèles à la surface et à un comportement critique propre des grandeurs thermodynamiques de surface. Pour un ruban de largeur L , la densité d'énergie libre peut s'écrire à l'ordre le plus bas en $1/L$ sous la forme

$$f_{\text{sing}}(t, h, t_1, h_1) = f_b(t, h) + \frac{2}{L} f_s(t, h, t_1, h_1) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right), \quad (1.2.10)$$

où L est la largeur du système dans la direction perpendiculaire à la surface et t_1 et h_1 sont les champs d'échelle conjugués aux densités d'énergie e_1 et d'aimantation m_1 de surface.

L'hypothèse d'homogénéité impose la forme de la densité d'énergie libre de surface suivante :

$$f_s(t, h, t_1, h_1) = b^{-(d-1)} f_s(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{y_{t_1}} t_1, b^{y_{h_1}} h_1) \quad (1.2.11)$$

dont on peut déduire le comportement critique des grandeurs thermodynamiques de surface. On a par exemple

$$m_1 = -\frac{\partial f_s}{\partial h_1} \sim t^{\beta_1}, \quad \beta_1 = \frac{d-1-y_{h_1}}{y_t} \quad (1.2.12)$$

et

$$e_1 \sim \frac{\partial f_s}{\partial t_1} \sim t^{\nu_e^1}, \quad \nu_e^1 = \frac{d-1-y_{t_1}}{y_t}. \quad (1.2.13)$$

Les exposants critiques de surface sont indépendants des exposants de volume. La détermination de la classe d'universalité d'un système critique nécessite par conséquent la connaissance de deux exposants de volume et de deux exposants de surface.

2.1.4. Effets de taille finie

Dans un système fini, l'extension des fluctuations est limitée par la taille du système et par conséquent aucune grandeur thermodynamique ne présente de singularité. On peut néanmoins définir une température de transition $T_c(L)$ pour un système de taille L comme la température correspondant au maximum de la chaleur spécifique par exemple. Ce maximum intervient lorsque le développement du volume de corrélation se heurte aux extrémités du système :

$$\xi \sim [T_c(L) - T_c]^{-\nu} \sim L \Leftrightarrow T_c(L) \sim T_c + \mathcal{A}L^{-1/\nu}. \quad (1.2.14)$$

La taille finie du système limite également le développement des singularités des grandeurs thermodynamiques et, par exemple pour l'aimantation, le comportement d'échelle $m \sim t^\beta \sim \xi^{-\beta/\nu}$ donné par (1.2.4) laisse place à

$$m \sim L^{-\beta/\nu} \quad (1.2.15)$$

dès que la longueur de corrélation atteint les bords du système. La figure 1.2.3 illustre ce type de comportement pour la susceptibilité magnétique.

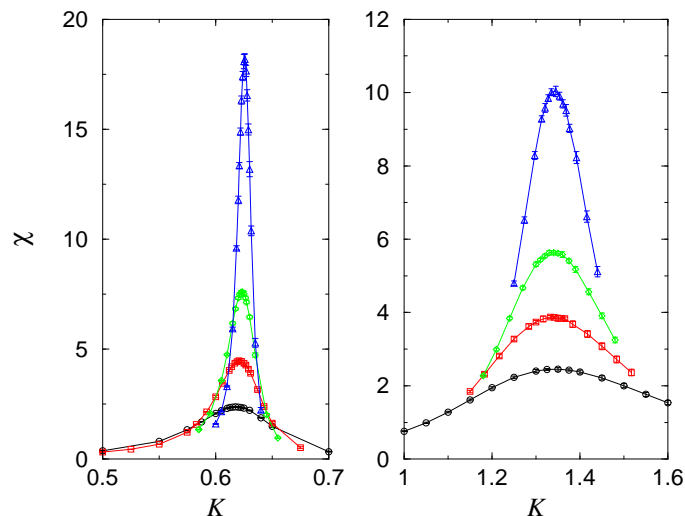


Figure 1.2.3 : Susceptibilité magnétique χ en fonction du couplage d'échange $K = J/k_B T$ pour le modèle de Potts tridimensionnel à quatre états dans le cas homogène (à gauche) et avec une dilution de liaison (à droite) pour une concentration de liaison $p = 0.48$ et pour les tailles $L = 4, 5, 6$ et 8 . Dans le premier cas, la transition est du premier ordre avec un pic dont la largeur s'annule dans la limite thermodynamique $L \rightarrow +\infty$ alors que dans le second, le pic tend vers une enveloppe en loi de puissance caractéristique d'une transition continue [164].

Pour rendre compte des effets de taille finie, on est amené à introduire dans l'expression (1.2.2) de la densité d'énergie libre un champ d'échelle $1/L$, nul dans la limite thermodynamique. Il vient alors

$$f_{\text{sing}}(t, h, 1/L) = b^{-d} f_{\text{sing}}(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b/L). \quad (1.2.16)$$

Par dérivations successives de cette relation et avec le choix $b = L$, on obtient pour toute grandeur thermodynamique un comportement de la forme (1.2.15) au point critique du système infini $t = h = 0$.

2.1.5. Effets de taille finie pour les transitions du premier ordre

Les transitions de phase du premier ordre se distinguent des transitions du second ordre par la présence de discontinuités des dérivées premières de l'énergie libre. Pour une transition contrôlée par la température, la coexistence à la température de transition des phases haute et basse températures se manifeste par un saut de l'énergie interne du système, appelé chaleur latente de transformation. La longueur de corrélation reste finie à toute température. On peut donc adopter l'image d'un système divisé en "blobs" finis et indépendants. Le théorème de la limite centrale impose par conséquent une distribution de probabilité gaussienne de l'énergie totale. La variance de la distribution est reliée à la chaleur spécifique par le théorème fluctuation-dissipation. Au voisinage de la température de transition, on pourra rencontrer dans le système des amas dans l'une ou l'autre des deux phases séparées par la transition. Il semble donc naturel de supposer que la distribution de probabilité de la densité d'énergie totale e est dominée par la somme de deux lois gaussiennes correspondant aux phases respectivement ordonnées et désordonnée [41, 222] :

$$\wp(e) = A \left[\frac{a_+}{\sqrt{C_+}} e^{-\frac{(e - (e_+ + C_+ \Delta T))^2 L^d}{2k_B T^2 C_+}} + \frac{a_-}{\sqrt{C_-}} e^{-\frac{(e - (e_- + C_- \Delta T))^2 L^d}{2k_B T^2 C_-}} \right]. \quad (1.2.17)$$

A une température $T = T_t + \Delta T$ proche de la température de transition T_t , les gaussiennes sont centrées sur les valeurs de la densité d'énergie interne des phases ordonnée ($e_+ + \Delta T.C_+$) et désordonnée ($e_- + \Delta T.C_-$). La distribution (1.2.17) permet le calcul des moments de l'énergie dont il est possible de déduire le comportement avec la taille L du système. On montre en particulier qu'on a

$$\langle e \rangle \underset{L \rightarrow +\infty}{\sim} L^0, \quad C \underset{L \rightarrow +\infty}{\sim} L^d. \quad (1.2.18)$$

L'approximation des deux gaussiennes conduit à une prédiction erronée de la position des pics à cause d'une forte dépendance en L [20]. Une théorie plus rigoureuse † des effets de taille finie au voisinage d'une transition du premier ordre, basée sur l'approximation de la fonction de partition par la somme des fonctions de partition de chacune des phases en coexistence à la température de transition, a été développée par Borgs *et al.* [26, 27]. Le cumulants d'ordre 4

$$U_e = 1 - \frac{\langle e^4 \rangle}{3\langle e^2 \rangle^2} \quad (1.2.19)$$

ou **cumulants de Binder** [21] possède un comportement très différent selon l'ordre de la transition. L'approximation des deux gaussiennes (et la théorie de Borgs *et al.*)

† Pour le modèle de Potts à q états qui sera présenté au paragraphe 3, la théorie de Borgs *et al.* correspond aux premiers termes du développement en $1/\sqrt{q}$ de la densité d'énergie libre.

permet de montrer que le cumulante de Binder possède un minimum à la température $T_t(L) \sim T_t + \mathcal{A}L^{-d}$ et qui tend vers $-\infty$ dans la limite thermodynamique. Pour deux tailles voisines L et $L' = L - \Delta L$, les cumulants de Binder se coupent à la température $T_{\text{cross}}(L) \sim T_t + \mathcal{A}L^{-2d}$. Dans le cas d'une transition du second ordre en revanche, le cumulante de Binder reste fini à toute température.

2.2. Groupe de renormalisation

2.2.1. Transformation du groupe de renormalisation

Le groupe de renormalisation met à profit l'invariance d'un système critique par changement d'échelle ^[151, 80, 228, 83, 35]. Considérons le cas général d'un système dont les degrés de liberté $\{\Phi_\alpha(\mathbf{r})\}$ sont disposés aux nœuds d'un réseau et dont les interactions sont décrites par l'hamiltonien

$$-\beta\mathcal{H}[\{\Phi_\alpha(\mathbf{r})\}] = \sum_{\alpha} K_{\alpha} \sum_{\mathbf{r}} \Phi_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (1.2.20)$$

On peut définir une itération du groupe de renormalisation comme l'association des deux étapes suivantes :

1. Réduction du nombre de degrés de liberté par une transformation \mathcal{F} :

$$\{\Phi_{\alpha}(\mathbf{r})\} \longrightarrow \{\Phi'_{\alpha}(\mathbf{r}')\} = \mathcal{F}(\{\Phi_{\alpha}(\mathbf{r})\}). \quad (1.2.21)$$

La figure 1.2.4 présente un exemple d'itération du groupe de renormalisation au cours de laquelle les degrés de liberté sont groupés par blocs et remplacés par un unique degré de liberté de même nature ^[170]. La transformation est souvent réalisée dans l'espace de Fourier et correspond à une intégration sur les fluctuations de courtes longueurs d'onde ^[28]. Malgré la dénomination de groupe de renormalisation, la transformation n'est pas inversible (on devrait parler de semi-groupe).

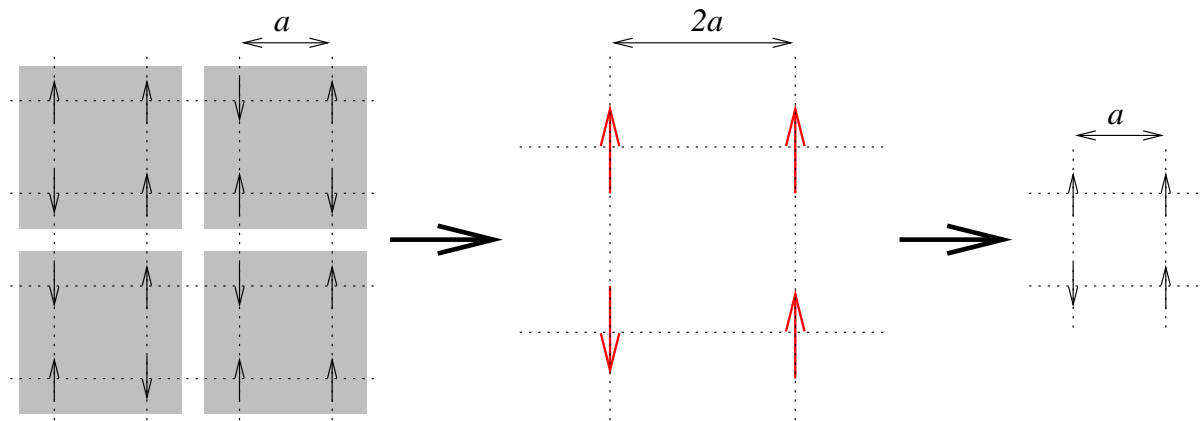


Figure 1.2.4 : Exemple de transformation du groupe de renormalisation (“majority rule”) pour un modèle dont les degrés de liberté peuvent prendre deux états (\uparrow ou \downarrow).

2. Dilatation de facteur b de manière à préserver la densité des degrés de liberté :

$$\mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}/b. \quad (1.2.22)$$

La statistique des degrés de liberté $\{\Phi'_\alpha(\mathbf{r}')$ est gouvernée par un nouvel hamiltonien \mathcal{H}' défini de manière à assurer la conservation du poids statistique lors d'une itération du groupe de renormalisation :

$$e^{-\beta\mathcal{H}'[\{\Phi'_\alpha(\mathbf{r}')\}]} = \sum_{\{\Phi_\alpha(\mathbf{r})\}} \prod_{\alpha, \mathbf{r}} \delta(\{\Phi'_\alpha(\mathbf{r}')\} - \mathcal{F}(\{\Phi_\alpha(\mathbf{r})\})) e^{-\beta\mathcal{H}[\{\Phi_\alpha(\mathbf{r})\}]} \quad (1.2.23)$$

Les itérations du groupe de renormalisation font en général apparaître dans l'hamiltonien renormalisé \mathcal{H}' des termes d'interaction qui n'existaient pas dans l'hamiltonien \mathcal{H} initial (figure 1.2.5). La seule restriction à la forme de l'hamiltonien \mathcal{H}' est imposée par les propriétés de symétrie de l'hamiltonien de départ. La définition (1.2.23) de l'hamiltonien \mathcal{H}' impose la conservation de la fonction de partition

$$\mathcal{Z}' = \sum_{\{\Phi'_\alpha(\mathbf{r}')\}} e^{-\beta\mathcal{H}'[\{\Phi'_\alpha(\mathbf{r}')\}]} = \sum_{\{\Phi_\alpha(\mathbf{r})\}} e^{-\beta\mathcal{H}[\{\Phi_\alpha(\mathbf{r})\}]} = \mathcal{Z} \quad (1.2.24)$$

et donc de l'énergie libre $F = -k_B T \ln \mathcal{Z}$.

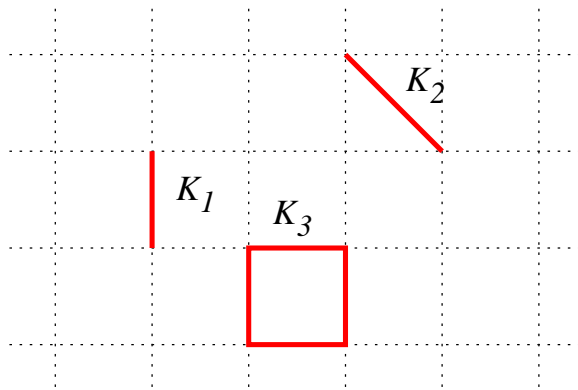


Figure 1.2.5 : Couplages K_1 , K_2 et K_3 associés aux interactions susceptibles d'apparaître lors de la première itération du groupe de renormalisation pour un modèle ne présentant au départ que des interactions entre premiers voisins sur le réseau.

2.2.2. Flot de renormalisation et comportement critique

Une itération du groupe de renormalisation correspond à un déplacement du point représentatif du système dans l'espace des couplages $\{K_\alpha\}$:

$$\mathbf{K} = (K_1 \quad K_2 \quad K_3 \quad \dots) \longrightarrow \mathbf{K}' = (K'_1 \quad K'_2 \quad K'_3 \quad \dots) = \mathcal{R}(b)\mathbf{K}. \quad (1.2.25)$$

La trajectoire suivie par le point représentatif lors d'itérations successives du groupe de renormalisation porte le nom de **flot de renormalisation**. Les **points fixes** de ce flot de renormalisation, c.à.d. les points tels que $\mathbf{K}^* = \mathcal{R}(b)\mathbf{K}^*$, correspondent soit à des limites triviales (température nulle ou infinie par exemple) soit à des points fixes non-triviaux qui sont alors caractéristiques d'une classe d'universalité. Au voisinage d'un point fixe, on peut écrire en première approximation

$$K'_\alpha - K_\alpha^* = \sum_{\beta} T_{\alpha\beta}(b) \cdot (K_\beta - K_\beta^*), \quad T_{\alpha\beta}(b) = \left(\frac{\partial K'_\alpha}{\partial K_\beta} \right)_{\mathbf{K}^*}. \quad (1.2.26)$$

La structure de groupe des dilatations implique la propriété

$$T(b_1 b_2) = T(b_1)T(b_2), \quad (1.2.27)$$

ce qui impose que les valeurs propres de $T(b)$ soient de la forme b^{y_i} . Le développement de (1.2.26) dans la base propre $\{\mathbf{e}^{(i)}\}$ de T s'écrit

$$K_\alpha - K_\alpha^* = \sum_i t_i e_\alpha^{(i)} \Leftrightarrow K'_\alpha - K_\alpha^* = \sum_i t_i b^{y_i} e_\alpha^{(i)} \quad (1.2.28)$$

où t_i est le $i^{\text{ème}}$ **champ d'échelle** dont la dimension fractale y_i gouverne le comportement du système dans la direction $\mathbf{e}^{(i)}$. En effet, si

$y_i > 0$, le champ d'échelle est **pertinent**. Si t_i est non nul, le point représentatif du système s'éloigne du point fixe dans la direction $\mathbf{e}^{(i)}$ après itération du groupe de renormalisation ($t'_i = b^{y_i} t_i > t_i$),

$y_i < 0$, le champ d'échelle est non pertinent. Une itération du groupe de renormalisation rapproche du point fixe le point représentatif du système. Le flot de renormalisation suivant la direction $\mathbf{e}^{(i)}$ est dirigé en direction du point fixe,

$y_i = 0$, le champ d'échelle est **marginal**. La pertinence du champ d'échelle n'est déterminée qu'en allant au-delà de l'approximation linéaire (1.2.26).

Au voisinage du point fixe, l'hamiltonien s'écrit également de manière linéaire :

$$-\beta\mathcal{H} = -\beta\mathcal{H}^* + \sum_i t_i O_i \quad (1.2.29)$$

où les $\{O_i\}$ sont les **opérateurs d'échelle** associés aux champs d'échelle $\{t_i\}$. De manière similaire à l'hamiltonien initial (1.2.20), ces opérateurs d'échelle peuvent s'exprimer sous la forme $O_i = \sum_{\mathbf{r}} \phi_i(\mathbf{r})$ d'une somme d'opérateurs locaux $\phi_i(\mathbf{r})$. La dimension de l'hamiltonien impose que la dimension d'échelle x_i de ces opérateurs locaux soit reliée à celle des champs d'échelle correspondants par

$$x_i = d - y_i. \quad (1.2.30)$$

Les fonctions de corrélation des opérateurs $\phi_i(\mathbf{r})$ se transforment lors d'une itération du groupe de renormalisation comme

$$\langle \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2) \dots \rangle = \left[\prod_i b^{-x_i} \right] \langle \phi_1(\mathbf{r}_1/b) \phi_2(\mathbf{r}_2/b) \dots \rangle. \quad (1.2.31)$$

Il existe toujours au moins deux champs d'échelle pertinents dont les opérateurs locaux associés sont la densité d'énergie et le paramètre d'ordre. S'il existe d'autres champs d'échelle pertinents, le point fixe correspond à un point multicritique, c.à.d. un point de part et d'autre duquel se trouvent plus de deux phases.

2.2.3. Effets de cross-over

Les champs non-pertinents peuvent donner lieu à des effets dits de **cross-over** en courbant le flot de renormalisation. La figure 1.2.6 présente un exemple pour lequel le flot de renormalisation suit dans un premier temps la direction non-pertinente d'un premier point fixe avant de prendre fin à un second point fixe sous l'effet de l'une de ses directions pertinentes. Afin d'illustrer le mécanisme de cross-over, considérons le système dont les champs d'échelle sont l'écart en température au point critique t , le champ magnétique h , l'inverse de la taille du système $1/L$ et un champ non pertinent g . En intégrant sur tout l'espace la fonction de corrélation à deux points (1.2.31) du paramètre d'ordre, on retrouve une relation de la forme (1.2.3) pour la susceptibilité magnétique :

$$\chi(t, h, L^{-1}, g) = b^{-2x_\sigma + d} \chi(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b L^{-1}, b^{y_g} g) \quad (1.2.32)$$

où $x_\sigma = d - y_h$ est la dimension d'échelle du paramètre d'ordre. Le développement de $\chi(t, h, L^{-1}, g)$ au voisinage de $g = 1/L = 0$ fait apparaître les corrections d'échelles au comportement dominant dont sont responsables les champs d'échelles non-pertinents. En se plaçant à $t = 0$ et $h = 0$ et en posant $b = L$, on fait apparaître la compétition entre les deux champs d'échelle L et g :

$$\chi(0, 0, L^{-1}, g) = L^{-2x_\sigma + d} \chi(0, 0, 1, L^{y_g} g)$$

$$\underset{L^{y_g} g \ll 1}{\sim} L^{-2x_\sigma + d} \left[\chi(0, 0, 1, 0) + L^{y_g} g \left(\frac{\partial \chi(0, 0, 1, g)}{\partial g} \right)_{g=0} + \dots \right]. \quad (1.2.33)$$

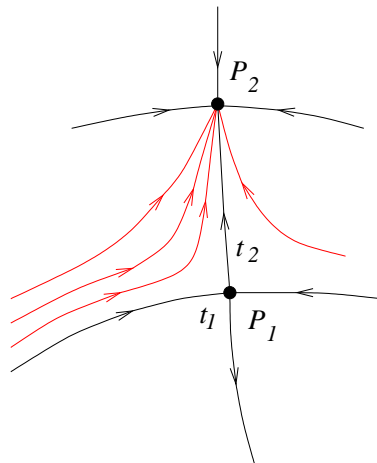


Figure 1.2.6 : Exemple de cross-over : le point représentatif du système est dans un premier temps attiré vers le point fixe P_1 sous l'effet de son champ d'échelle non-pertinent t_1 puis est entraîné par le champ pertinent t_2 vers un second point fixe P_2 . Le plan de la figure représente la surface critique, définie comme l'ensemble des points de l'espace des couplages $\{K_\alpha\}$ conduisant à une longueur de corrélation infinie.

Lorsque la taille L est suffisamment grande, le second terme du développement est négligeable devant le premier et le comportement dominant correspond à celui du point

fixe $t = h = 1/L = g = 0$. La susceptibilité se comporte alors en $L^{-2x_\sigma + d}$. En revanche, lorsque $L^{y_g} g$ est grand, le flot de renormalisation est entraîné vers un autre point fixe. La taille de “cross-over” L^* correspond à la limite de la validité du développement (1.2.33), c.à.d. à un terme $L^{y_g} g$ d’ordre 1 :

$$L^* \simeq g^{-1/y_g}. \quad (1.2.34)$$

2.3. Invariance conforme

2.3.1. Hypothèse conforme

L’hypothèse d’invariance par dilatation ($\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}/b$) au point critique, sur laquelle est fondé le groupe de renormalisation, a permis des progrès importants dans la compréhension des phénomènes critiques. La théorie conforme repose sur l’hypothèse plus générale d’une invariance par dilatation^[188] de facteur d’échelle local $b(\mathbf{r})$, c.à.d. d’une invariance par **transformation conforme**^[34, 97]. En dimension $d = 2$, le groupe des transformations conformes est isomorphe à l’ensemble des fonctions holomorphes. Il est donc naturel d’utiliser des coordonnées complexes $z = x + iy$ (et $\bar{z} = x - iy$). On suppose que la loi de transformation des fonctions de corrélation est une généralisation de (1.2.31) et s’écrit sous la forme

$$\begin{aligned} \langle \phi_1(z_1, \bar{z}_1) \phi_2(z_2, \bar{z}_2) \dots \rangle &= \left[\prod_i |w'(z_i)|^{\Delta_i} |w'(\bar{z}_i)|^{\bar{\Delta}_i} \right] \\ &\times \langle \phi_1(w(z_1), \bar{w}(\bar{z}_1)) \phi_2(w(z_2), \bar{w}(\bar{z}_2)) \dots \rangle \end{aligned} \quad (1.2.35)$$

pour une transformation conforme $z \rightarrow w(z)$ dont le facteur d’échelle local est $|w'(z)|^{-1}$ et où $x_i = \Delta_i + \bar{\Delta}_i$ est la dimension d’échelle du champ $\phi_i(z_i, \bar{z}_i)$.

2.3.2. Conséquences de l’invariance conforme

2.3.2.1. Géométrie plane

En géométrie infinie, les conditions d’invariance par translation, rotation et dilatation imposent une décroissance algébrique des fonctions de corrélation :

$$G_{\phi\phi}(z_1, \bar{z}_1, z_2, \bar{z}_2) = \langle \phi(z_1, \bar{z}_1) \phi(z_2, \bar{z}_2) \rangle \sim \frac{1}{z_{12}^{2\Delta_\phi} \bar{z}_{12}^{2\bar{\Delta}_\phi}} = \frac{1}{|z_1 - z_2|^{2x_\phi}}. \quad (1.2.36)$$

En présence d’une surface, l’absence d’invariance par translation dans la direction qui lui est perpendiculaire réduit le nombre de contraintes sur les fonctions de corrélation. On obtient un comportement de la forme^[97]

$$G_{\phi\phi}(x_1 - x_2, y_1, y_2) = (y_1 y_2)^{-x_\phi} g(\omega) \quad (1.2.37)$$

où $g(\omega)$ est une fonction d’échelle indéterminée dont le comportement asymptotique est imposé par l’invariance par dilatation :

$$g(\omega) \underset{\omega \gg 1}{\sim} \omega^{-x_\phi^1}, \quad \omega = \frac{|z_1 - z_2|^2}{y_1 y_2}. \quad (1.2.38)$$

Loin de la surface, l’expression (1.2.37) se réduit par conséquent à

$$G_{\phi\phi}(x_1 - x_2, y_1, y_2) \underset{\omega \gg 1}{\sim} (y_1 y_2)^{-(x_\phi - x_\phi^1)} |z_1 - z_2|^{2x_\phi^1}. \quad (1.2.39)$$

2.3.2.2. Géométrie cylindrique

La transformation conforme

$$w(z) = u + iv = \frac{L}{2\pi} \ln z = \frac{L}{2\pi} (\ln r + i\theta), \quad \begin{cases} r = e^{\frac{2\pi}{L}u} \\ \theta = \frac{2\pi}{L}v \end{cases} \quad (1.2.40)$$

projette le plan complexe sur le cylindre infini $(u, v) \in]-\infty; +\infty[\times [0; L]$ (figure 1.2.7). En utilisant la loi de transformation (1.2.35), on montre que les fonctions de corrélation sur le cylindre ont pour expression

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle = \frac{(2\pi/L)^{2x_\phi}}{\left[2 \cosh\left(\frac{2\pi}{L}(u_1 - u_2)\right) - 2 \cos\left(\frac{2\pi}{L}(v_1 - v_2)\right) \right]^{x_\phi}} \quad (1.2.41)$$

qui se réduit dans la direction longitudinale à une décroissance asymptotique exponentielle

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2 = v_1) \rangle \Big|_{|u_1 - u_2| \gg L} \sim \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2x_\phi} e^{-\frac{2\pi x_\phi}{L}(u_1 - u_2)}. \quad (1.2.42)$$

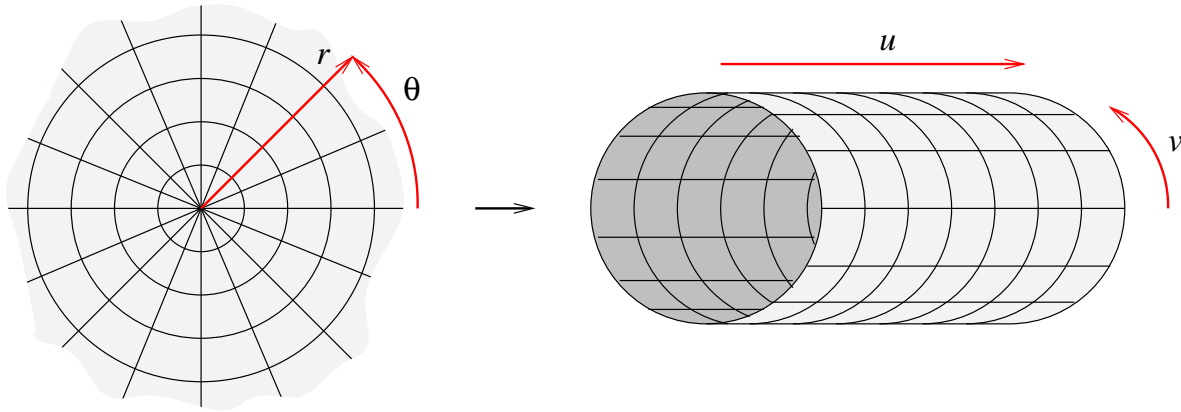


Figure 1.2.7 : Transformation conforme projetant le plan complexe (à gauche) sur un cylindre (à droite).

Il en découle une relation simple entre la longueur de corrélation ξ et la largeur L du ruban ^[33] :

$$\xi = \frac{L}{2\pi x_\phi} \quad (1.2.43)$$

appelée relation **gap-exposant** [†]. L'hypothèse d'invariance conforme permet également le calcul de la première correction de taille finie de la densité d'énergie libre ^[24] :

$$f(L) = f(\infty) - \frac{\pi c}{6L^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^4}\right). \quad (1.2.44)$$

[†] La longueur de corrélation est l'inverse de la différence ("gap") des logarithmes des deux plus grandes valeurs propres de la matrice de transfert.

La constante c appelée **charge centrale** est caractéristique de la classe d'universalité du système. Le "théorème c " de Zamolodchikov prédit qu'il existe une fonction c décroissante le long du flot de renormalisation qui s'identifie à la charge centrale au point fixe ^[237].

2.3.2.3. Géométrie carrée

La transformation conforme de **Schwartz-Christoffel** (figure 1.2.8) projette le demi-plan $\Im(z) > 0$ sur le carré défini par

$$\zeta(z) = u + iv = \frac{N}{2K(k)} F(z, k) \quad (1.2.45)$$

avec $(u, v) \in [-N/2; N/2] \times [0; N]$ et où $K(k)$ est l'intégrale elliptique complète de première espèce, $F(z, k)$ l'intégrale elliptique de première espèce et où le module k satisfait la relation ^[3]

$$k = 4 \left[\frac{\sum_{p=0}^{+\infty} e^{-2\pi(p+1/2)^2}}{1 + 2 \sum_{p=1}^{+\infty} e^{-2\pi p^2}} \right]^2. \quad (1.2.46)$$

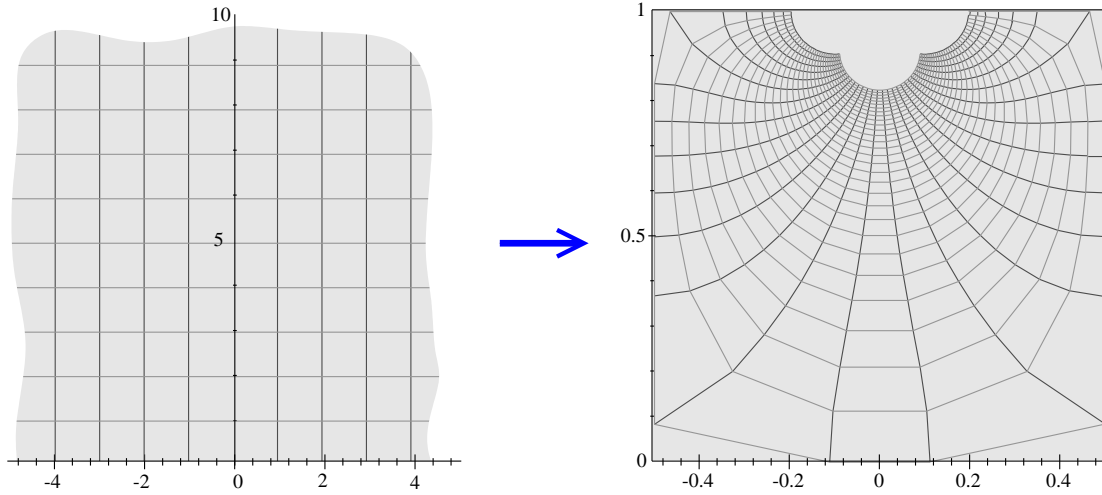


Figure 1.2.8 : Projection conforme du demi-plan $y > 0$ (à gauche) sur le carré (à droite) par la transformation de Schwartz-Christoffel.

Les points de la surface $\Im(z) = 0$ en géométrie semi-infinie sont projetés sur les quatre côtés du carré. Par définition de $F(z, k)$, l'inverse du facteur de dilatation local s'écrit

$$|\zeta'(z)| = \frac{N}{2K(k)} \frac{1}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)}} \quad (1.2.47)$$

et la transformation inverse est

$$\zeta \rightarrow z(\zeta) = \text{sn} \left[\frac{2K(k)}{N} \zeta, k \right]. \quad (1.2.48)$$

Le calcul des fonctions de corrélation en géométrie carrée est une simple application de la loi de transformation (1.2.35) avec la transformation de Schwartz-Christoffel (1.2.45) et l'expression des fonctions de corrélation en géométrie semi-infinie (1.2.37).

3. Modèle de Potts

3.1. Présentation du modèle de Potts

Par définition, les degrés de liberté $\{\sigma_i\}$ du **modèle de Potts** classique ^[189] à q états, appelés spins, peuvent prendre q valeurs distinctes et sont disposés aux nœuds d'un réseau. Leur statistique est gouvernée par l'hamiltonien :

$$-\beta\mathcal{H} = K \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + H \sum_i \delta_{\sigma_i, 0} \quad (1.3.1)$$

où K est le couplage d'échange limité aux couples de sites (i, j) premiers voisins sur le réseau et H le champ magnétique. En champ magnétique nul, l'hamiltonien et donc la distribution de probabilité des configurations de spin ne sont pas modifiés par la permutation des états de spin (symétrie Z_q). Le cas particulier $q = 2$ correspond au modèle d'Ising. Le champ magnétique brise la symétrie entre les q états de spins en favorisant l'état $\sigma_i = 0$. Un paramètre d'ordre, appelé aimantation, est donc tout naturellement

$$\langle m \rangle = \frac{q\langle\rho_0\rangle - 1}{q - 1}, \quad \rho_\sigma = \frac{1}{L^d} \sum_i \delta_{\sigma_i, \sigma} \quad (1.3.2)$$

où ρ_σ est la densité de spin dans l'état σ .

3.2. Formulation de Fortuin-Kasteleyn

3.2.1. Fonction de partition

En introduisant des variables de liaisons $\{b_{ij} = 0, 1\}$, la fonction de partition du modèle de Potts à q états peut s'écrire en l'absence de champ magnétique sous la forme ^[87] :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} [(e^K - 1) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + 1] \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} \left[\sum_{b_{ij}=0}^1 (e^K - 1) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + \delta_{b_{ij}, 0} \right]. \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

Une liaison dans l'état $b_{ij} = 1$ bloque l'état relatif des spins à ses extrémités : $\sigma_i = \sigma_j$. En revanche, dans l'état $b_{ij} = 0$, la liaison n'impose aucune contrainte aux spins σ_i et σ_j . La fonction de partition (1.3.3) se réduit après sommation sur les variables de spin à

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{b_{ij}\}} (e^K - 1)^{\sum_{ij} b_{ij}} \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{(i,j)} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} \\ &= \sum_{G=\{b_{ij}\}} (e^K - 1)^{b(G)} q^{C(G)} \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

où $b(G) = \sum_{ij} b_{ij}$ est le nombre de liaisons gelées de la configuration $G = \{b_{ij}\}$ et $C(G)$ le nombre de ses amas indépendants. Cette formulation permet la généralisation du modèle de Potts aux valeurs non-entières, voire complexes, du nombre d'états q . En posant $p = 1 - e^{-K}$, on met en évidence la relation entre le modèle de Potts et la percolation :

$$\mathcal{Z} = (1 - p)^{-N} \sum_G p^{b(G)} (1 - p)^{N-b(G)} q^{C(G)} \quad (1.3.5)$$

où N est le nombre de liaisons, gelées ou non, du réseau. Le problème de la percolation correspond à la limite $q \rightarrow 1$. Une description plus détaillée de la formulation de Fortuin-Kasteleyn est présenté au paragraphe 2.2 de l'annexe.

3.2.2. Dualité

La transformation de dualité a été introduite par Kramers et Wannier dans le cas particulier du modèle d'Ising bidimensionnel en champ magnétique nul ^[134] et a été par la suite généralisée à toutes les valeurs du nombre d'états q du modèle de Potts ^[189]. Dans la formulation de Fortuin-Kasteleyn, la transformation de dualité associe à chaque liaison non gelée ($b_{ij} = 0$) une liaison duale gelée ($b_{ij}^* = 1$). Les nombres de liaisons dans l'une et l'autre des configurations G et G^* satisfont par définition $b(G) = N - b(G^*)$. Chaque boucle fermée de liaisons duales enlace un amas de l'espace direct. Il en découle la relation entre le nombre d'amas dans une configuration de liaison G et celui dans la configuration duale G^* associée :

$$C(G^*) = C(G) + b(G) - N + 1. \quad (1.3.6)$$

La fonction de partition dans l'espace dual s'écrit par conséquent

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^* &= \sum_{G^*} (u^*)^{b(G^*)} q^{C(G^*)} \\ &= \sum_G (u^*)^{N-b(G)} q^{C(G)+b(G)-N+1} \\ &= q \left(\frac{u^*}{q} \right)^N \sum_G \left(\frac{q}{u^*} \right)^{b(G)} q^{C(G)} \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

où on a posé $u^* = e^{K^*} - 1$ pour alléger les notations. En identifiant les termes d'ordre $b(G)$ avec (1.3.4), il vient

$$u u^* = q \Leftrightarrow (e^K - 1)(e^{K^*} - 1) = q. \quad (1.3.8)$$

Le système est auto-dual sur le réseau carré donc s'il existe un point critique unique, le couplage critique est déterminé par la condition d'**auto-dualité** :

$$K_c = K_c^* = \ln(1 + \sqrt{q}). \quad (1.3.9)$$

3.3. Comportement critique

Au-delà d'une dimension critique supérieure d_c qui décroît avec q , le modèle de Potts à $q \geq 2$ états donne lieu à une transition du premier ordre de type champ moyen (figure 1.3.1). Dans l'intervalle $1 < d < d_c$, la transition est du second ordre.

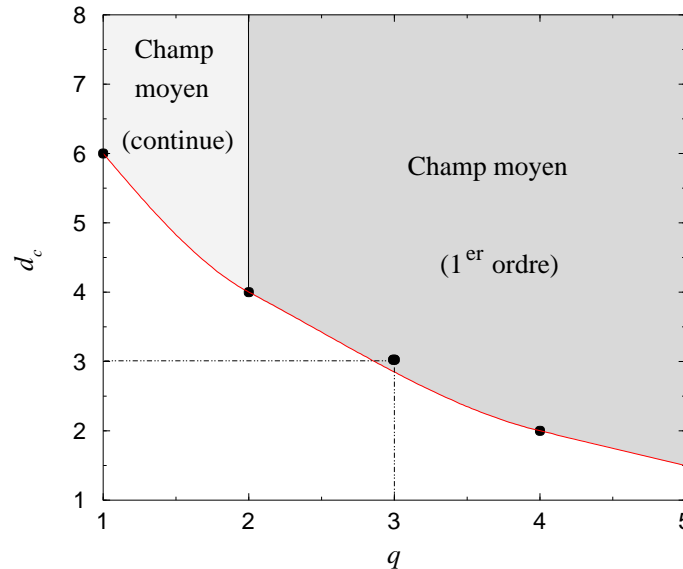


Figure 1.3.1 : Dimension critique supérieure du modèle de Potts en fonction du nombre d'états q . Les points noirs à $q = 1$, $q = 2$ et $q = 4$ marquent les dimensions critiques supérieures connues exactement. Il a été montré numériquement que la transition du modèle de Potts $q = 3$ en dimension $d = 3$ était faiblement du premier ordre ce qui signifie que $d_c(q = 3)$ est légèrement inférieure à trois.

Il n'existe de résultats exacts pour le modèle de Potts qu'en dimension $d = 2$. Le modèle d'Ising ($q = 2$) en champ magnétique nul est le premier modèle non trivial dont fut donnée une solution [177]. L'équivalence du modèle d'Ising avec un gaz de fermions libres a ouvert la voie à de nombreuses applications [202]. En présence d'un champ magnétique non nul, seules les grandeurs thermodynamiques à la température critique ont pu être calculées [238]. La théorie conforme a permis le calcul des exposants critiques dans le régime de second ordre du modèle de Potts ($q \leq 4$). En effet, il a été montré qu'une certaine classe de modèles dits **minimaux** [88], pour lesquels la théorie conforme permet le calcul des dimensions d'échelle de l'ensemble des opérateurs, pouvaient être identifiés à des modèles de Potts. Ces modèles sont caractérisés par une charge centrale

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)} \quad (1.3.10)$$

où m est un entier strictement positif. Ils appartiennent donc à des classes d'universalité différentes. Les modèles d'Ising ($c = 1/2$) et de Potts à $q = 3$ et 4 états ($c = 4/5$ et $c = 1$) correspondent par exemple à $m = 3$, $m = 5$ et $m \rightarrow +\infty$. De manière générale, le modèle minimal caractérisé par un paramètre entier $m \geq 2$ correspond au modèle de Potts dans la formulation de Fortuin-Kasteleyn dont le nombre d'états est

$$q = 4 \cos^2 \left(\frac{\pi}{m+1} \right). \quad (1.3.11)$$

En utilisant le formalisme du gaz de Coulomb ^[171], Dotsenko et Fateev ont calculé les fonctions de corrélation des modèles minimaux et extrait de leur décroissance asymptotique les exposants ^[70]

$$\nu = \frac{2m}{3(m-1)}, \quad \eta = \frac{(m+3)(m-1)}{4m(m+1)}. \quad (1.3.12)$$

Le modèle de Potts $q = 4$ présente des corrections logarithmiques causées par l'opérateur marginal associé à la fugacité des lacunes ^[172]. Le voisinage de $q = 4$ peut être sondé en utilisant le formalisme des théories des champs massives intégrables ^[59].

	$q = 2$	3	4	$q > 4$
$x_\epsilon^b = \frac{1-\alpha}{\nu}$	1	4/5	1/2	1 ^{er} ordre
$x_\sigma^b = \beta/\nu$	1/8	2/15	1/8	-
$x_\sigma^1 = \beta_1/\nu$	1/2	2/3	1	3

Tableau 1.3.1 : Exposants critiques de volume et de surface du modèle de Potts homogène à q états en dimension $d = 2$.

Dans le régime de premier ordre ($q > 4$), un certain nombre de résultats exacts sont connus à la température de transition : l'énergie interne ^[11], l'aimantation ^[12] et la longueur de corrélation ^[30]. En surface, la transition est du second ordre pour toute valeur finie de q . Les exposants critiques associés aux transitions de volume et de surface sont rassemblés dans le tableau 1.3.1 pour les valeurs entières de q .

4. Systèmes désordonnés

4.1. Modélisation du désordre

Le désordre peut être d'origine topologique (lacunes, dilution de liaison, pavage de Voronoï, ...) ou affecter la valeur des couplages sur un réseau régulier. En toute rigueur, on doit tenir compte de la redistribution des impuretés (**désordre recuit**). Les phénomènes critiques dans les systèmes recuits sont relativement bien compris. Lorsque le potentiel chimique des impuretés est maintenu constant, les propriétés critiques sont les mêmes que dans le système pur. A l'inverse, si la concentration en impuretés est maintenue constante, les exposants critiques subissent une "*renormalisation de Fisher*" lorsque la chaleur spécifique du système pur présente une singularité à la température critique ^[79]. Les propriétés critiques restent donc inchangées lorsque α est négatif. Dans un matériau ferromagnétique par exemple, le temps caractéristique des fluctuations de densité locale des impuretés est considérablement plus long que le temps de relaxation des spins ^[29]. Il est alors légitime de faire l'approximation d'un **désordre gelé**. Dans un système de taille finie, les fluctuations locales de densité d'impuretés d'une configuration à l'autre entraînent des fluctuations des grandeurs thermodynamiques. Il est donc nécessaire de moyennner les résultats sur l'ensemble des configurations de désordre.

4.2. Exemples expérimentaux

Nous présentons trois exemples de systèmes expérimentaux illustrant trois comportements possibles face à l'introduction de désordre. Les deux premiers exemples concernent des transitions continues. Dans le premier cas, la classe d'universalité n'est pas modifiée par le désordre alors qu'elle l'est dans le second. Le dernier exemple montre comment une transition du premier ordre est adoucie par le désordre au point de devenir continue.

Les couches minces de $(\text{Tb}_{0.27}\text{Dy}_{0.73})_{0.32}\text{Fe}_{0.68}$ donnent lieu à une transition ferromagnétique-paramagnétique appartenant à la classe d'universalité du modèle d'Ising bidimensionnel. Une étude récente montre que l'introduction de désordre ne modifie pas la classe d'universalité ^[167]. L'échantillon se présente sous la forme d'un ensemble de couches amorphes de 10 Å de $(\text{Tb}_{0.27}\text{Dy}_{0.73})_{0.32}\text{Fe}_{0.68}$ séparées par 100 Å de niobium, matériau non magnétique, afin de les découpler. La caractérisation par une analyse de la diffraction des rayons X et par microscopie électronique met en évidence la présence de défauts de structure distants en moyenne de quelques nanomètres. L'aimantation a été mesurée au moyen d'un SQUID (*Superconducting QUantum Interference Device*) et les exposants critiques estimés par sa dépendance avec la température et le champ magnétique appliqué. Le tableau 1.4.1 montre la compatibilité des exposants mesurés avec ceux du modèle d'Ising bidimensionnel et donc la non-pertinence du désordre pour ce système.

	Mesures	Modèle d'Ising 2d
β	0.126(20)	1/8
γ	1.75(3)	7/4
δ	15.1(10)	15

Tableau 1.4.1 : Comparaison des exposants critiques obtenus dans des multicouches magnétiques en présence d'un désordre de structure à ceux du modèle d'Ising bidimensionnel.

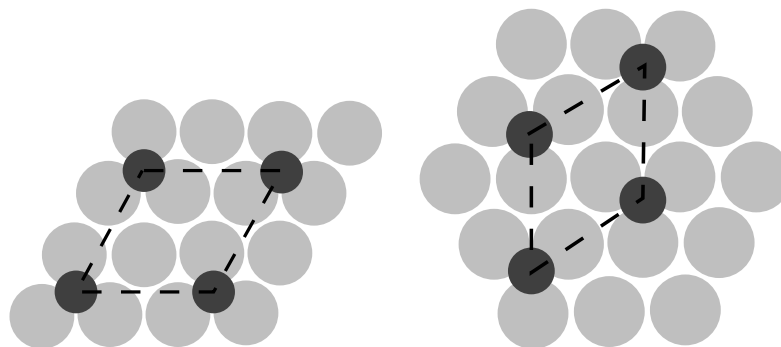


Figure 1.4.1 : Disposition des atomes adsorbés (gris foncé) dans une structure $p(2 \times 2)$ (à gauche) et $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ (à droite).

Contrairement au cas de la transition ferromagnétique-paramagnétique des couches minces de $(\text{Tb}_{0.27}\text{Dy}_{0.73})_{0.32}\text{Fe}_{0.68}$, la classe d'universalité d'une transition continue

est parfois modifiée lors de l'introduction du désordre. Cette situation a été observée pour la transition ordre-désordre de l'hydrogène atomique adsorbé sur la surface (111) du nickel. En l'absence de désordre, la transition ordre-désordre sépare une phase désordonnée d'une phase ordonnée dans laquelle l'arrangement de l'hydrogène se fait suivant la structure $p(2 \times 2)$ ou $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ (figure 1.4.1) selon la concentration en hydrogène adsorbé. La transition est continue et appartient à la classe d'universalité du modèle de Potts à $q = 4$ états dans le cas $p(2 \times 2)$ et à $q = 3$ états pour la structure $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ [221]. Ce système a été étudié par diffraction d'électrons lents (*Low Energy Electron Diffraction*). La dépendance de l'intensité diffractée $I(\mathbf{q})$ avec le vecteur de diffusion \mathbf{q} est une lorentzienne d'amplitude égale à la susceptibilité χ et de largeur donnée par l'inverse de la longueur de corrélation ξ :

$$\frac{I(\mathbf{q})}{I_0} = \langle m^2 \rangle \delta(\mathbf{q}) + \frac{\chi}{1 + \xi^2 q^2}. \quad (1.4.1)$$

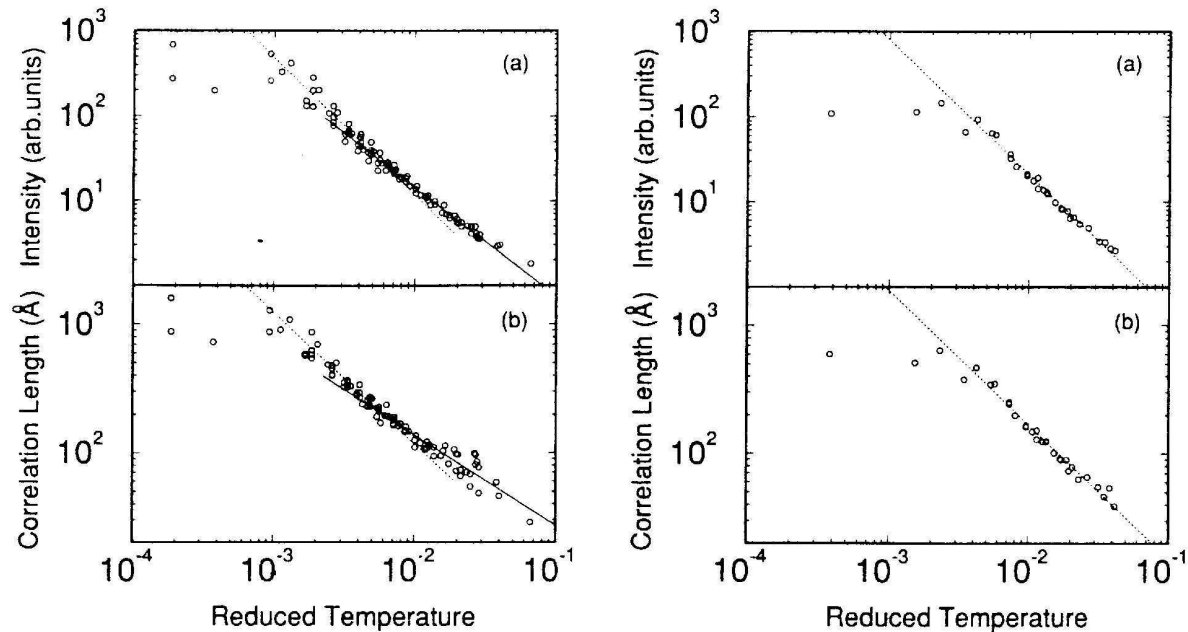


Figure 1.4.2 : Intensité LEED diffusée (a) et longueur de corrélation (b) en fonction de la température réduite $t = |T - T_c|$ lors de la transition ordre-désordre de l'hydrogène adsorbé sur le nickel dans le cas d'un système pur (à gauche) et en présence de 3% d'impuretés d'oxygène (à droite). Les pentes des droites représentées correspondent aux exposants donnés dans le tableau 1.4.2. La figure a été extraite de la référence [203].

L'intensité moyenne est proportionnelle au carré $\langle m^2 \rangle$ du paramètre d'ordre. Une étude en température donne accès aux trois exposants critiques β, γ et ν (figure 1.4.2). L'estimation est toutefois rendue difficile par la nécessité d'éliminer le bruit de fond, de procéder à une déconvolution de la fonction de réponse de l'appareillage et d'estimer le terme correctif de Debye-Waller. Les exposants critiques γ et ν obtenus par Schwenger *et al.* dans le régime de concentration où la structure est $p(2 \times 2)$ sont compatibles avec ceux du modèle de Potts $q = 4$ [203] (tableau 1.4.2). Schwenger *et al.* ont également

déterminé les exposants critiques après introduction dans le système de désordre sous la forme d'impuretés d'oxygène chimisorbées sur la surface de nickel et dont la position est gelée par l'importante énergie de liaison O – Ni. Les exposants expérimentaux montrent une modification de la classe d'universalité de celle du modèle de Potts $q = 4$ vers celle d'Ising sous l'influence du désordre (tableau 1.4.2) [†].

	Système pur	Système avec impuretés	Potts $q = 4$	Modèle d'Ising
β	0.11(1)	0.135(10)	$1/12 \simeq 0.083$	0.125
γ	1.2(1)	1.68(15)	$7/6 \simeq 1.167$	1.75
ν	0.68(5)	1.03(8)	$2/3 \simeq 0.667$	1

Tableau 1.4.2 : Comparaison des estimations des exposants critiques de la transition ordre-désordre de l'hydrogène adsorbé sur la surface (111) du nickel dans le cas pur et en présence d'impuretés d'oxygène avec les exposants du modèle d'Ising et de Potts à $q = 4$ états.

Dans le cas où le système homogène présente une transition du premier ordre, le désordre provoque un adoucissement de la transition qui peut aller jusqu'à un effacement complet des discontinuités et donc à un passage à une transition continue. Une telle modification de l'ordre de la transition a été observée par exemple pour la transition nématique-isotrope du cristal liquide $4' - n - \text{octyl} - 4 - \text{cyanobiphényle}$ (8CB). Dans le cas homogène, la transition est faiblement du premier ordre avec une longueur de corrélation à la température de transition de l'ordre de $\xi \simeq 200 \text{ \AA}$. Le désordre est introduit en saturant les pores d'un aérogel de silice. Ce sont des solides hautement poreux élaborés par agrégation et déshydratation de particules de silice en suspension. Les pores forment un volume connexe. Les surfaces de l'aérogel fixent localement l'orientation et la position des molécules de cristaux liquides de sorte que l'on s'attend à une perturbation de type anisotropie uniaxiale aléatoire. La transition a été étudiée par diffusion de lumière polarisée ^[232]. La partie dépolarisée de la lumière diffusée témoigne de la présence de fluctuations nématiques et joue le rôle de paramètre d'ordre. Il apparaît clairement un adoucissement de la transition dans l'aérogel. Une observation avec un microscope optique polarisant n'a pas permis d'observer la texture caractéristique des fluctuations nématiques à la température de transition. Le cristal liquide présente un aspect laiteux similaire à l'opalescence critique d'un liquide binaire au point critique. De plus, aucun effet d'hystérésis ou de métastabilité n'a été observé. La mesure de la chaleur spécifique par calorimétrie montre la disparition complète du pic de chaleur spécifique ^[13]. Le même comportement a été observé dans un verre Vycor pour un autre cristal liquide ($4' - n - \text{pentyl} - 4 - \text{cyanobiphényle}$ ou 5CB) appartenant à la même famille que 8CB ^[102]. La figure 1.4.3 tirée de la référence [102] et présentant la dépendance avec la température de la chaleur spécifique montre clairement l'adoucissement de la transition dans le verre Vycor. La chaleur spécifique croît linéairement au voisinage de

[†] Cette conclusion fut proposée par les auteurs. En fait, les résultats expérimentaux présentent un meilleur accord avec les valeurs numériques obtenues pour la classe d'universalité du modèle de Potts $q = 4$ désordonné que nous étudierons par la suite.

la transition et la présence d'une singularité se manifeste par un changement de pente à la température de transition.

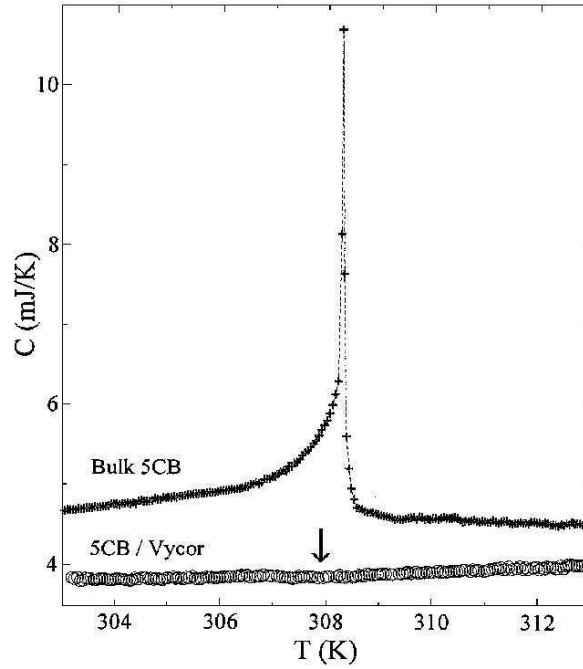


Figure 1.4.3 : Chaleur spécifique C du cristal liquide 5CB en fonction de la température T en volume (“Bulk”) et dans un aérogel (“Vycor”).

4.3. Critères de pertinence

4.3.1. Transitions du second ordre

Toute modification locale des interactions entre les degrés de liberté du système conduit à une variation des grandeurs thermodynamiques et à un déplacement de la température de transition. Toutefois, le comportement critique n'est modifié que si le désordre est une perturbation pertinente au point fixe du système pur. Cet argument a été développé par Harris ^[94].

Considérons le système dont la statistique des degrés de liberté $\phi(\mathbf{r})$ est gouvernée par un hamiltonien $\mathcal{H}_0[\phi]$. En couplant la densité locale d'énergie $\epsilon(\mathbf{r})$ à une source de désordre $m(\mathbf{r})$, l'énergie libre du système s'écrit

$$F = \ln \left[\int \mathcal{D}[\phi(\mathbf{r})] e^{-\beta \mathcal{H}_0[\phi] - \int d^d \mathbf{r} m(\mathbf{r}) \epsilon(\mathbf{r})} \right] \quad (1.4.2)$$

ce qui conduit dans la limite d'un faible désordre à :

$$\begin{aligned} F &\simeq \ln \left[\int \mathcal{D}[\phi(\mathbf{r})] e^{-\beta \mathcal{H}_0[\phi]} \left(1 - \int d^d \mathbf{r} m(\mathbf{r}) \epsilon(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') \epsilon(\mathbf{r}) \epsilon(\mathbf{r}') \right) \right] \\ &\simeq F_0 - \int d^d \mathbf{r} \overline{m(\mathbf{r})} \langle \epsilon(\mathbf{r}) \rangle_0 \\ &\quad + \frac{1}{2} \iint d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' \overline{m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}')} [\langle \epsilon(\mathbf{r}) \epsilon(\mathbf{r}') \rangle_0 - \langle \epsilon(\mathbf{r}) \rangle_0 \langle \epsilon(\mathbf{r}') \rangle_0] \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

où $\langle \dots \rangle_0$ représente la moyenne thermodynamique en l'absence de désordre au point fixe homogène et $\overline{(\dots)}$ la moyenne sur le désordre. Le second terme du développement induit un déplacement de la température critique. Pour un désordre dont les corrélations décroissent algébriquement avec un exposant ρ , c.à.d. de la forme

$$\overline{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}) \sim g_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-\rho}, \quad (1.4.4)$$

la dernière intégrale

$$\iint d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' \overline{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}) [\langle \epsilon(\mathbf{r})\epsilon(\mathbf{r}') \rangle_0 - \langle \epsilon(\mathbf{r}) \rangle_0 \langle \epsilon(\mathbf{r}') \rangle_0] \sim \iint \frac{d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{\rho+2x_\epsilon}} \quad (1.4.5)$$

est divergente si

$$\rho + 2x_\epsilon < 2d \Leftrightarrow \rho < 2/\nu. \quad (1.4.6)$$

Pour un désordre non corrélé $\overline{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}) \sim \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, le dernier terme de (1.4.3) se comporte comme

$$\iint d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' \frac{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2x_\epsilon}} \quad (1.4.7)$$

et donc le désordre est pertinent si

$$2x_\epsilon < d \Leftrightarrow \nu d < 2. \quad (1.4.8)$$

En utilisant la relation d'“hyperscaling”, on montre que l'exposant de cross-over est l'exposant α de la chaleur spécifique du système pur [†]. Lorsque α est nul, il faut pousser le développement de l'énergie libre aux ordres suivants pour conclure quant à la pertinence du désordre. C'est le cas par exemple du modèle d'Ising bidimensionnel.

Le critère de Harris a été testé et redémontré de diverses manières, notamment en utilisant la méthode des répliques ^[75]. Chayes *et al.* ont montré que l'exposant ν de la longueur de corrélation ξ au point fixe d'un système désordonné possédait une borne inférieure ^[48]

$$\nu \geq 2/d. \quad (1.4.9)$$

Cette inégalité peut s'écrire $\alpha \leq 0$ si l'on suppose la relation d'hyperscaling valide au point fixe désordonné, ce qui établit une relation entre la stabilité du point fixe désordonné et l'exposant α qui lui est associé. Ce résultat a été établi de manière exacte pour l'exposant de toute longueur caractéristique divergente associée à un événement exponentiellement peu probable dans un système de taille finie. Il a été par la suite suggéré que cette borne inférieure de l'exposant ν était la conséquence d'une moyenne sur un désordre de type grand-canonique ^[182] pour lequel existent des fluctuations en $L^{-d/2}$ de la concentration en impuretés et donc de toutes les grandeurs thermodynamiques. Toutefois, il a été récemment prouvé au moyen de calculs du groupe de renormalisation que la perturbation induite par la contrainte canonique d'une concentration fixée d'impuretés était non pertinente au point fixe désordonné ^[4]. La classe d'universalité est la même que le désordre soit canonique ou grand-canonique et le point fixe désordonné est stable avec un exposant $\alpha < 0$.

[†] Dans le cas d'un champ magnétique aléatoire, le rôle d'exposant de cross-over est joué par $\gamma > 0$ et donc ce type de désordre est toujours pertinent.

4.3.2. Transitions du premier ordre

Les hypothèses du critère de Harris réduisent son domaine de validité aux transitions de phase continues. La question de l'influence du désordre sur les transitions du premier ordre n'a suscité que peu d'intérêt jusqu'à ce que Imry et Wortis évoquent la possibilité d'une modification de l'ordre de la transition ^[109].

Le mécanisme proposé repose sur l'hypothèse que les configurations typiques du système présentent des amas corrélés de diamètre caractéristique ξ qui, comme dans le système homogène, reste fini à toute température. Les fluctuations locales liées au désordre induisent un déplacement de la température de transition variant d'un amas à l'autre. Le passage d'un amas de la phase désordonnée vers la phase ordonnée est contrôlé par la compétition entre le gain d'énergie en volume lors de la transition et la perte d'énergie de surface accompagnant la création d'interfaces avec les amas voisins. Un amas reste dans la phase désordonnée tant que

$$\xi^d [f_{\text{Ordre}}(T_t^{\text{locale}}) - f_{\text{Désordre}}(T_t^{\text{locale}})] < \mathcal{C} \cdot \sigma_{o,d} \xi^{d-1} \quad (1.4.10)$$

où $\sigma_{o,d}$ est la tension superficielle ordre-désordre et \mathcal{C} une constante. La dispersion des températures de transition de chaque amas se traduit dans la limite thermodynamique par un adoucissement qui, si le désordre est suffisamment fort, peut rendre la courbe d'aimantation continue (figure 1.4.4). S'appuyant sur des résultats du groupe de renormalisation, Hui et Berker proposèrent un mécanisme similaire à celui d'un champ aléatoire lors de l'introduction d'un désordre de liaison dans un système présentant un point multicritique ^[101]. En dimension $d = 2$, ils montrèrent que le modèle de Potts désordonné devait présenter une transition continue pour toute valeur finie de q . Le résultat de Hui et Berker a été démontré de manière rigoureuse par Aizenman et Wehr ^[5]. Ils prouvèrent également qu'une quantité infinitésimale de désordre suffit à effacer toute discontinuité des grandeurs thermodynamiques en dimension $d = 2$.

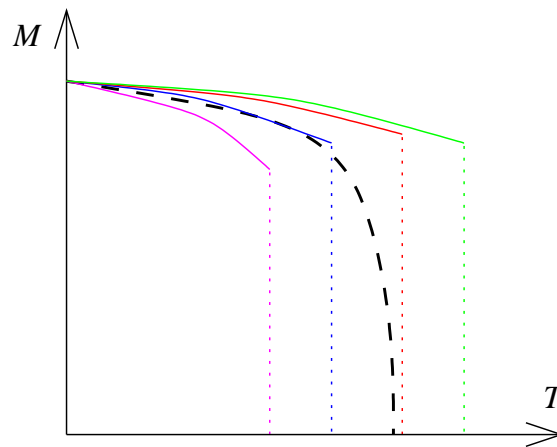


Figure 1.4.4 : Courbes d'aimantation en fonction de la température pour quatre amas d'un système désordonné présentant dans le cas pur une transition du premier ordre (niveaux de gris). La courbe pointillée noire correspond au résultat possible dans la limite thermodynamique.

4.4. Symétrie des répliques

Dans le cas d'un système pur, le groupe de renormalisation permet de tenir compte de l'influence de fluctuations thermiques au voisinage d'un unique état fondamental, spatialement homogène. Pour un système désordonné, on trouve dans une région dominée par le désordre, un nombre macroscopique d'états fondamentaux inhomogènes correspondants aux minima locaux du paysage énergétique ^[71]. Le système présente une phase de Griffiths dont la statistique découle d'un hamiltonien pour lequel la symétrie des répliques est brisée et conduit à un comportement critique différent de celui obtenu en conservant l'image d'un unique état fondamental (symétrie des répliques).

L'introduction de répliques du système est un artifice mathématique utilisé afin de remplacer la moyenne d'un logarithme par celle de p répliques identiques d'un même système :

$$F = -\overline{\ln Z} = -\lim_{p \rightarrow 0} \frac{1}{p} [\overline{Z^p} - 1]. \quad (1.4.11)$$

La moyenne sur le désordre couple entre elles les répliques. Ainsi, pour un système couplé par sa densité d'énergie $\epsilon(\mathbf{r})$ à une source de désordre $m(\mathbf{r})$ non corrélé de site en site, c.à.d. $\overline{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')} = m^2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, il vient

$$\begin{aligned} \overline{Z^p} &= \overline{\int \mathcal{D}[\phi_1(\mathbf{r})] \dots \int \mathcal{D}[\phi_p(\mathbf{r})] e^{-\sum_{\alpha=1}^p (H_0[\phi_\alpha] + \sum_{\mathbf{r}} m(\mathbf{r})\epsilon_\alpha(\mathbf{r}))}} \\ &= \int \mathcal{D}[\phi_1(\mathbf{r})] \dots \int \mathcal{D}[\phi_p(\mathbf{r})] e^{-\sum_{\alpha=1}^p H_0[\phi_\alpha]} \prod_{\mathbf{r}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!} \overline{m^s} \left(\sum_{\alpha=1}^p \epsilon_\alpha(\mathbf{r}) \right)^s \\ &\simeq \int \mathcal{D}[\phi_1(\mathbf{r})] \dots \int \mathcal{D}[\phi_p(\mathbf{r})] e^{-\sum_{\alpha=1}^p H_0[\phi_\alpha]} \\ &\quad \times e^{-\sum_{\mathbf{r}} [\overline{m} \sum_{\alpha=1}^p \epsilon_\alpha(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}(\overline{m^2} - \overline{m}^2) \sum_{\alpha, \beta=1}^p \epsilon_\alpha(\mathbf{r})\epsilon_\beta(\mathbf{r}) + \dots]} \end{aligned} \quad (1.4.12)$$

Le dernier terme fait apparaître une interaction entre les deux répliques α et β dont le couplage est constant et égal à la variance de $m(\mathbf{r})$. Les termes d'ordre supérieur sont non pertinents. Tous les termes de l'hamiltonien sont invariants sous l'action des transformations du groupe des permutations des répliques. On parle de **symétrie des répliques**. Il a été observé pour le modèle XY sous champ aléatoire en dimension $d = 2$ ^[136] et pour le modèle en ϕ^4 à plus d'une composante ^[71] que le point fixe avec symétrie des répliques était instable et que la physique était gouvernée par un point fixe stable pour lequel l'hamiltonien n'est plus invariant par permutation des répliques. On parle dans cette situation de **brisure spontanée de la symétrie des répliques**. La renormalisation de la théorie doit donc se faire avec le couplage entre répliques le plus général possible, c.à.d. de la forme

$$\sum_{\alpha, \beta=1}^p g_{\alpha\beta} \epsilon_\alpha(\mathbf{r}) \epsilon_\beta(\mathbf{r}). \quad (1.4.13)$$

4.5. Auto-moyennance et multifractalité

4.5.1. Quantités auto-moyennantes

Le calcul de toute grandeur thermodynamique ϕ associée à un système désordonné nécessite une moyenne sur l'ensemble des configurations de désordre. On peut donc définir une distribution de probabilité

$$\wp(\phi) = \overline{\delta\left(\phi - \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\varphi \phi[\varphi] e^{-\beta\mathcal{H}[\varphi]}\right)}, \quad (1.4.14)$$

correspondant à la probabilité de mesurer expérimentalement la valeur ϕ . Si on fait l'hypothèse que des mesures sur des configurations de désordre différentes ne sont pas corrélées, la distribution de probabilité $\wp(\phi)$ est gaussienne d'après le théorème de la limite centrale. Dans la limite thermodynamique, cette distribution de probabilité tend vers un pic de plus en plus prononcé

$$\wp(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(\phi-\bar{\phi})^2/2\sigma^2} \xrightarrow{L \rightarrow +\infty} \delta(\phi - \bar{\phi}). \quad (1.4.15)$$

La probabilité de l'événement moyen $\bar{\phi}$ tend vers 1 dans la limite thermodynamique et l'écart quadratique réduit

$$R_\phi = \frac{\overline{\phi^2} - \bar{\phi}^2}{\bar{\phi}^2} \xrightarrow{L \rightarrow +\infty} 0 \quad (1.4.16)$$

s'annule. Les quantités ϕ pour lesquelles on observe ce type de comportement sont dites **auto-moyennantes**.

4.5.2. L'exemple de la chaîne d'Ising désordonnée

Le cas particulier de la distribution de probabilité gaussienne (1.4.15) assure que l'événement le plus probable (**événement typique**) est également l'événement moyen. Cela n'est plus vrai dans le cas général comme par exemple pour la chaîne d'Ising désordonnée.

Les propriétés thermodynamiques de la chaîne d'Ising désordonnée, définie par l'hamiltonien

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_i K_i \sigma_i \sigma_{i+1}, \quad (\sigma_i \in \{-1; +1\}) \quad (1.4.17)$$

peuvent être calculées de manière exacte. Ainsi, la fonction de corrélation spin-spin pour une distribution particulière $\{K_i\}$ de couplages d'échange s'écrit simplement comme

$$\langle G_{\sigma\sigma}(i, j) \rangle = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \prod_{k=i}^{j-1} \tanh K_k. \quad (1.4.18)$$

Si les couplages d'échange sur des sites différents ne sont pas corrélés et si la moyenne et la variance de $\ln \tanh K_i$ sont finies, le théorème de la limite centrale s'applique à

$\ln\langle G_{\sigma\sigma}(i, j) \rangle$ et sa distribution de probabilité est par conséquent gaussienne dans la limite thermodynamique :

$$\wp(x = \ln\langle \sigma_i \sigma_j \rangle) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{[x - |j-i| \overline{\ln \tanh K_k}]^2}{2\sigma^2}}. \quad (1.4.19)$$

La fonction de corrélation typique définie comme la valeur associée au maximum de la distribution de probabilité est différente de la valeur moyenne ^[61] :

$$\begin{cases} G_{\sigma\sigma}^{\text{typique}}(i, j) = e^{|j-i| \overline{\ln \tanh K_k}} \\ \overline{\langle G_{\sigma\sigma}(i, j) \rangle} = \int dx e^x \wp(x) = \overline{\tanh K_k}^{|j-i|} \underset{|j-i| \gg 1}{\gg} G_{\sigma\sigma}^{\text{typique}}(i, j) \end{cases} \quad (1.4.20)$$

Lorsque $|j - i| \gg 1$, la principale contribution à $\overline{G_{\sigma\sigma}(i, j)}$ provient d'**événements rares** correspondant à des configurations dont les couplages entre les sites i et j sont tous grands ($K_k \gg 1$).

4.5.3. Universalité de R_ϕ au point fixe désordonné

Aharony, Harris et Wiseman ^[4] ont montré que lorsque le point fixe désordonné est stable, la distribution de la variable ϕ possède des cumulants réduits d'ordre deux R_ϕ non nuls et dont la valeur est universelle dans la limite thermodynamique. Cette universalité a été confirmée par des simulations Monte Carlo qui montrent des valeurs de R_m (cumulant réduit d'ordre deux de l'aimantation) et R_χ (cumulant réduit de la susceptibilité) identiques pour des concentrations d'impuretés différentes ^[229]. Aharony, Harris et Wiseman ^[4] ont également calculé la dépendance des cumulants réduits d'ordre deux avec la taille L du système :

$$R_\phi(L) \underset{L \gg 1}{\sim} R_\phi(\infty) + \mathcal{A} L^{(\alpha/\nu)^{\text{des}}}. \quad (1.4.21)$$

où les exposants sont ceux du point fixe désordonné et $R_\phi(\infty) \neq 0$. Lorsque le point fixe homogène est stable, c.à.d. lorsque $\alpha < 0$ d'après le critère de Harris, les grandeurs thermodynamiques sont auto-moyennantes avec des cumulants réduits d'ordre deux s'annulant suivant la loi :

$$R_\phi(L) \underset{L \gg 1}{\sim} L^{\alpha/\nu} \quad (1.4.22)$$

où les exposants critiques sont ici ceux du système pur et où l'amplitude dépend du type de désordre. La lente décroissance de R_ϕ a valu à cette situation la dénomination d'**auto-moyennance faible** ("weak self-averaging"). Hors du point critique ($1 \ll \xi \ll L$), les grandeurs thermodynamiques sont en toute circonstance auto-moyennantes avec des cumulants réduits d'ordre deux asymptotiquement nuls :

$$R_\phi \underset{L \gg 1}{\sim} L^{-d}. \quad (1.4.23)$$

4.5.4. Spectre multifractal

La distribution de probabilité d'une grandeur ϕ auto-moyennante étant gaussienne, ses moments sont donnés par la relation :

$$\begin{aligned} \overline{\phi^n} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi \phi^n e^{-(\phi-\bar{\phi})^2/2\sigma^2} \\ &= \overline{\phi^{n-1}} \cdot \bar{\phi} + \sigma^2 \overline{\phi^{n-2}} \xrightarrow{L \rightarrow +\infty} \overline{\phi^{n-1}} \cdot \bar{\phi}, \quad (n > 1). \end{aligned} \quad (1.4.24)$$

Par conséquent, la dimension d'échelle $x_\phi(n)$ de $\overline{\phi^n}^{1/n}$ vérifie la relation

$$nx_\phi(n) = x_\phi(1) + (n-1)x_\phi(n-1) \Leftrightarrow x_\phi(n) = x_\phi(1) = x_\phi \quad (1.4.25)$$

et est donc indépendante de n . La dimension d'échelle de l'événement typique est notée $x_\phi(0)$ et est dans le cas d'une quantité auto-moyennante égale à x_ϕ , puisque l'événement moyen est aussi le plus probable.

Dans le cas général, la dimension d'échelle $x_\phi(n)$ dépend de n . On parle alors de comportement d'échelle multiple ("multi-scaling"). Les corrélations entre configurations de désordre ne peuvent subsister dans la limite thermodynamique que si le système est fortement corrélé. Hors du point critique, la distribution de probabilité de toute grandeur thermodynamique est gaussienne et le comportement d'échelle multiple disparaît.

Chapitre 2

PERTURBATIONS UNIDIMENSIONNELLES

1. Introduction

Nous présentons une étude du modèle de Potts bidimensionnel perturbé par une modulation unidimensionnelle des couplages d'échange. La figure 2.1.1 présente schématiquement la structure en couches du système. La distribution des couplages horizontaux et verticaux est soit aléatoire soit déterministe. Nous nous sommes limité à des distributions binaires. L'intérêt principal de ce type de système réside dans la possibilité de construire une matrice de transfert dans la direction d'invariance et d'utiliser l'hamiltonien quantique associé, ce qui a permis d'obtenir de nombreux résultats analytiques ou numériquement exacts pour le modèle d'Ising. En revanche, le modèle de Potts n'a été jusqu'à maintenant que très peu étudié.

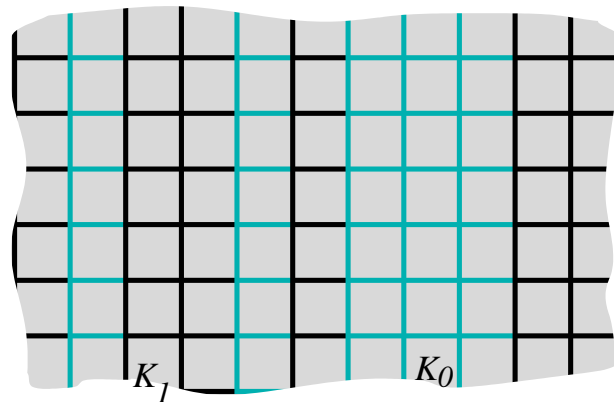


Figure 2.1.1 : Structure en couche d'un système de spins sur réseau.

Dans la première partie de ce chapitre, il sera question de l'influence sur les propriétés critiques du modèle de Potts d'une distribution aléatoire des couplages d'échange. Nous avons considéré plusieurs valeurs du nombre d'états q dans le régime

du second ordre du système pur ($q = 2, 3$ et 4) mais aussi dans celui du premier ordre ($q = 6$). Nous verrons que la super-universalité qui avait été proposée à tort pour plusieurs modèles, dont celui de Potts en présence de désordre homogène, est cette fois valide dans le cas d’un désordre corrélé ^[40]. Dans la seconde partie du chapitre, il sera question du modèle de Potts à $q = 8$ états perturbé par une modulation aperiodique des couplages d’échange d’une couche à la suivante ^[16, 46, 47]. Ce type de perturbation présente l’intérêt de laisser le contrôle de la divergence des fluctuations géométriques qui conditionnent la pertinence. L’objectif est ici de tester l’éventualité de transitions du second ordre induites par les fluctuations aperiodiques sans pour autant prétendre à en déterminer la classe d’universalité de manière précise. Une étude rigoureuse des propriétés critiques nécessiterait la prise en compte de la probable anisotropie du système et la détermination de l’exposant d’anisotropie z , ce que les simulations Monte Carlo ne permettent pas.

2. Désordre de type “McCoy-Wu”

2.1. Introduction bibliographique

2.1.1. Modèle de McCoy-Wu

Le modèle considéré par McCoy et Wu consiste en un modèle d’Ising dont les couplages d’échange sont tous identiques sur une même rangée et varient de manière aléatoire d’une rangée à la suivante ^[160]. McCoy et Wu ont calculé la dépendance exacte en température de l’énergie libre dans la limite thermodynamique et donc de fait toutes les propriétés thermiques du système. La transition est d’ordre infini comme le montre la chaleur spécifique qui est infiniment différentiable au point critique, signature d’une singularité essentielle ^[160, 159]. McCoy et Wu ont également étudié les fonctions de corrélation spin-spin dont ils ont notamment mis en évidence le caractère non auto-moyennant ^[161]. McCoy a étendu le calcul aux fonctions de corrélation spin-spin le long d’une surface ^[158], qui donnent accès à l’exposant magnétique de surface $\beta_1 = 1/2$. Il a été montré que le modèle de McCoy-Wu présentait une **phase de Griffiths** dans laquelle la dépendance de l’aimantation avec le champ magnétique est, par définition, partout non analytique ^[91].

L’étude des propriétés critiques du modèle de McCoy-Wu a été menée par Fisher ^[81, 82] qui, tirant profit de l’équivalence du système avec une chaîne quantique de spin $1/2$ sous champ magnétique transverse aléatoire, a appliqué la technique de renormalisation de Dasgupta et Ma ^[56]. La structure en couches du système induit une forte anisotropie qui, au point critique, est caractérisée par un exposant d’anisotropie z infini. Les exposants critiques associés aux grandeurs moyennes prennent les valeurs :

$$\beta = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}, \quad \nu = 2. \quad (2.2.1)$$

Fisher a également calculé la décroissance asymptotique des fonctions de corrélation spin-spin moyenne $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(r) \rangle}$ et typique $G_{\sigma\sigma}^{\text{typique}}(r)$ au point critique dans la direction transverse :

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(r) \rangle} \sim r^{-2\beta/\nu}, \quad G_{\sigma\sigma}^{\text{typique}}(r) \sim e^{-\sqrt{r}} \quad (2.2.2)$$

ainsi que l'expression des fonctions d'échelle $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(r/\xi) \rangle}$ et $G_{\sigma\sigma}^{\text{typique}}(r/\xi^{\text{typique}})$. Les fonctions de corrélation de la densité d'énergie avaient été auparavant calculées par Shankar et Murthy ^[211] qui ont montré que la longueur de corrélation typique ξ^{typique} diverge avec un exposant $\tilde{\nu} = 1$.

Les résultats de Fisher ont été vérifiés numériquement par des méthodes de diagonalisation exacte mettant à profit l'équivalence du système avec un modèle de fermions sans interaction ^[236] et par diagonalisation approchée (DMRG) ^[123]. Une démonstration exacte de la valeur $\nu = 2$ basée sur le calcul de β_1/ν a été proposée par Iglói et Rieger, qui ont montré que le calcul de l'aimantation de surface pouvait se réduire à celui de la probabilité de survie d'un marcheur aléatoire en présence d'une surface absorbante ^[106]. La décroissance asymptotique des fonctions de corrélation spin-spin $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(t) \rangle}$ dans la direction longitudinale (aussi appelées fonctions d'auto-corrélation dans la formulation quantique du problème) a été prédite sur la base d'arguments d'échelle et étudiée numériquement ^[197]. Alors que les configurations typiques induisent une décroissance rapide de ces fonctions de corrélation, la contribution dominante provient de configurations rares qui conduisent à

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(t) \rangle} \sim (\ln t)^{-2x_{\sigma}^b}. \quad (2.2.3)$$

Bien que les configurations de désordre, prises indépendamment, ne soient pas invariantes par transformation conforme et que le système présente une forte anisotropie, les profils de la densité d'aimantation pour diverses conditions aux limites semblent pouvoir être interpolés avec l'expression correspondante prédite par l'invariance conforme sans que le recours à d'éventuels termes correctifs soit nécessaire ^[105, 106].

2.1.2. Stabilité de la classe d'universalité

La technique de renormalisation dans l'espace direct appliquée par Fisher à la chaîne d'Ising en champ transverse aléatoire a été généralisée à la version quantique du modèle de Potts par Senthil et Majumdar ^[206]. Il apparaît que les équations de flot ne dépendent pas du nombre d'états q . Senthil et Majumdar concluent donc à un comportement critique unique pour toute valeur finie de q , la dépendance en q n'intervenant que dans des constantes non-universelles. Il faut noter que dans le régime du second ordre induit par le désordre ($q > 4$), ce résultat n'est qu'une conjecture.

La chaîne quantique de spin 1/2 gouvernée par un hamiltonien désordonné de type XY anisotrope

$$H = - \sum_{\ell=1}^L [J^x \sigma_{\ell}^x \sigma_{\ell+1}^x + J^y \sigma_{\ell}^y \sigma_{\ell+1}^y + h \sigma_{\ell}^z], \quad \gamma = \frac{J_{\ell}^x - J_{\ell}^y}{J_{\ell}^x + J_{\ell}^y} \quad (2.2.4)$$

a été étudiée récemment de manière exacte dans la limite continue du système de fermions correspondant ^[162, 31]. Le système homogène donne lieu à une transition d'anisotropie séparant deux phases ferromagnétiques lorsque le facteur d'anisotropie s'annule et une transition ferromagnétique-paramagnétique de type Ising lorsque $h = J_x + J_y$. En présence de désordre, la transition de type Ising appartient à la classe d'universalité de la chaîne quantique de spin 1/2 en champ transverse aléatoire étudiée par Fisher. Si le désordre ne porte que sur l'anisotropie γ , la transition d'anisotropie

appartient également à cette classe d’universalité. L’exposant critique magnétique et la décroissance asymptotique des fonctions de corrélation spin-spin prédits par Fisher ont été vérifiés numériquement par DMRG ^[124].

2.2. Propriétés critiques de la chaîne de Potts désordonnée

2.2.1. Présentation du modèle et détails des calculs

Nous nous sommes intéressé, non pas à la chaîne quantique de Potts désordonnée, mais au système classique bidimensionnel avec un désordre corrélé dans une direction qui lui est équivalent. La statistique du système est définie par l’hamiltonien

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{i=1}^L K_i \sum_j [\delta_{\sigma_{i,j},\sigma_{i+1,j}} + \delta_{\sigma_{i,j},\sigma_{i,j+1}}] \quad (2.2.5)$$

où les spins $\sigma_{i,j}$ peuvent prendre q valeurs. L’efficacité de l’algorithme diminuant à mesure qu’augmente le nombre d’états q , nous nous sommes limité aux valeurs $q = 2, 3, 4$ et 6 qui couvrent à la fois le régime de second ordre ($q \leq 4$) et celui supposé de second ordre induit par le désordre ($q > 4$). Les couplages $\{K_i\}_{i=1\dots L}$ apparaissant dans l’hamiltonien (2.2.5) sont distribués de manière aléatoire suivant la distribution de probabilité binaire

$$\wp(K_i) = \frac{1}{2} [\delta(K_i - K_1) + \delta(K_i - K_2)]. \quad (2.2.6)$$

L’équiprobabilité des couplages K_1 et K_2 assure l’auto-dualité du système [†]. La ligne critique est par conséquent définie exactement par la relation :

$$\left(e^{K_1^c} - 1\right) \left(e^{K_2^c} - 1\right) = q. \quad (2.2.7)$$

L’amplitude du désordre est mesurée par le rapport $r = K_1/K_2$.

Notre but étant de tester le résultat de Senthil et Majumdar concernant l’indépendance de la classe d’universalité avec le nombre d’états q , une détermination précise des exposants critiques était nécessaire. Nous avons par conséquent choisi une méthode de diagonalisation approchée de la matrice de transfert : “*Density Matrix Renormalization Group*” (**DMRG**). Les détails de l’algorithme sont présentés dans l’annexe. L’algorithme de “taille finie” avec trois balayages complets du système, plus précis en particulier pour les systèmes désordonnés, a été préféré à celui de “taille infinie”.

Comme le montre la figure 2.2.1, les profils de la densité d’aimantation sont fortement tourmentés même pour un désordre relativement faible ($r = 2$). Par conséquent, une moyenne partielle sur un nombre trop petit de configurations de désordre $\{K_i\}_{i=1\dots L}$ conduit à une déviation importante. De plus, les travaux de Fisher pour $q = 2$ puis de Senthil et Majumdar prédisent un caractère multifractal très prononcé avec une distribution de probabilité de l’aimantation par exemple présentant une queue

[†] Cet argument sera développé dans le cadre du désordre homogène au chapitre suivant.

dont la décroissance est très lente. Il est donc important dans le cas d'un désordre corrélé de réaliser une moyenne sur un nombre suffisamment important de configurations de désordre $\{K_i\}_{i=1\dots L}$ pour qu'apparaissent ces événements rares. Des tests préliminaires montrent que plusieurs dizaines de milliers de configurations de désordre sont nécessaires. Dans le cas des tailles les plus petites, la moyenne est faite sur l'ensemble des configurations de désordre.

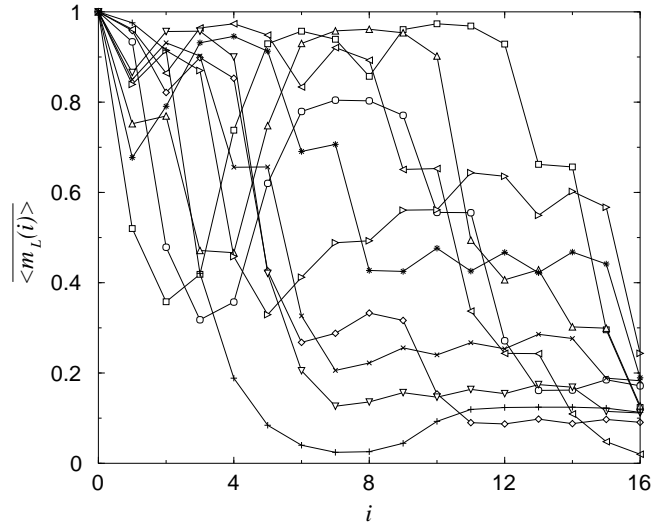


Figure 2.2.1 : Exemples de profils d'aimantation pour quelques configurations de désordre avec $q = 3$, $r = 2$ et $L = 16$.

Le nombre d'états conservés lors de la troncation de la base de l'espace de Hilbert a été choisi égal à $m = 16$. Des déviations importantes ont été observées lors de tests avec seulement $m = 8$ états conservés. Le nombre de configurations de désordre et d'états conservés limitent le calcul à des tailles relativement petites.

2.2.2. Effets de taille finie de l'aimantation

L'étude des effets de taille finie présentés dans ce paragraphe a été menée sur des systèmes de tailles comprises entre $L = 4$ et $L = 16$ avec une énumération exacte de l'ensemble des configurations de désordre pour le calcul des moyennes. Des calculs ont été réalisés pour plusieurs amplitudes r de désordre ($r = 2, 8$ pour $q = 2$, $r = 2, 4, 8$ pour $q = 3$, $r = 2, 5, 10, 20$ pour $q = 4$ et $r = 1.5, 4$ pour $q = 6$). Nous avons mesuré la densité moyenne d'aimantation en brisant la symétrie Z_q du modèle par des conditions aux limites fixe-libre avec $\sigma_{1j} = 0$ et en utilisant la définition standard du paramètre d'ordre du modèle de Potts sur un système de taille L :

$$\overline{\langle m_L(i) \rangle} = \frac{q \overline{\langle \delta_{\sigma_{i,j}, 0} \rangle} - 1}{q - 1}. \quad (2.2.8)$$

Les exposants critiques magnétiques de volume et de surface sont estimés par l'étude des effets de taille finie :

$$\overline{\langle m_L^b \rangle} \sim L^{-x_\sigma^b}, \quad \overline{\langle m_L^s \rangle} \sim L^{-x_\sigma^s} \quad (2.2.9)$$

où les aimantations de volume et de surface sont mesurées respectivement en $i = L/2$ et $i = L$. La figure 2.2.2 présente les résultats obtenus pour l'aimantation de volume pour plusieurs valeurs de q et r . L'exposant x_σ^b reste relativement stable avec l'amplitude r du désordre mais aussi avec le nombre d'états q du modèle de Potts, confirmant en cela la prédiction d'une classe d'universalité unique. Toutefois, les exposants mesurés présentent une déviation systématique par rapport à l'exposant de Fisher :

$$x_\sigma^b = \frac{3 - \sqrt{5}}{4} \simeq 0.191. \quad (2.2.10)$$

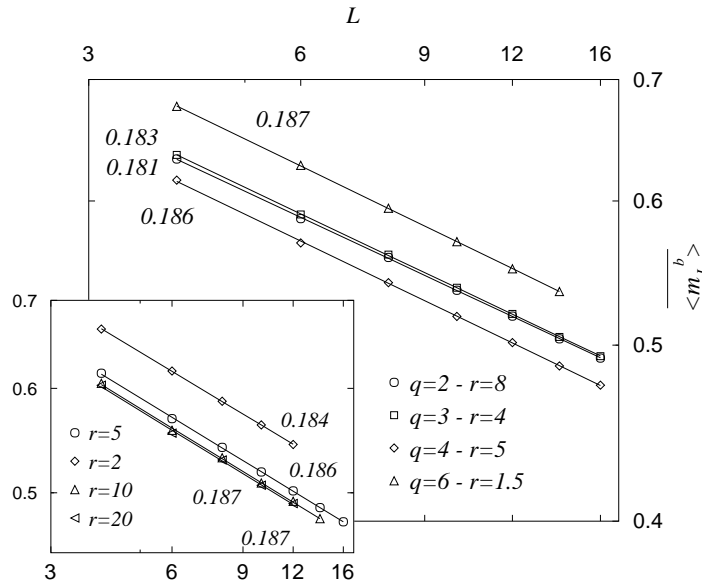


Figure 2.2.2 : Comportement en loi de puissance de l'aimantation de volume avec la taille du système pour plusieurs valeurs de q et de r . Les droites correspondent à une interpolation en loi de puissance ne prenant en compte aucune correction d'échelle et les valeurs des exposants associés sont reportés à leur extrémité.

	$q = 2$		$q = 3$			$q = 4$		$q = 6$
L	$r = 2$	$r = 8$	$r = 2$	$r = 4$	$r = 8$	$r = 5$	$r = 10$	$r = 1.5$
5	0.15352	0.18540	0.17119	0.18598	0.19697	0.19644	0.20327	0.18415
7	0.15902	0.17126	0.17606	0.17698	0.17098	0.17386	0.16655	0.18858
9	0.16285	0.18653	0.17971	0.18728	0.19301	0.19257	0.19639	0.18942
11	0.16572	0.17921	0.18137	0.18203	0.19536	0.18054	0.17782	0.18957
13	0.16802	0.18804	0.18299	0.18816	0.18974	0.19214	0.19569	0.18635
15	0.16991	0.18254	-	0.18411	0.19515	0.18319	-	-

Tableau 2.2.1 : Approximants de l'exposant critique magnétique x_σ^b pour diverses valeurs du nombre d'états q et de l'amplitude du désordre r .

Cependant, le modèle de Potts présente une déviation de même ordre de grandeur que le modèle d'Ising pour lequel l'exposant (2.2.10) a été plusieurs fois vérifié numériquement [106]. Il est donc probable que cette différence soit principalement due à la présence de corrections d'échelle. Cette hypothèse est confirmée par le tableau 2.2.1 des approximants locaux de l'exposant x_σ^b définis comme

$$x_\sigma^b(L) = -\frac{\ln \overline{\langle m_{L+1}^b \rangle} - \ln \overline{\langle m_{L-1}^b \rangle}}{\ln(L+1) - \ln(L-1)}. \quad (2.2.11)$$

La présence de corrections oscillantes principalement à désordre fort (figure 2.2.3) ne permet pas l'utilisation d'une technique d'extrapolation élaborée.

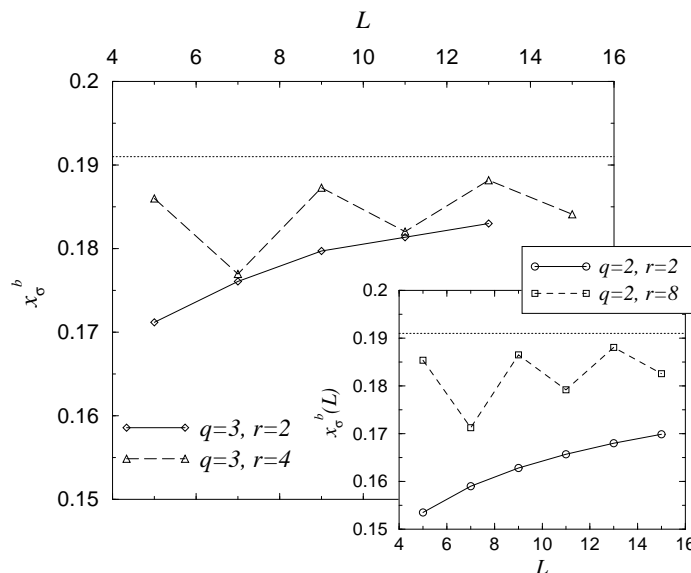


Figure 2.2.3 : Approximants locaux $x_\sigma^b(L)$ de l'exposant critique magnétique de volume estimés à partir des tailles L et $L-2$ en fonction de la largeur L du ruban pour le modèle de Potts $q=3$ et $q=2$ (en insert). La droite pointillée correspond au résultat exact de Fisher ($x_\sigma^b \simeq 0.191$).

En ce qui concerne l'aimantation de surface, la précision des résultats et l'absence de corrections oscillantes (figure 2.2.4) permet l'utilisation de l'algorithme d'extrapolation **BST** [99]. Partant du tableau 2.2.2 des approximants locaux de l'exposant de surface x_σ^1 , l'algorithme construit à chaque itération une nouvelle table comprenant un terme de moins et tenant compte d'une correction d'échelle dont on aura précisé l'exposant ω . La valeur $\omega = 1$ a été systématiquement choisie. De nouveau, aucune dépendance des exposants n'est observée avec l'amplitude du désordre comme cela était le cas pour un désordre homogène. Un très bon accord est obtenu avec l'exposant de McCoy et Wu

$$x_\sigma^1 = 1/2 \quad (2.2.12)$$

et ce pour toutes les valeurs du nombre d'états q conformément aux prédictions de Senthil et Majumdar.

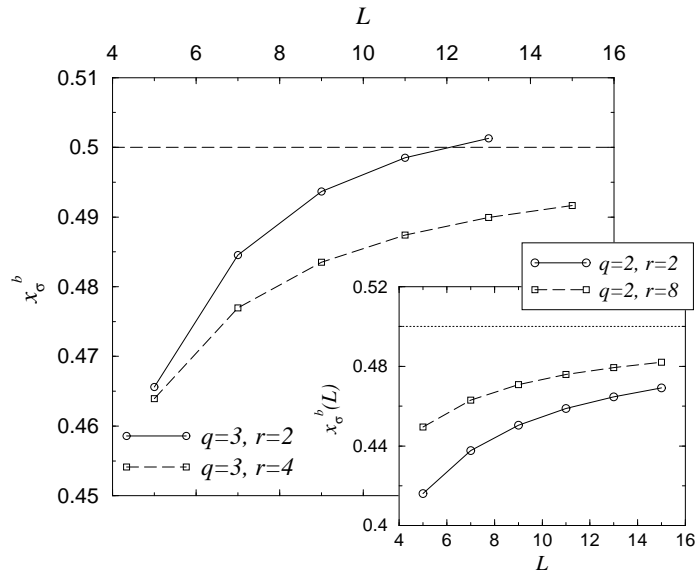


Figure 2.2.4 : Approximants locaux $x_\sigma^1(L)$ de l'exposant critique magnétique de surface estimés à partir des tailles L et $L - 2$ en fonction de la largeur L du ruban pour le modèle de Potts $q = 3$ et $q = 2$ (en insert). La droite pointillée correspond au résultat exact de McCoy et Wu ($x_\sigma^1 = 1/2$) pour le modèle d'Ising.

L	$q = 2$		$q = 3$			$q = 4$		$q = 6$
	$r = 2$	$r = 8$	$r = 2$	$r = 4$	$r = 8$	$r = 5$	$r = 10$	$r = 1.5$
5	0.41608	0.44950	0.46559	0.46393	0.46844	0.47671	0.47741	0.55719
7	0.43773	0.46307	0.48454	0.47694	0.47932	0.48718	0.48819	0.56816
9	0.45043	0.47083	0.49365	0.48353	0.48475	0.49161	0.49204	0.56481
11	0.45880	0.47587	0.49851	0.48742	0.48800	0.49383	0.49387	0.56108
13	0.46475	0.47941	0.50127	0.48993	0.49014	0.49481	0.49435	0.54974
15	0.46919	0.48205	-	0.49166	0.49150	-	-	-
∞	0.50000(1)	0.5000(1)	0.498(4)	0.499(1)	0.500(1)	0.496(10)	0.50(5)	-

Tableau 2.2.2 : Approximants de l'exposant critique magnétique x_σ^1 de surface et extrapolation dans la limite thermodynamique obtenue par l'algorithme BST pour diverses valeurs du nombre d'états q et de l'amplitude du désordre r .

2.2.3. Profils d'aimantation

Le désordre homogène est un exemple de perturbation donnant lieu à des profils moyens vérifiant l'expression conforme [†]. La restauration des propriétés de symétrie requises par l'invariance conforme lors de la moyenne sur les configurations de désordre est

[†] Cela fera l'objet d'une discussion détaillée au chapitre 3.

une explication possible. Dans le cas du désordre corrélé, l'existence d'une anisotropie, de surcroît infinie, est une source d'incompatibilité avec la théorie conforme qui ne disparaît pas lors de la moyenne. Cependant, il a également été vérifié numériquement ^[106] que les profils d'aimantation de la chaîne quantique d'Ising en champ transverse aléatoire satisfont l'expression conforme

$$\overline{\langle m_L(\ell) \rangle} = \mathcal{A} \left(\frac{\pi}{L} \right)^{x_\sigma^b} [\sin \pi \ell]^{-x_\sigma^b} \left[\cos \frac{\pi \ell}{2} \right]^{x_\sigma^1} \quad (2.2.13)$$

où $\ell = (i - 1/2)/L$. Ce résultat est probablement dû aux contraintes géométriques, mais les résultats numériques ne permettent pas de mettre en évidence une éventuelle déviation par rapport à l'expression conforme. La technique du groupe de renormalisation mise en œuvre par Senthil et Majumdar pour la chaîne de Potts désordonnée montre qu'au point fixe les exposants mais aussi les fonctions d'échelle sont indépendants du nombre d'états q . La quantité $\overline{\langle m_L(\ell) \rangle} \cdot L^{x_\sigma^b}$ est une telle fonction d'échelle. La validité observée de la relation (2.2.13) doit par conséquent s'étendre à toute valeur finie de q .

Malgré la taille relativement petite des systèmes étudiés ($L \leq 16$), la figure 2.2.5 témoigne d'un accord relativement bon des profils d'aimantation avec l'expression conforme (2.2.13). Là encore, les résultats semblent très peu sensibles à l'amplitude du désordre.

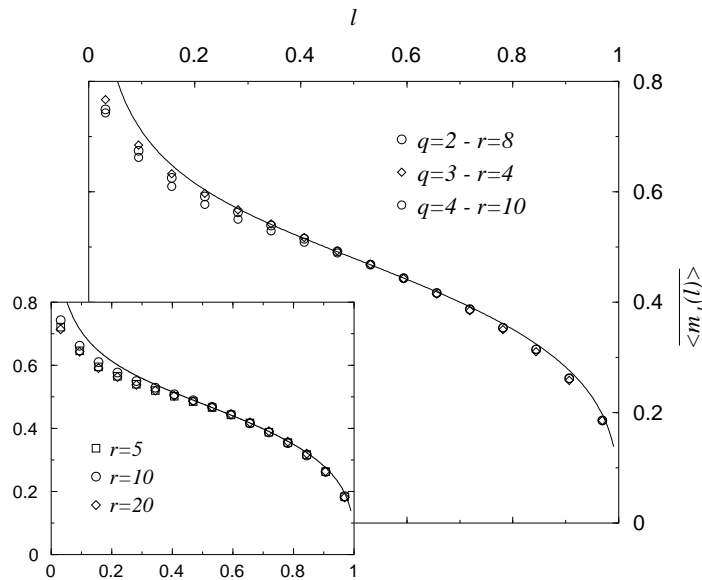


Figure 2.2.5 : Profil d'aimantation moyen pour $L = 16$, diverses valeurs de q (en insert pour $q = 4$) et plusieurs amplitudes de désordre r . La courbe continue correspond à une interpolation avec l'expression conforme avec pour seul paramètre libre l'amplitude.

L'exposant critique x_σ^1 peut être extrait du profil d'aimantation en tirant parti de l'expression (2.2.13) :

$$x_\sigma^1 = \frac{\ln \overline{\langle m_L(\ell = 3/4) \rangle} - \ln \overline{\langle m_L(\ell = 1/4) \rangle}}{\ln(\sqrt{2} - 1)}. \quad (2.2.14)$$

L	$q = 2 - r = 8$	$q = 3 - r = 4$	$q = 4 - r = 5$	$q = 6 - r = 4$
4	0.5161	0.5195	0.5505	0.5709
6	0.5094	0.5237	0.5494	0.5711
8	0.5039	0.5224	0.5411	0.5607
10	0.4996	0.5210	0.5341	0.5511
12	0.4995	0.5202	0.5314	0.5422
14	0.5010	0.5206	0.5310	0.5262
16	0.5000	0.5187	0.5269	-

Tableau 2.2.3 : Approximants de l'exposant x_σ^1 en fonction de la taille L pour diverses valeurs de q et r . Les tailles en gras correspondent à des profils pour lesquels un site est présent en $\ell = 1/4$ et $\ell = 3/4$ et ne nécessitent donc pas d'interpolation.

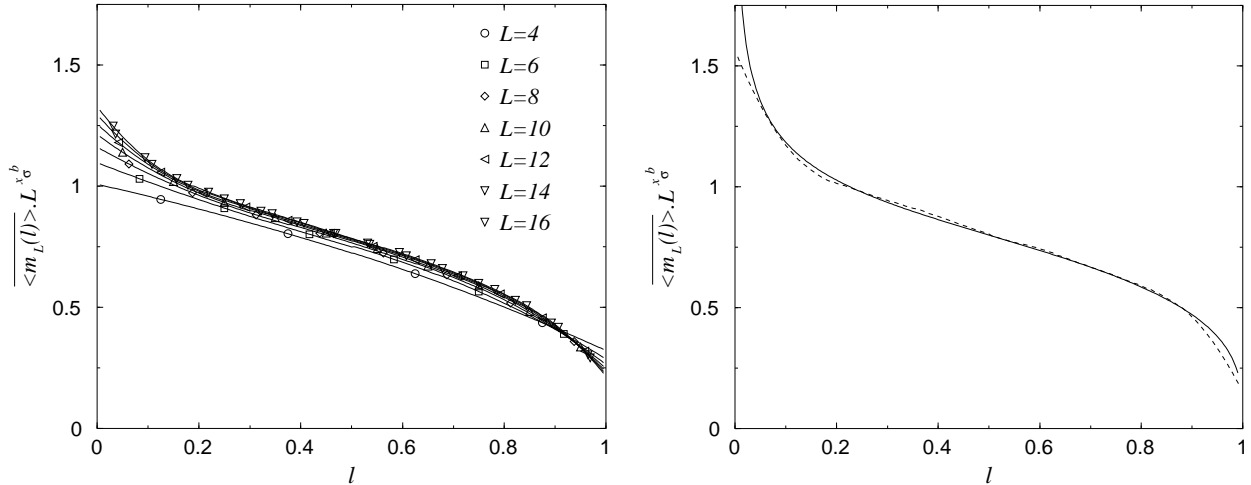


Figure 2.2.6 : Interpolation des profils d'aimantation pour $q = 3$ et $r = 8$ (à gauche) et extrapolation dans la limite thermodynamique de la fonction d'échelle $\overline{\langle m_L(\ell) \rangle} \cdot L^{x_\sigma^b}$ (à droite) calculée à partir d'une extrapolation linéaire en $1/L$ des profils et représentée en pointillés. On pourra comparer cette extrapolation à l'interpolation avec la forme conforme avec pour seul paramètre l'amplitude et qui est tracée en trait continu.

Il ne s'agit pas ici de fournir une nouvelle détermination de l'exposant x_σ^1 mais simplement de vérifier la cohérence des profils d'aimantation avec l'expression conforme (2.2.13). Les résultats obtenus semblent compatibles avec la valeur asymptotique attendue $x_\sigma^1 = 1/2$ même si d'importants effets de taille finie sont présents (tableau 2.2.3). Pour appliquer la relation (2.2.14) aux systèmes pour lesquels il n'existe pas de site en $\ell = 1/4$ et $\ell = 3/4$, une interpolation du profil avec un polynôme de degré deux a été réalisée avec les trois points les plus proches. Un exemple de cette interpolation est présenté sur la figure 2.2.6.

Un approximant pour l'exposant x_σ^b peut également être construit mais il fait intervenir trois points du profil et est de ce fait trop sensible aux erreurs numériques pour être exploitable.

2.2.4. Multifractalité

Parmi les résultats obtenus par Fisher pour la chaîne d'Ising en champ transverse aléatoire figure le comportement asymptotique de la distribution de probabilité de l'aimantation pour un ruban de largeur L :

$$\wp(\langle m_L^\delta \rangle) = L^{-x_\sigma^\delta} \tilde{p}(L^{-x_\sigma^\delta} \ln \langle m_L^\delta \rangle) \quad (2.2.15)$$

où $\delta = b, s$ pour les aimantations de volume et de surface. Cette expression a été vérifiée numériquement par Iglói et Rieger [106]. La fonction d'échelle \tilde{p} ne doit pas dépendre de la valeur du nombre d'états q d'après les résultats de Senthil et Majumdar.

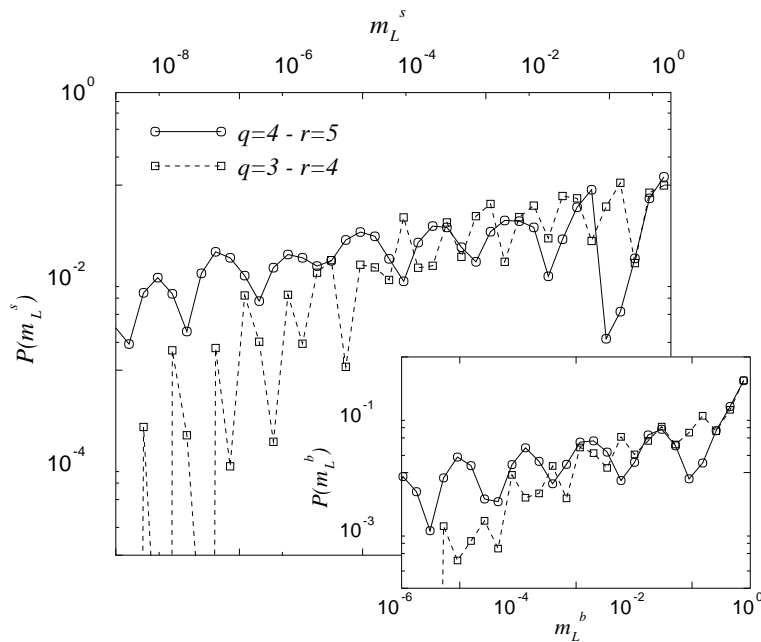


Figure 2.2.7 : Distribution de probabilité de l'aimantation de surface et de volume (en insert) pour deux valeurs de q et r .

La détermination de la probabilité de distribution des aimantations de volume et de surface a été réalisée lors des calculs destinés à l'étude des effets de taille finie. De ce fait, les moyennes sont faites sur l'ensemble des configurations de désordre et les tailles limitées à $L \leq 16$. Cette contrainte sévère est à l'origine de la forme très accidentée des distributions de probabilité mesurées comme le montre la figure 2.2.7. La propagation de l'ordre du bord fixe jusqu'à la surface libre, ou jusqu'au milieu du système pour l'aimantation de volume, est facilitée par la présence de couches de couplages forts K_1 . Chacun des pics de la distribution de probabilité correspond à des configurations de désordre comptant des nombres différents de couches de couplages forts. Le nombre de pics étant égal au nombre de sites L (ou $L/2$), on peut espérer obtenir une courbe monotone dans la limite thermodynamique.

Néanmoins, la relation (2.2.15) peut être testée indirectement par une analyse des moments $\overline{\langle m_L^\delta \rangle^n}$ des distributions de probabilité. En effet, on peut tirer de (2.2.15) le comportement de ces moments avec la taille L du système :

$$\begin{aligned} \overline{\langle m_L^\delta \rangle^n} &= L^{-x_\sigma^\delta} \int_0^1 dm_L^\delta (m_L^\delta)^n \tilde{p}(L^{-x_\sigma^\delta} \ln m_L^\delta) \\ &= \frac{L^{-x_\sigma^\delta}}{n+1} \int_0^1 dy \tilde{p}\left(L^{-x_\sigma^\delta} \frac{\ln y}{n+1}\right), \quad \left(y = (m_L^\delta)^{n+1}\right). \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

L'ordre du moment n intervient que dans l'amplitude et donc les exposants $x_\sigma^\delta(n)$ associés aux quantités $\overline{\langle m_L^\delta \rangle^n}^{1/n}$ satisfont la relation exacte

$$x_\sigma^\delta(n) = \frac{x_\sigma^\delta}{n}, \quad (x_\sigma^\delta = x_\sigma^\delta(1)). \quad (2.2.17)$$

Cette relation ne se limite pas aux seules valeurs entières de n , la discussion sera donc étendue dans la suite aux valeurs réelles. Contrairement au cas du désordre homogène, il est plus judicieux ici de travailler directement sur les moments $\overline{\langle m_L^\delta \rangle^n}$ qui présentent tous un comportement unique. Les exposants associés ont été estimés par le calcul d'approximants définis à partir de tailles L et L' successives. La courbe 2.2.8 met en évidence la validité de la relation (2.2.17) et donc de (2.2.15) pour $q = 3$. Les autres valeurs de q ne se distinguent que par des corrections d'échelle plus marquées.

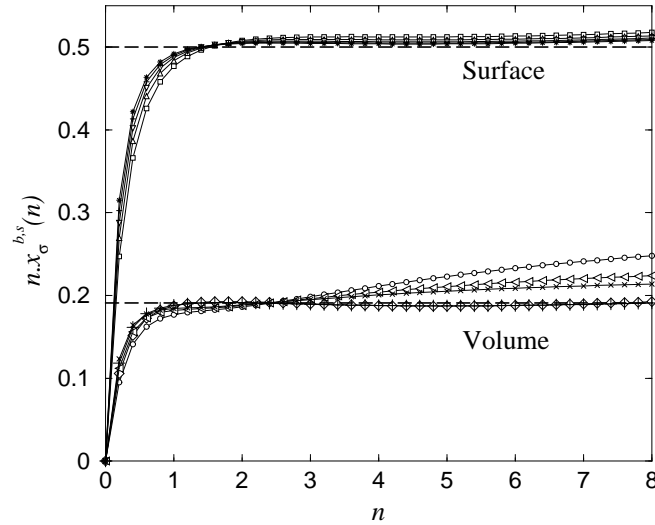


Figure 2.2.8 : Approximants des exposants associés aux moments de l'aimantation de volume et de surface pour $q = 3$ et $r = 4$ pour des couples de tailles (L, L') de plus en plus grandes. Les droites en pointillés correspondent aux exposants des quantités moyennes.

Un moment d'ordre n important privilégie lors du calcul de la moyenne les configurations de désordre pour lesquelles l'aimantation est proche de l'unité. Les événements rares, associés aux configurations de désordre présentant un nombre important de couplages forts et donc une aimantation proche de la saturation, jouent un rôle important. A

l'inverse, un moment d'ordre n petit renforce le rôle des configurations de désordre dont l'aimantation est très faible au détriment des événements rares. Or c'est précisément dans cette région ($n \leq 1$) que la déviation des exposants mesurés avec la valeur attendue est la plus importante. Il semble donc que la relation (2.2.15) ne soit plus valable pour les valeurs très petites de l'aimantation. Toutefois, on notera que la déviation diminue à mesure que les approximants sont calculés à partir de tailles importantes.

Il est intéressant de remarquer qu'en admettant l'expression (2.2.15), on peut déterminer les exposants associés aux quantités moyennes beaucoup plus précisément en se plaçant à l'ordre n pour lequel les corrections d'échelle semblent les moins importantes (tableau 2.2.4). Sur la figure 2.2.8 par exemple, ce point se situe aux alentours de $n \simeq 2.45$ pour l'aimantation de volume et $n \simeq 1.65$ pour l'aimantation de surface.

$q = 2, r = 2$	$q = 2, r = 8$	$q = 3, r = 4$	$q = 6, r = 1.5$
0.189(3)	0.196(3)	0.1910(5)	0.190(2)

Tableau 2.2.4 : Exposants critiques magnétiques de volume x_σ^b obtenus par l'analyse du comportement multifractal de la distribution de probabilité.

2.2.5. Fonctions de corrélation dynamiques

L'anisotropie infinie est une autre des caractéristiques marquantes de la chaîne d'Ising en champ transverse aléatoire. Elle se manifeste par une décroissance logarithmique (2.2.3) des fonctions de corrélation spin-spin moyennes dans la direction parallèle aux couches.

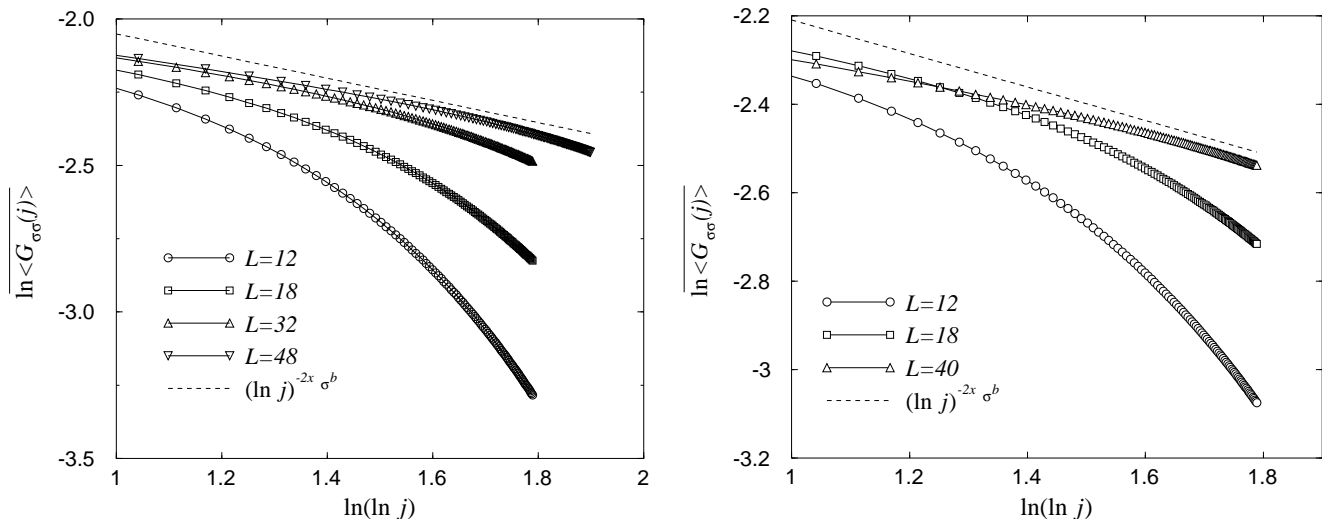


Figure 2.2.9 : Fonctions de corrélation spin-spin dynamiques pour des rubans de diverses largeurs L pour $q = 2$ (à gauche) et $q = 3$ (à droite) avec $r = 4$ dans les deux cas comparées au comportement prédit par Fisher.

Dans la version classique de la chaîne de Potts désordonnée, les fonctions de corrélation spin-spin dynamiques se calculent sur la rangée i selon

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(j) \rangle} = \overline{\Lambda_0^{-j} \langle 0 | \hat{\delta}_i T^j \hat{\delta}_i | 0 \rangle} \quad (2.2.18)$$

où $|0\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la plus grande valeur propre Λ_0 de la matrice de transfert T et $\hat{\delta}_i$ un opérateur projetant sur le sous-espace dans lequel $\sigma_{i,j} = 0$. Les conditions aux limites ont cette fois été choisies libres sur les deux surfaces et les fonctions de corrélation calculées le long de la colonne $i = L/2$. L'algorithme DMRG a été spécialement développé pour fournir la meilleure estimation possible de l'état fondamental $|0\rangle$ de la matrice de transfert effective associée. Toutefois, le calcul des fonctions de corrélation requièrent également une bonne approximation des premiers états excités. Bien qu'il existe des algorithmes appropriés, des tests préliminaires montrent qu'il suffit ici d'augmenter le nombre d'états conservés ($m \geq 16$). Le nombre de configurations de désordre est compris entre 20000 et 30000. La figure 2.2.9 montre que le comportement asymptotique attendu n'est atteint que pour la taille la plus grande ($L = 48$ pour $q = 2$ et $L = 40$ pour $q = 3$) et pour une distance $j \simeq 150$.

3. Perturbation a périodique

3.1. Introduction

L'étude de l'influence d'une perturbation a périodique sur un système critique a souvent été motivée par la découverte des quasi-cristaux ^[201] dont les propriétés physiques particulières sont liées à l'absence de périodicité. La littérature est abondante sur le sujet et nous en rappelons ici quelques éléments clés. Des simulations Monte Carlo ont montré que le comportement critique n'était pas modifié sur un réseau de Penrose ^[200]. En revanche, une riche variété de comportements a été observée en présence d'une modulation a périodique des couplages d'échange dans une direction de l'espace en particulier dans le cas du modèle d'Ising. Dans la limite anisotrope extrême ^[133], la matrice de transfert du modèle d'Ising avec une direction d'invariance s'identifie à l'opérateur d'évolution d'une chaîne quantique de spin 1/2 en champ transverse. L'hamiltonien s'écrit comme une forme quadratique d'opérateurs fermioniques ^[202] avec des énergies d'excitation qui peuvent être calculées numériquement pour de très longues chaînes. Dans le cas de perturbations marginales ou pertinentes, la séquence a périodique induit un comportement critique anisotrope au nouveau point fixe ^[14]. Mettant à profit la structure des séquences a périodiques générées par des règles d'inflation, Iglói et Turban ont introduit une méthode de renormalisation exacte permettant d'étudier les points critiques de volume et de surface pour de nombreuses séquences a périodiques marginales ou pertinentes ^[107, 108]. Cette technique, tout comme l'utilisation de la représentation en fermions libres, est particulière au modèle d'Ising. De ce fait, les propriétés critiques du modèle d'Ising perturbé par une modulation a périodique des couplages d'échange ont pu être étudiées de manière très intensive, alors que le modèle de Potts a fait l'objet d'une attention moindre ^[137].

Les propriétés géométriques des séquences a périodiques et le critère de pertinence qui en découle pour les transitions du second ordre sont présentés dans les paragraphes qui suivent. Les deux derniers paragraphes sont consacrés à la mise en évidence numérique d'une transition du second ordre du modèle de Potts à $q = 8$ états induite par certaines séquences a périodiques.

3.1.1. Construction et propriétés des séquences aperiodiques

Les séquences aperiodiques considérées dans la suite peuvent être construites de manière itérative au moyen d'une technique d'inflation. Pour cela, on définit des règles de substitution

$$X \longrightarrow S(X) \quad (X \in \{A; B; \dots\}) \quad (2.3.1)$$

qui à chaque élément X d'une séquence initiale font correspondre une sous-séquence $S(X)$. De nombreuses propriétés géométriques de ce type de séquences aperiodiques peuvent être calculées en définissant la **matrice de substitution** ^[192]

$$M = \begin{pmatrix} n_A^{S(A)} & n_A^{S(B)} & \dots \\ n_B^{S(A)} & n_B^{S(B)} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.3.2)$$

où $n_X^{S(Y)}$ est le nombre de termes X dans la séquence de substitution $S(Y)$. Appliquée à un vecteur dont les composantes sont données par les occurrences après n itérations de chacun des termes A, B, \dots autorisés dans la séquence, la matrice de substitution renvoie le vecteur correspondant à la $(n+1)$ ^{ème} itération. Les vecteurs et valeurs propres $\{(|i\rangle, \lambda_i)\}_{i=0,1,\dots}$ de la matrice de substitution contiennent de manière implicite l'information concernant les caractéristiques de la séquence après un nombre arbitraire d'itérations. Ainsi, la longueur L_n de la chaîne après n itérations sur une séquence de vecteur associé $|u_0\rangle$ est

$$L_n = \langle \mathbb{1} | M^n | u_0 \rangle = \sum_{i=0}^{+\infty} \lambda_i^n \langle \mathbb{1} | i \rangle \langle i | u_0 \rangle \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \lambda_0^n \langle \mathbb{1} | 0 \rangle \langle 0 | u_0 \rangle \quad (2.3.3)$$

où $|\mathbb{1}\rangle = (1 \ 1 \ \dots)$. De la même manière, la densité asymptotique de termes A est donnée par

$$\rho_n^A = \frac{1}{L_n} \sum_{i=0}^{+\infty} \lambda_i^n \langle A | i \rangle \langle i | u_0 \rangle \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{\langle A | 0 \rangle}{\langle \mathbb{1} | 0 \rangle} \quad (2.3.4)$$

si $|A\rangle = (1 \ 0 \ 0 \ \dots)$. L'extension des fluctuations de la densité de termes A est reliée à la seconde valeur propre de la matrice de substitution :

$$\begin{aligned} \Delta \rho_n^A &= \rho_n^A - \rho_\infty^A = \frac{1}{L_n} \left[\sum_{i=0}^{+\infty} \lambda_i^n \langle A | i \rangle \langle i | u_0 \rangle - \lambda_0^n \langle A | 0 \rangle \langle 0 | u_0 \rangle \right] \\ &= \frac{1}{L_n} \sum_{i=1}^{+\infty} \lambda_i^n \langle A | i \rangle \langle i | u_0 \rangle \\ &\underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{\lambda_1^n \langle A | 1 \rangle \langle 1 | u_0 \rangle}{\lambda_0^n \langle \mathbb{1} | 0 \rangle \langle 0 | u_0 \rangle} \sim \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^n. \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

3.1.2. Critère de Luck

Un critère analogue au critère de Harris a été proposé par Luck pour les systèmes critiques perturbés par une modulation apériodique des couplages d'échange ^[144, 103, 145]. Comme dans le cas du désordre homogène, la stabilité du point fixe associé au système pur est préservée tant que la divergence des fluctuations thermiques à l'approche du point critique reste plus rapide que celle des fluctuations géométriques induites par la perturbation. Considérons un système dont la modulation apériodique se manifeste par l'alternance de deux couplages d'échange K_A et K_B associés aux termes A et B d'une séquence apériodique. Les fluctuations locales des couplages d'échange par unité de longueur divergent d'après (2.3.4) comme

$$\Delta K = (K_A - K_B) \Delta \rho_A^n \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} (K_A - K_B) \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^n \sim g L_n^{\omega-1} \quad (2.3.6)$$

où $g \sim (K_A - K_B)$ correspond au champ d'échelle associé à l'amplitude de la perturbation apériodique et où l'**exposant de divagation** est défini par la relation :

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_1|}{\ln \lambda_0}. \quad (2.3.7)$$

Un changement d'échelle de facteur de dilatation b conduit aux fluctuations renormalisées

$$\Delta K' \sim b^{1/\nu} \Delta K \sim g' \left(\frac{L_n}{b} \right)^{\omega-1} \quad (2.3.8)$$

dont on peut tirer l'exposant de cross-over

$$\phi = 1 + \nu(\omega - 1). \quad (2.3.9)$$

Dans le cas du modèle d'Ising ($\nu = 1$), la perturbation est pertinente dès lors que l'exposant de divagation ω est positif. La modulation apériodique des couplages "généralise" le désordre dont les fluctuations sont gaussiennes et divergent avec un exposant de divagation $\omega = 1/2$.

3.1.3. Exemples de séquences apériodiques

Dans la suite de l'exposé, il ne sera question que de systèmes présentant une distribution binaire de couplages d'échange (K_0 et K_1) associés respectivement aux termes 0 et 1 d'une séquence apériodique. Les séquences sont construites au moyen de règles de substitution pour lesquelles chaque terme A, B, \dots correspond à un motif de 0 et de 1 ($A = 001, B = 110, \dots$ par exemple). Le lecteur trouvera ici les règles de construction et les propriétés des séquences apériodiques que nous avons étudiées. Ces quatre séquences peuvent être retrouvées dans la référence ^[58].

Séquence de Thue-Morse

Les règles de substitution

$$\begin{cases} 0 \rightarrow S(0) = 01, \\ 1 \rightarrow S(1) = 10 \end{cases} \quad (2.3.10)$$

gènèrent la séquence de Thue-Morse :

$$\begin{aligned}
 &0, \\
 &01, \\
 &0110, \\
 &01101001, \\
 &0110100110010110, \\
 &\dots
 \end{aligned}
 \tag{2.3.11}$$

La matrice de substitution de cette séquence

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}
 \tag{2.3.12}$$

admet pour valeurs propres $\lambda_0 = 2$ et $\lambda_1 = 0$. La rapide décroissance des fluctuations géométriques ($\omega = -\infty$) ne permet pas à la modulation apériodique de sortir le système du bassin d'attraction du point fixe associé au système pur : la perturbation est toujours non pertinente.

Séquence “Paper-Folding”

La séquence *pliage de papier* ou “Paper-Folding” est générée par les règles de substitution à quatre termes

$$\begin{cases}
 00 \rightarrow S(00) = 1000, \\
 01 \rightarrow S(01) = 1001, \\
 10 \rightarrow S(10) = 1100, \\
 11 \rightarrow S(11) = 1101
 \end{cases}
 \tag{2.3.13}$$

dont les premières itérations, partant de 11, conduisent successivement aux séquences

$$\begin{aligned}
 &11, \\
 &1101, \\
 &11011001, \\
 &1101100111001001, \\
 &\dots
 \end{aligned}
 \tag{2.3.14}$$

Les deux plus grandes valeurs propres de la matrice de substitution

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}
 \tag{2.3.15}$$

sont $\lambda_0 = 2$ et $\lambda_1 = 1$ de sorte que l'exposant de divagation $\omega = 0$ correspond précisément à la situation marginale prédite par le critère de Luck pour le modèle d'Ising ($\nu = 1$).

Séquence “Three-Folding”

La séquence *pliage ternaire* ou “Three-Folding” est construite à partir des règles de substitution à deux termes suivantes :

$$\begin{cases} 0 \rightarrow S(0) = 010, \\ 1 \rightarrow S(1) = 011. \end{cases} \quad (2.3.16)$$

Partant de la séquence initiale 0, les premières itérations des substitutions (2.3.16) conduisent à

$$\begin{aligned} &0, \\ &010, \\ &010011010, \\ &010011010010011011010011010, \\ &\dots \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

La matrice de substitution

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (2.3.18)$$

admet pour valeurs propres $\lambda_0 = 3$ et $\lambda_1 = 1$. L'exposant de divagation $\omega = 0$ place cette séquence sur le même plan que la séquence de Paper-Folding quant à sa pertinence.

Séquence de “Rudin-Shapiro”

La séquence de “Rudin-Shapiro” est construite en utilisant les règles de substitution à quatre termes

$$\begin{cases} 00 \rightarrow S(00) = 0001, \\ 01 \rightarrow S(01) = 0010, \\ 10 \rightarrow S(10) = 1101, \\ 11 \rightarrow S(11) = 1110 \end{cases} \quad (2.3.19)$$

dont l'itération sur la séquence initiale 11 conduit successivement à

$$\begin{aligned} &11, \\ &1110, \\ &11101101, \\ &1110110111100010, \\ &\dots \end{aligned} \quad (2.3.20)$$

La matrice de substitution

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.3.21)$$

admet pour valeurs propres $\lambda_0 = 2$, $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{2}$ et $\lambda_3 = 0$. L'exposant de divergence $\omega = 1/2$ montre que les fluctuations des couplages présentent une divergence identique à celle associée au désordre corrélé.

3.1.4. Ligne critique

La transformation de dualité du modèle de Potts (chapitre 1, paragraphe 3.2.2) associe à chaque liaison de couplage d'échange K une liaison qui lui est perpendiculaire et de couplage d'échange K^* tel que

$$(e^K - 1)(e^{K^*} - 1) = q. \quad (2.3.22)$$

La transformation de dualité ne modifie pas la structure en couches du système mais la séquence des couplages d'échange subit la transformation $\{K_i\}_{i=1\dots L} \rightarrow \{K_i^*\}_{i=1\dots L}$. La figure 2.3.1 illustre l'invariance par transformation de dualité, à une rotation de réseau près, d'un système pour lequel la séquence aperiodique est anti-symétrique, c.à.d.

$$K_i = K_0 \delta_{K_{L+1-i}, K_1} + K_1 \delta_{K_{L+1-i}, K_0}. \quad (i = 1 \dots L) \quad (2.3.23)$$

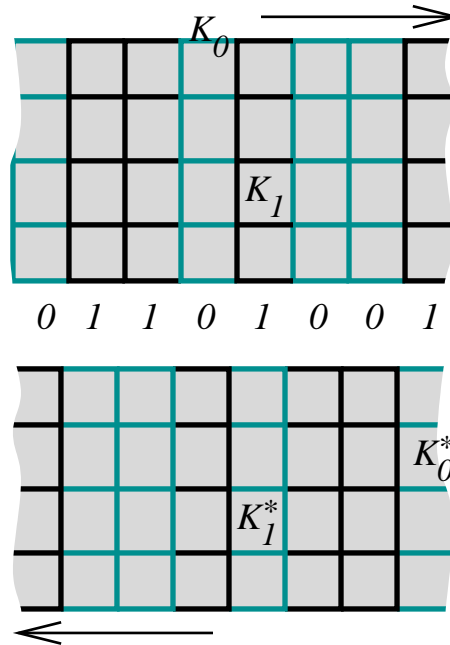


Figure 2.3.1 : Transformation de dualité d'un système dont la séquence aperiodique est anti-symétrique.

La densité d'énergie libre étant conservée lors de la transformation de dualité, sa partie singulière s'écrit sous la forme

$$f_{\text{sing}}(K_0, K_1) = f_{\text{sing}}(K_1^*, K_0^*). \quad (2.3.24)$$

L'hypothèse de l'existence d'une unique singularité impose donc la relation

$$K_0 = K_1^* = \ln \left[1 + \frac{q}{e^{K_1} - 1} \right] \quad (2.3.25)$$

qui détermine la position de la ligne critique.

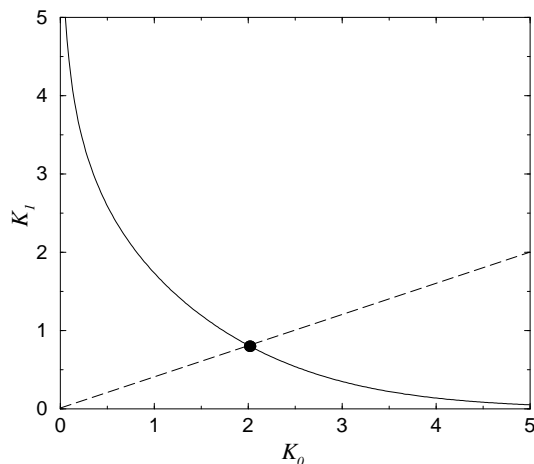


Figure 2.3.2 : Ligne critique (trait plein) et ligne physique correspondant à un désordre d'amplitude fixée $r = 2$. L'intersection marquée par le point noir correspond au point critique pour cette amplitude.

Mise à part la séquence de Rudin-Shapiro, les séquences étudiées dans la suite de l'exposé ont été choisies parce qu'elles étaient anti-symétriques. Dans le cas de certaines d'entre elles, le système n'est pas rigoureusement auto-dual. Toutefois, la fraction de sites concernée s'annule dans la limite thermodynamique et par conséquent n'induit qu'un effet non pertinent. La séquence de Paper-Folding, par exemple, n'est anti-symétrique que si on omet les couches sur la surface droite et au centre du système.

3.2. Propriétés hors-criticalité

3.2.1. Détails des simulations

L'ensemble des résultats présentés dans la suite de ce chapitre ont été obtenus par simulations Monte Carlo. Notre but étant essentiellement l'étude du comportement au point critique d'éventuelles transitions de phase du second ordre induites par l'apériodicité des interactions, nous avons utilisé un algorithme d'amas (algorithme de Swendsen-Wang, voir Annexe). Une étude plus approfondie des transitions du premier ordre aurait nécessité l'emploi d'algorithmes adaptés, comme par exemple les algorithmes multi-canoniques (voir Annexe). Une technique de **multi-spin coding** consistant en un stockage de plusieurs spins dans un même mot 32 bits a été utilisée ^[54]. La possibilité d'écrire certaines opérations (identification des liens, parcours des amas dans une direction, calcul de l'aimantation et de l'énergie, . . .) uniquement en utilisant des opérateurs booléens se traduit par une accélération substantielle de l'exécution. Une simulation Monte Carlo "moyenne" requiert une séquence de l'ordre de 10^{11} nombres aléatoires. Les **générateurs de nombres pseudo-aléatoires** de type congruential ^[220]

doivent par conséquent être écartés en raison de leur trop courte période ($2^{32} \approx 10^9$). Une période suffisamment longue n'est cependant pas suffisante pour garantir l'absence de déviations systématiques : la séquence aléatoire idéale doit également être dépourvue de corrélations à deux ou plusieurs points. Ainsi, le générateur de Kirkpatrick-Stoll (R250), largement utilisé pour sa rapidité, présente une très longue période (2^{250}) mais il a été montré que son utilisation conjointement à l'algorithme de Wolff causait des déviations dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel homogène [77]. Notre choix s'est porté sur le générateur RANMAR introduit après que furent observées des déviations avec R250 [153, 114]. Ce générateur est considéré comme sûr. Le générateur RANLUX [150, 115] qui en dérive, présente des corrélations plus faibles [212] mais handicape trop fortement les simulations par sa lenteur.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressé au comportement thermodynamique avec la température dans le cas du modèle de Potts à $q = 8$ états perturbé par une modulation des couplages suivant les séquences de Thue-Morse, Paper-Folding, Three-Folding et Rudin-Shapiro. Une séquence périodique (01010101...) pour laquelle la transition est analogue à celle du système pur (transition du premier ordre fortement marquée) a également été étudiée pour servir de système témoin. Les réseaux considérés sont rectangulaires de largeur L_x et de longueur $L_y = 2L_x$ avec des conditions aux limites libres sur les surfaces $y = 1$ et $y = L_y$ et périodiques dans la seconde direction. L'apériodicité est répartie suivant la direction Oy et le rapport des couplages d'échange choisi égal à $r = K_0/K_1 = 5$. Les simulations comportent 200.000 itérations ce qui équivaut approximativement à $10^4 \tau_e$ pour les quelques points au voisinage de la température de transition du premier ordre du système périodique. Pour toutes les autres séquences, l'apériodicité adoucit la transition et le nombre d'itérations reste largement supérieur à $10^4 \tau_e$ à toute température. Les valeurs des temps d'auto-corrélation sont reportées dans le tableau 2.3.1. L'hamiltonien (1.3.1) du modèle de Potts, et donc la distribution de probabilité des configurations de spin, ne sont pas modifiés par la permutation des états de spin. Le paramètre d'ordre (1.3.2) reste par conséquent nul à toute température. Nous utilisons un paramètre d'ordre relié, pour chaque configuration, à la fraction de spin la plus représentée :

$$\langle m \rangle = \frac{1}{q-1} \left[q \langle \max_{\sigma \in \{0; q-1\}} \rho_\sigma \rangle - 1 \right] \quad (2.3.26)$$

où ρ_σ est la fraction de spin dans l'état σ . La symétrie $Z(q)$ entre les q états possibles de spin est ainsi artificiellement brisée.

3.2.2. Propriétés magnétiques

On présentera dans la suite pour chacune des séquences étudiées des courbes d'aimantation, de susceptibilité magnétique et de cumulant de Binder en fonction de la température (figures 2.3.4 à 2.3.13). Les configurations de spin échantillonnées lors des simulations Monte Carlo permettent de suivre l'évolution de la taille des amas corrélés lorsque l'on varie la température et donnent une idée qualitative du mécanisme de la transition de phase. Il semble à ce stade que les séquences de Paper-Folding, Three-Folding et Rudin-Shapiro induisent une transition de phase du second ordre avec un caractère manifestement anisotrope. Toutefois, on ne peut pas écarter la possibilité d'une transition du premier ordre très faible avec une longueur de corrélation (à la

température de transition) supérieure à la taille des systèmes considérés. En revanche, la séquence de Thue-Morse induit bien une transition du premier ordre avec des amas dont la taille reste très inférieure à toute température à la taille des plus gros systèmes étudiés. Les courbes de susceptibilité magnétique χ , mesurée par les fluctuations de l'aimantation, présentent pour les séquences considérées un pic unique à partir d'une taille suffisamment grande. Malgré la structure très inhomogène du système (figure 2.3.3), il n'existe donc qu'une seule transition de phase. L'ordre d'une transition peut être déduit du type de singularité développé par la susceptibilité magnétique ^[164]. Pour un système fini, on s'attend à observer un pic qui, dans le cas d'une transition du premier ordre au couplage de transition K_t , tend dans la limite thermodynamique vers une singularité de type $\delta(K - K_t)$. Par conséquent, des courbes de susceptibilité magnétique tracées en fonction d'une température réduite de manière à ramener le maximum de la susceptibilité à l'origine et correspondant à deux systèmes de tailles différentes doivent nécessairement se croiser ^[164]. Comme attendu, la séquence périodique présente bien ce type de comportement (figure 2.3.5). La figure 2.3.7 confirme l'existence d'une transition du premier ordre pour la séquence Thue-Morse. Dans le cas d'une transition du second ordre, en dehors du régime d'effets de taille finie ($\xi \ll L$), les courbes se superposent de sorte que les susceptibilités de systèmes de grande taille enveloppent celles de systèmes de taille plus petite. Ce type de comportement est observé pour les séquences Paper-Folding (figure 2.3.9), Rudin-Shapiro (figure 2.3.13) et partiellement pour Three-Folding (figure 2.3.11) probablement à cause d'effets de taille finie.

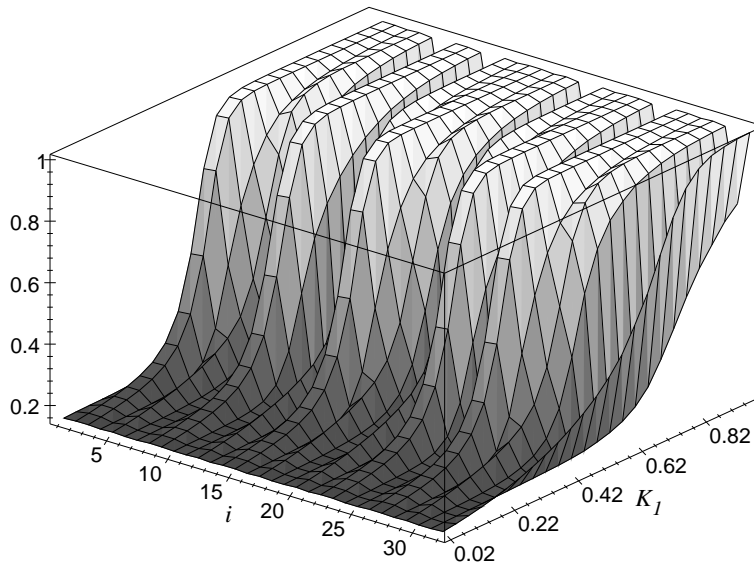


Figure 2.3.3 : Aimantation locale sur la $i^{\text{ème}}$ colonne en fonction du couplage K_1 pour un système de taille 16×32 perturbé par la séquence Thue-Morse.

Le cumulante d'ordre 4 (ou cumulante de Binder) $U_m = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2$ permet également de déterminer l'ordre d'une transition de phase. Dans le cas d'une transition du premier ordre, la discontinuité de l'aimantation doit se manifester par un pic de plus en plus marqué du cumulante de Binder à mesure qu'on tend vers la limite thermodynamique. A l'inverse, s'il existe bien un tel pic dans le cas d'une transition du second ordre, sa profondeur doit atteindre une valeur finie dans la limite thermodynamique.

Séquence périodique

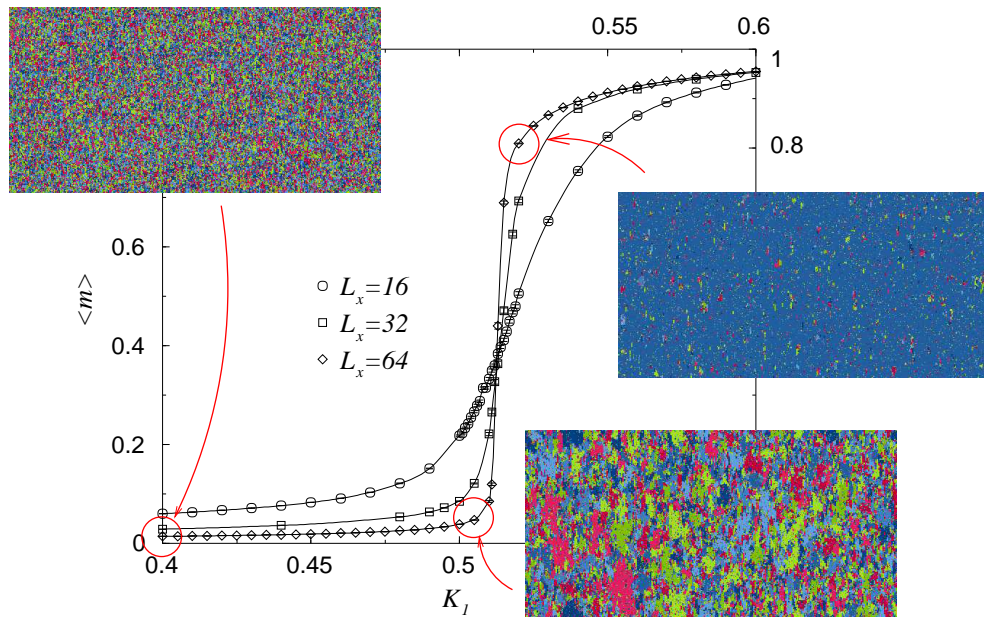


Figure 2.3.4 : Courbes d'aimantation pour diverses tailles et configurations typiques de spin pour les couplages d'échange $K_1 = 0.4, 0.51$ et 0.52 .

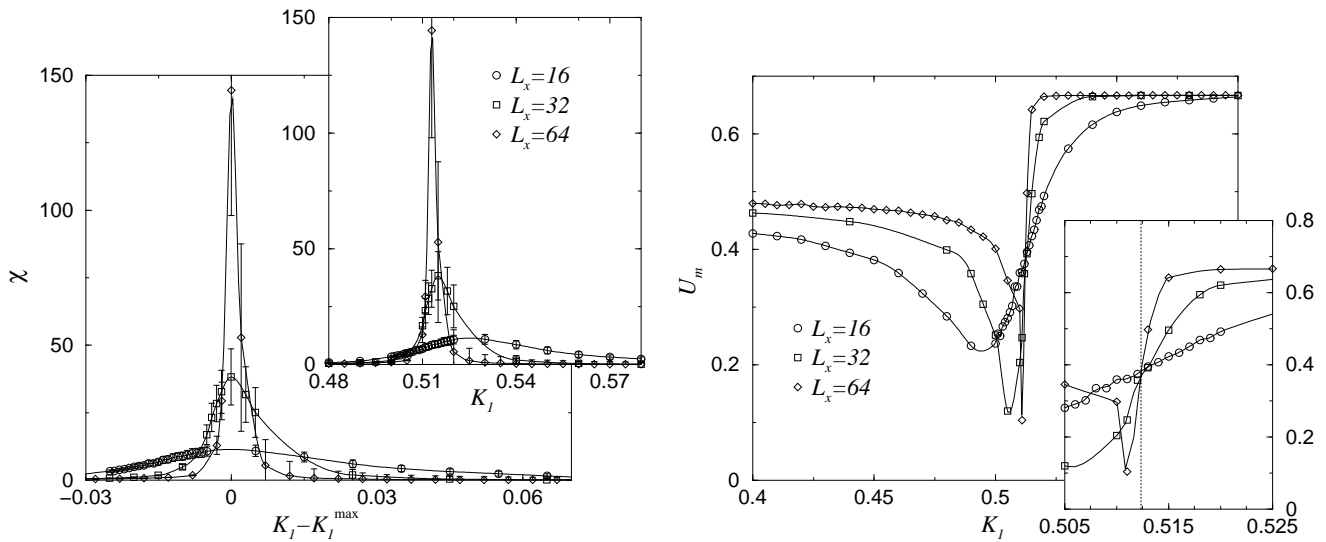


Figure 2.3.5 : Susceptibilité magnétique en fonction du couplage K_1 (insert) et de sa valeur réduite (à gauche) et cumulant de Binder en fonction du couplage K_1 (à droite) pour diverses tailles.

Séquence Thue-Morse

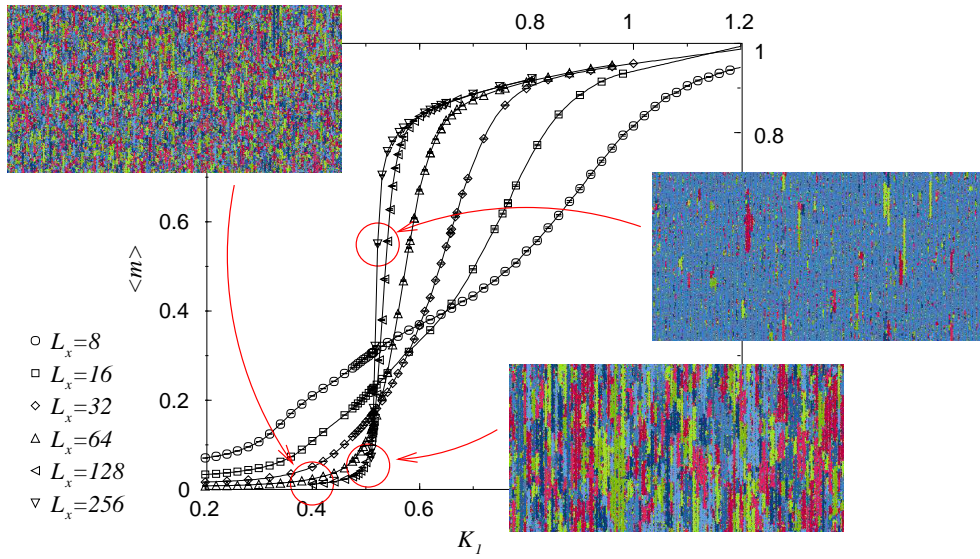


Figure 2.3.6 : Courbes d'aimantation pour diverses tailles et configurations typiques de spin pour les couplages d'échange $K_1 = 0.4, 0.5$ et 0.52 .

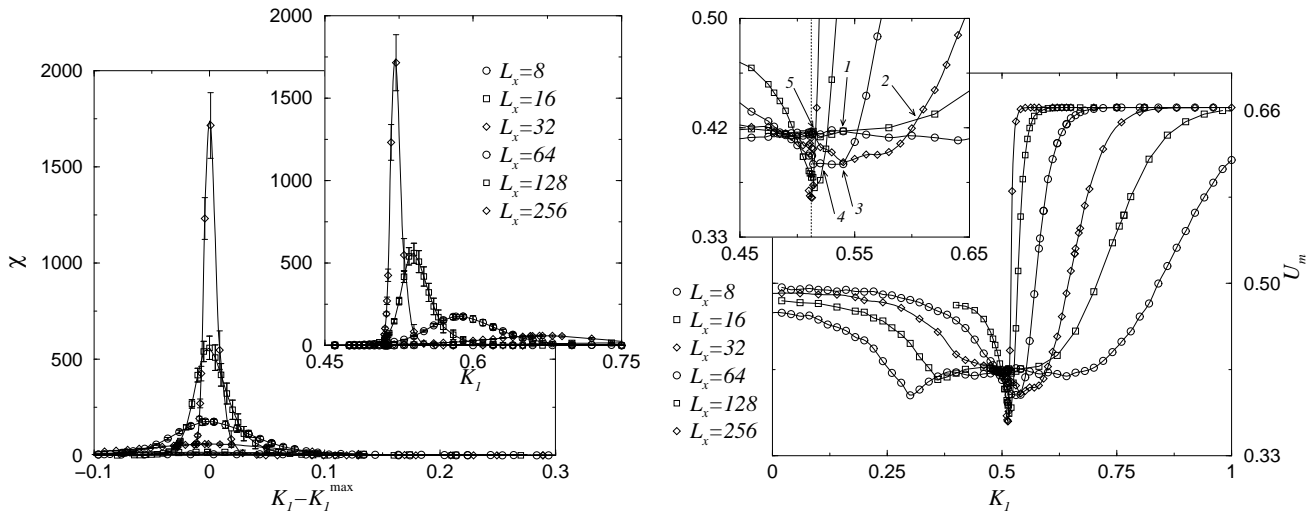


Figure 2.3.7 : Susceptibilité magnétique en fonction du couplage K_1 (insert) et de sa valeur réduite (à gauche) et cumulant de Binder en fonction du couplage K_1 (à droite) pour diverses tailles.

Séquence Paper-Folding

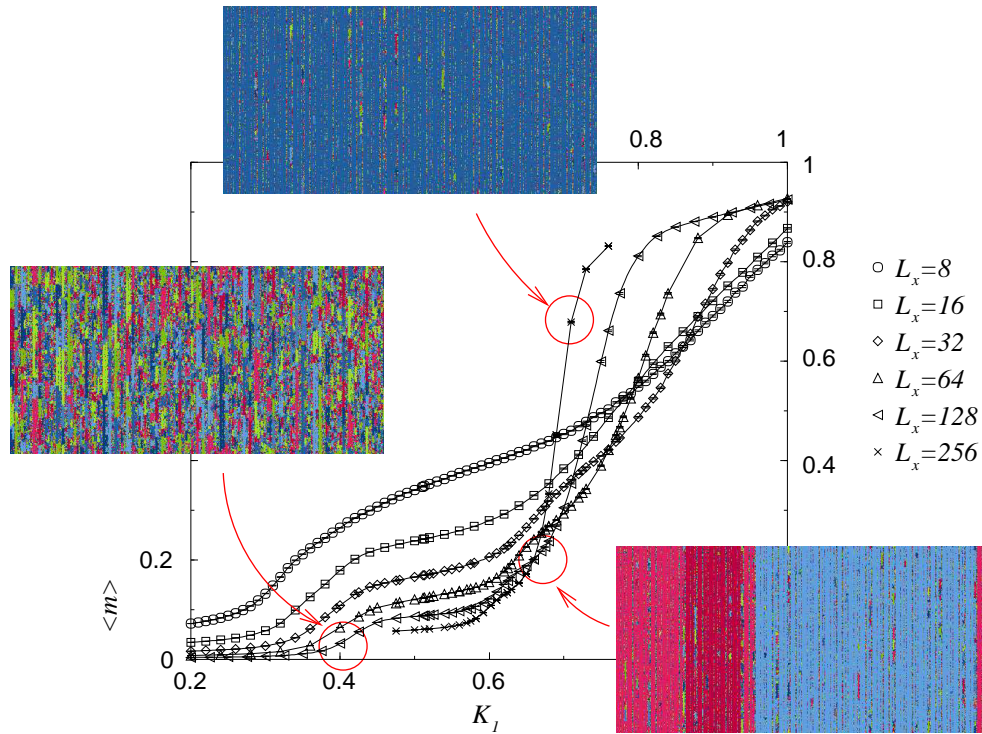


Figure 2.3.8 : Courbes d'aimantation pour diverses tailles et configurations typiques de spin pour les couplages d'échange $K_1 = 0.4, 0.67$ et 0.7 .

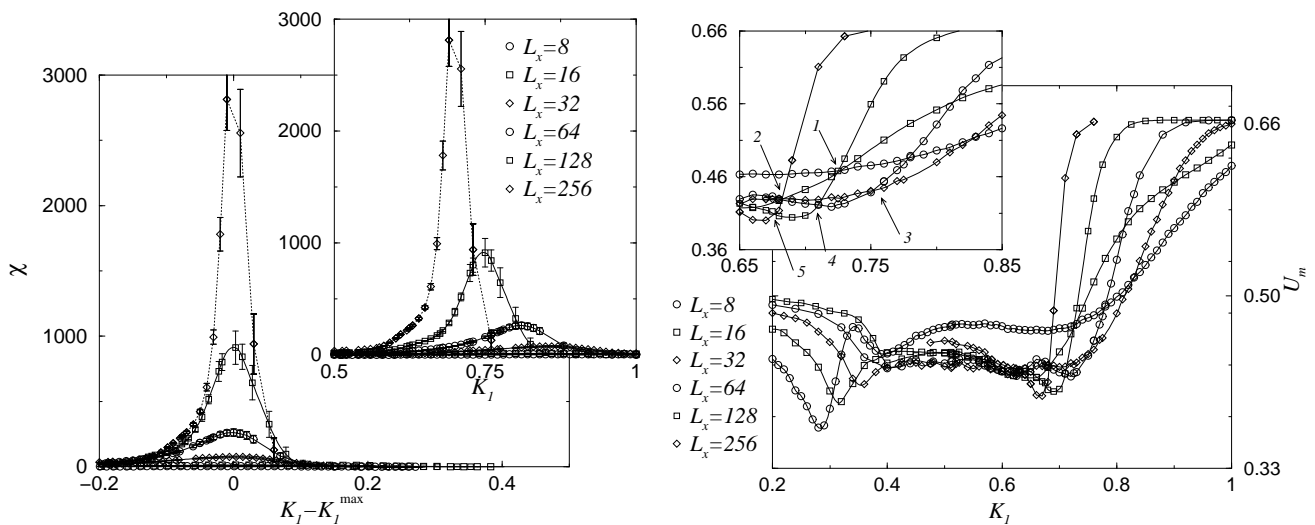


Figure 2.3.9 : Susceptibilité magnétique en fonction du couplage K_1 (insert) et de sa valeur réduite (à gauche) et cumulant de Binder du couplage K_1 (à droite) pour diverses tailles.

Séquence Three-Folding

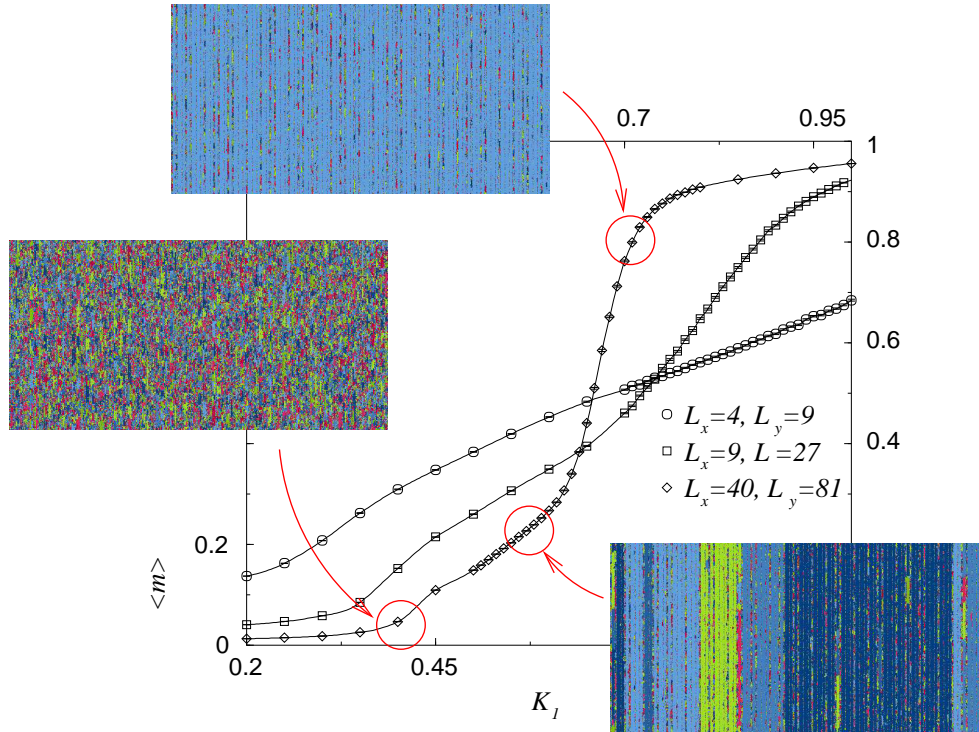


Figure 2.3.10 : Courbes d'aimantation pour diverses tailles et configurations typiques de spin pour les couplages d'échange $K_1 = 0.4, 0.57$ et 0.6 .

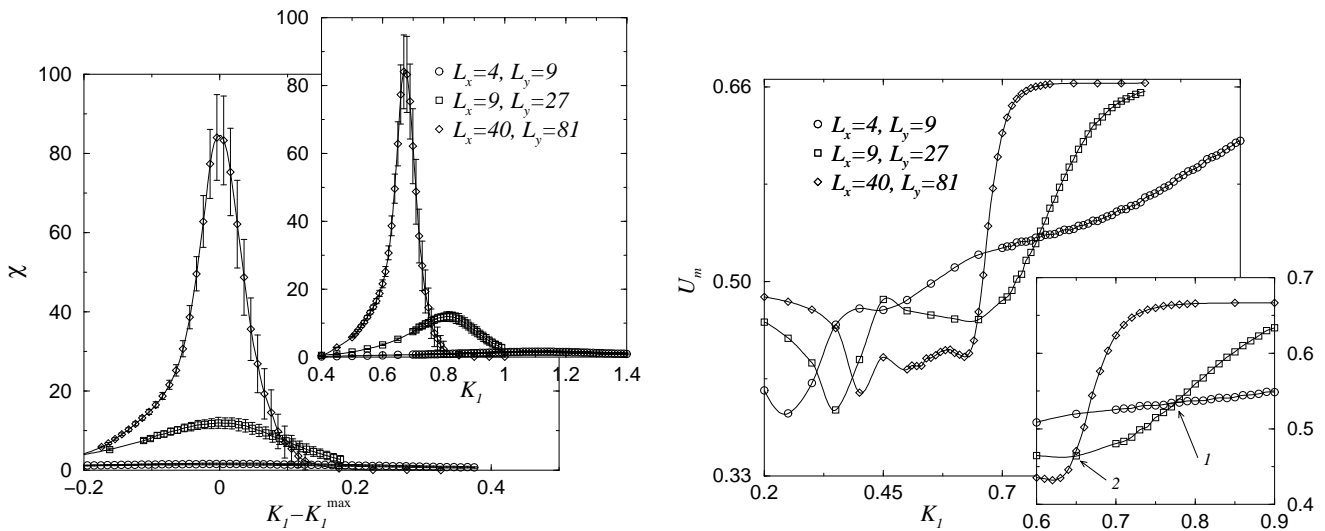


Figure 2.3.11 : Susceptibilité magnétique en fonction du couplage K_1 (insert) et de sa valeur réduite (à gauche) et cumulant de Binder du couplage K_1 (à droite) pour diverses tailles.

Séquence Rudin-Shapiro

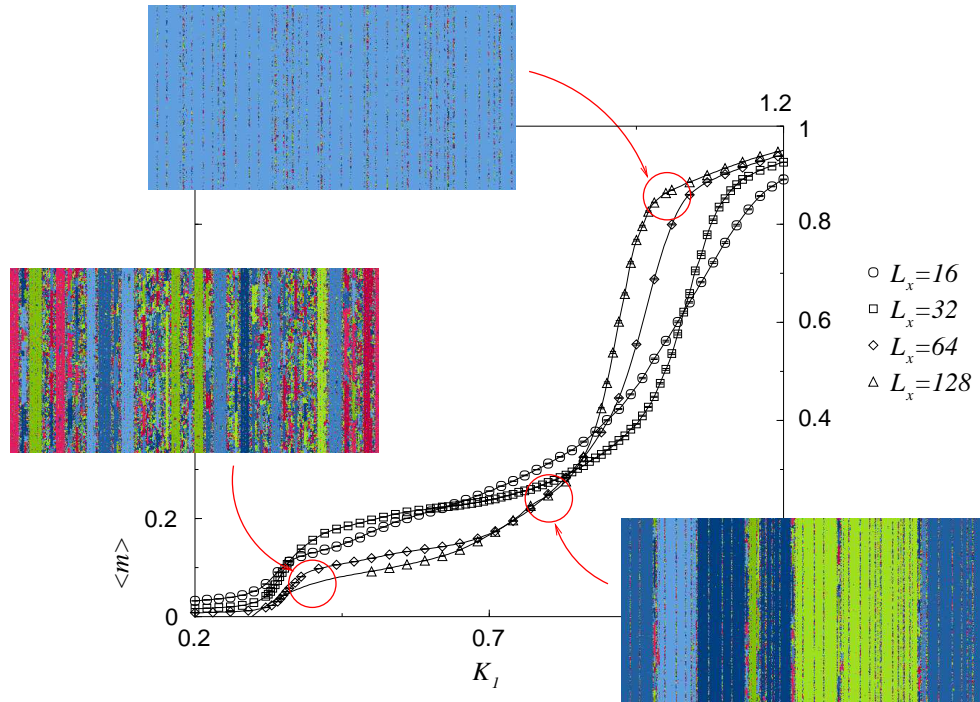


Figure 2.3.12 : Courbes d'aimantation pour diverses tailles et configurations typiques de spin pour les couplages d'échange $K_1 = 0.4, 0.8$ et 1 .

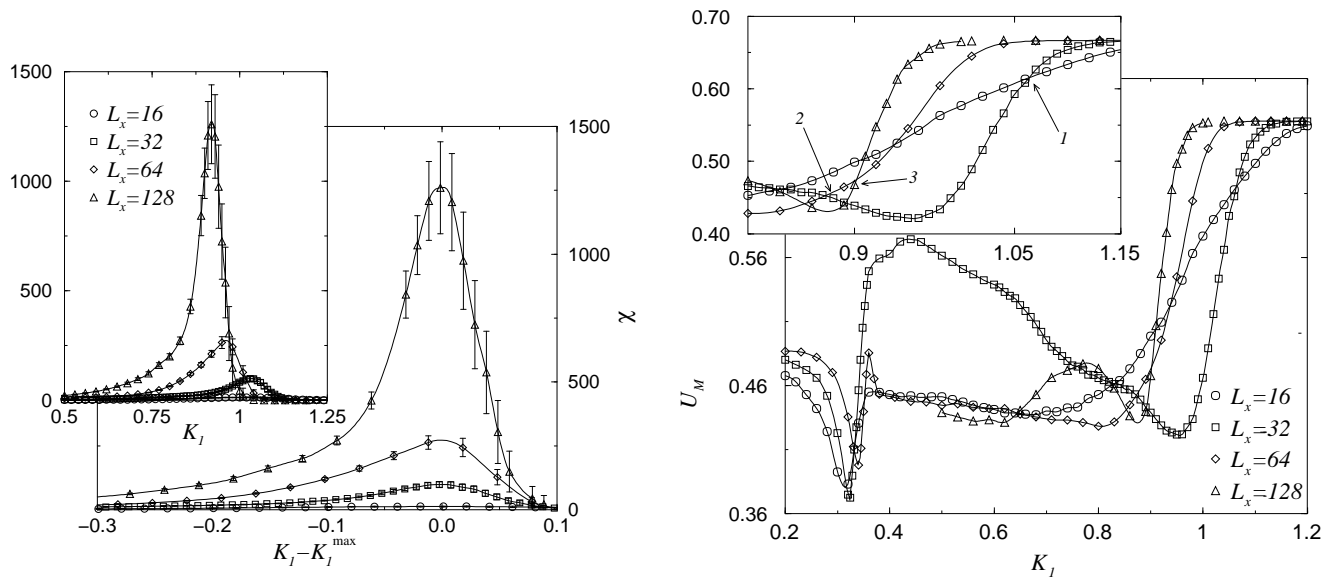


Figure 2.3.13 : Susceptibilité magnétique en fonction du couplage K_1 (insert) et de sa valeur réduite (à gauche) et cumulant de Binder du couplage K_1 (à droite) pour diverses tailles.

La situation est relativement claire pour les séquences périodique et Thue-Morse qui donnent lieu à une transition du premier ordre, mais malheureusement très confuse pour les autres séquences. Les courbes sont fortement tourmentées par la structure très inhomogène des systèmes étudiés ce qui rend impossible l'exploitation des croisements des courbes qui doivent asymptotiquement se confondre à la température de transition et pour une valeur universelle du cumulante de Binder. On notera pour toutes les séquences la présence d'un pic au voisinage de $K_1 \simeq 0.25$ qui disparaît à mesure que la taille du système augmente. La transition du modèle de Potts $q = 8$ homogène se produisant pour $K_c = \ln(1 + \sqrt{8}) \simeq 1.342$, il est probable que ce pic corresponde à une mise en ordre des couches de couplages forts $K_0 = 5K_1$. Cette hypothèse est corroborée par l'apparition d'un plateau dans les courbes d'aimantation à la même température pour les tailles les plus petites. La figure 2.3.3 illustre cette mise en ordre en plusieurs temps pour un système fini.

3.2.3. Exposants effectifs

Par dérivation de la relation d'homogénéité de la densité d'énergie libre (1.2.16), on peut montrer qu'aimantation et susceptibilité magnétique se comportent pour un système de taille finie L selon

$$m(L, t) = L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(Lt^\nu), \quad \chi(L, t) = L^{\gamma/\nu} \Xi(Lt^\nu) \quad (2.3.27)$$

où \mathcal{M} et Ξ sont des fonctions d'échelle universelles. Dans le cas d'un système anisotrope, ce qui est certainement le cas ici lorsque la transition devient du second ordre, la relation d'homogénéité de la densité d'énergie libre (1.2.16) se généralise à

$$f_{\text{sing}}(t, h, 1/L_x, 1/L_y) = b^{-d} f_{\text{sing}}(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b/L_x, b^z/L_y) \quad (2.3.28)$$

où z est l'exposant d'anisotropie. Le comportement avec L_x de l'aimantation et de la susceptibilité magnétique devient alors

$$\begin{aligned} m(1/L_x, 1/L_y, t) &= L_x^{-\beta/\nu} \tilde{\mathcal{M}}(L_x t^\nu, L_x^z/L_y), \\ \chi(1/L_x, 1/L_y, t) &= L_x^{\gamma/\nu} \tilde{\Xi}(L_x t^\nu, L_x^z/L_y), \end{aligned} \quad (2.3.29)$$

et exige de travailler à $L_y/L_x^z = \text{cste}$.

Notre objectif étant de tester la présence d'une transition du seconde ordre, nous nous limiterons à l'étude des quantités

$$X_L(t) = \frac{\ln m(L, t) - \ln m(L', t)}{\ln L - \ln L'}, \quad Y_L(t) = \frac{\ln \chi(L, t) - \ln \chi(L', t)}{\ln L - \ln L'} \quad (2.3.30)$$

définies à une température réduite t et une taille $L = L_x$ données avec un rapport $L_x/L_y = \text{cste}$. Si le système est anisotrope, les limites

$$\lim_{\substack{t \rightarrow 0, \\ L \rightarrow +\infty}} X_L(t) = - \left(\frac{\beta}{\nu} \right)^{\text{eff}}, \quad \lim_{\substack{t \rightarrow 0, \\ L \rightarrow +\infty}} Y_L(t) = \left(\frac{\gamma}{\nu} \right)^{\text{eff}} \quad (2.3.31)$$

correspondent à des exposants effectifs. Dans le cas d'une transition du premier ordre, l'hypothèse d'homogénéité de la densité d'énergie libre (2.3.28) n'est plus valable. Le volume de corrélation reste fini ce qui conduit aux exposants effectifs

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \lim_{t \rightarrow 0} X_L(t) = 0, \quad \lim_{L \rightarrow +\infty} \lim_{t \rightarrow 0} Y_L(t) = d \quad (2.3.32)$$

où d est la dimension de l'espace [84].

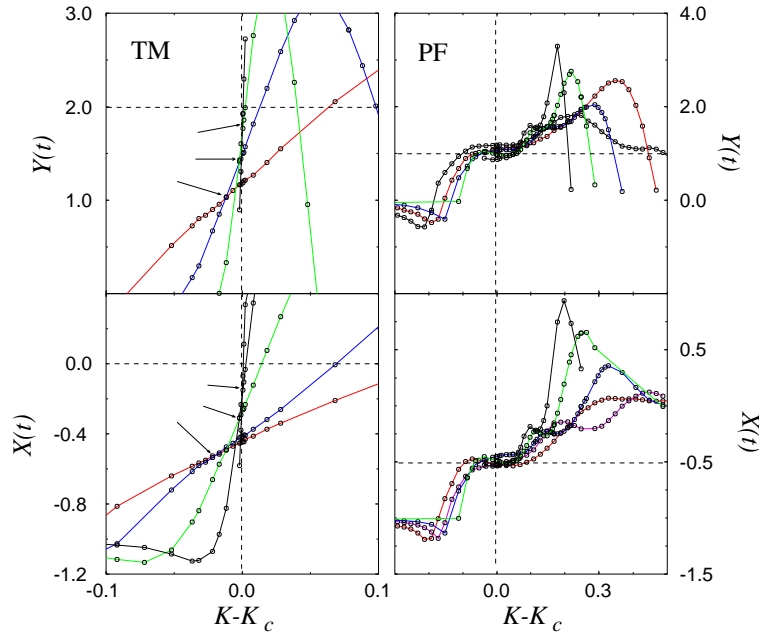


Figure 2.3.14 : Exposants effectifs associés à l'aimantation ($X_L(t)$) et à la susceptibilité magnétique ($Y_L(t)$) en fonction du couplage K_1 pour les séquences Thue-Morse (à gauche) et Paper-Folding (à droite). Deux systèmes de tailles L_x et $L'_x = 2L_x$ ont été utilisés pour le calcul de ces exposants effectifs. Les flèches indiquent la position des points de croisement des courbes.

Les exposants effectifs $X_L(t)$ et $Y_L(t)$ obtenus pour la séquence Thue-Morse (figure 2.3.14) sont compatibles avec l'hypothèse d'une transition du premier ordre alors que, conformément aux précédentes conclusions, les séquences Paper-Folding et Three-Folding semblent donner lieu à une transition du second ordre. La condition d'auto-dualité ne s'appliquant pas à la séquence Rudin-Shapiro, son point critique n'est pas connu exactement. L'importance des effets de taille finie ne nous a pas permis une estimation numérique suffisamment précise du point critique pour rendre possible une étude des exposants effectifs pour cette séquence.

3.3. Propriétés au point critique

Le calcul d'exposants effectifs suivant (2.3.30), avec une précision suffisante pour permettre une extrapolation dans la limite thermodynamique, requiert un temps de calcul qui nous était inaccessible. Nous avons de fait opté pour une étude des effets de taille finie au point critique du système infini. Une difficulté supplémentaire est engendrée par la méthode de construction des séquences aperiodiques qui n'autorise qu'un nombre restreint de tailles pour respecter la symétrie de dilatation (les tailles de

la forme $L_y = 2^n$ ou $L_y = 3^n$ pour Three-Folding). De plus, les effets d'anisotropie n'ont pas été pris en considération et donc les exposants critiques proposés ne sont que des exposants effectifs. Toutefois, ils permettent de distinguer une transition du premier ordre d'une transition continue. Il ne sera plus question dans la suite de la séquence Rudin-Shapiro dont le point critique n'est pas connu exactement.

Les simulations au point critique diffèrent peu de celles hors-criticalité, les différences essentielles étant la géométrie $L_x, L_y = 4L_x$ nécessaire pour atteindre des tailles plus importantes dans la direction de l'apériodicité et un nombre plus important d'itérations Monte Carlo (tableau 2.3.1). Afin de satisfaire aux contraintes sur le temps d'exécution imposées par les centres dotés de super-calculateurs, les calculs correspondent pour les tailles les plus grandes à plusieurs simulations en parallèle dont les résultats ont été ensuite moyennés.

Séquence	L_y	Nombre d'itérations	τ_e
Périodique	8 à 256	2.10^5 à 3.10^6	7.3 à 651.1
Thue-Morse	8 à 2048	1.10^5 à 4.10^6	6.7 à 141.4
Paper-Folding	8 à 2048	3.10^5 à 4.10^5	6.7 à 8.8
Three-Folding	3 à 2187	2.10^5 à $2.5.10^5$	4.5 à 18.2

Tableau 2.3.1 : Paramètres des simulations Monte Carlo utilisés pour l'étude des effets de taille finie au point critique.

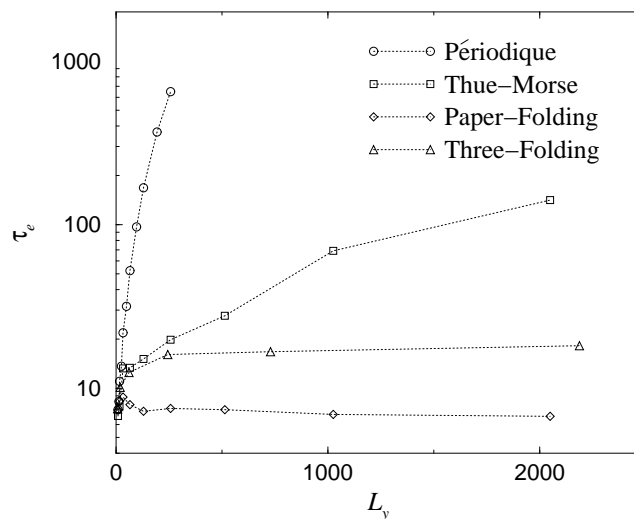


Figure 2.3.15 : Temps d'auto-corrélation τ_e de l'énergie en fonction de la taille du système.

Le comportement du temps d'auto-corrélation au point critique avec la taille du système est conforme aux précédentes conclusions : les séquences périodique et Thue-Morse présentent un temps d'auto-corrélation dont la divergence est exponentielle (5.1.66),

signe d'une transition du premier ordre, alors qu'elle est de type loi de puissance (5.1.39) pour Paper-Folding et Three-Folding (figure 2.3.15).

3.3.1. Effets de cross-over

Dans le cas du modèle d'Ising, les séquences Paper-Folding et Three-Folding sont marginales ce qui se traduit par une variation continue des exposants critiques avec l'amplitude de la perturbation. De tels effets peuvent également avoir pour origine un cross-over, comme c'est le cas pour le désordre homogène pour lequel existent des effets de cross-over fortement marqués avec les points fixes de type percolation et du système pur.

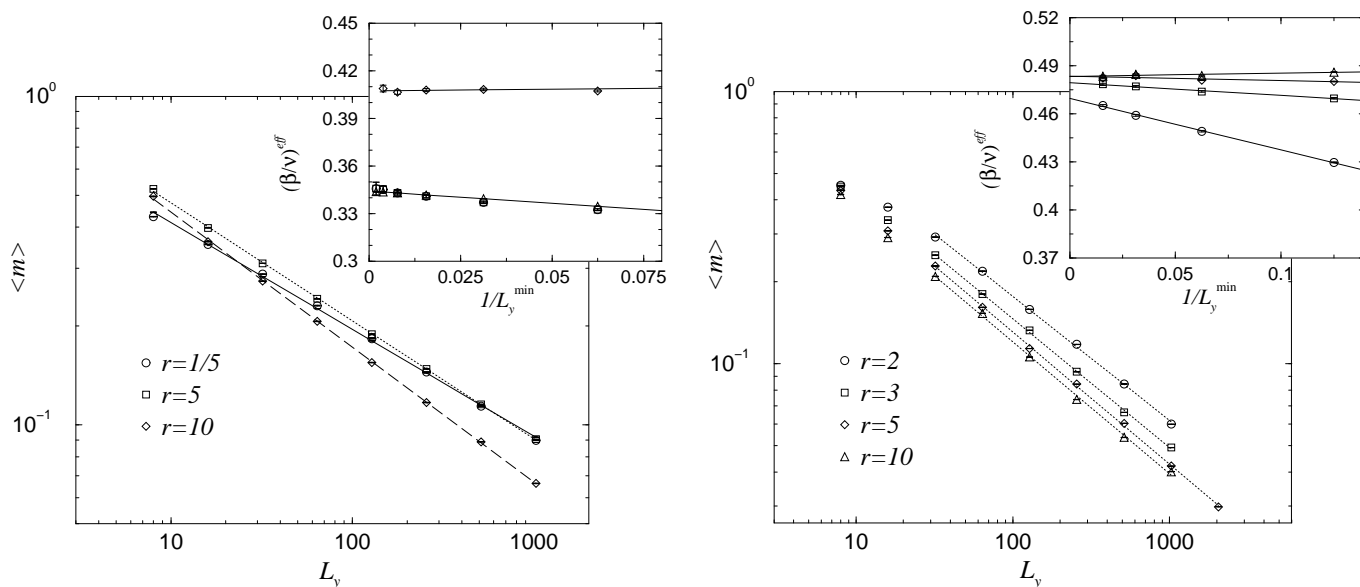


Figure 2.3.16 : Aimantation totale pour les modèles d'Ising (à gauche) et de Potts $q = 8$ (à droite) perturbés par la séquence Paper-Folding en fonction de la taille L_y du système. En insert, exposant effectif calculé par interpolation en loi de puissance à partir de L_y^{min} en fonction de $1/L_y^{\text{min}}$. Les diverses courbes correspondent à des amplitudes $r = K_0/K_1$ différentes.

Afin de tester l'influence de l'amplitude $r = K_0/K_1$ et de la comparer à l'effet du marginalisme attendu pour le modèle d'Ising, des calculs ont été réalisés à plusieurs valeurs de r pour les modèles de Potts $q = 8$ et d'Ising. Les résultats sont rassemblés sur la figure 2.3.16. Les inserts présentent les exposants effectifs $(\beta/\nu)^{\text{eff}}$ obtenus par interpolation de l'aimantation sur la gamme de tailles comprises entre L_y^{min} et la taille la plus grande. La présence de corrections au comportement en loi de puissance se manifeste par une dépendance de l'exposant effectif avec L_y^{min} . A noter que seules les tailles $L_y^{\text{min}} \leq 64$ sont représentées pour le modèle de Potts. Au-delà, l'interpolation est calculée sur un nombre insuffisant de points et l'exposant effectif est instable. Les amplitudes $r = 1/5$ et $r = 5$ ne diffèrent que par une inversion des couplages faibles et forts, ce qui, à un effet de surface près, ne doit pas modifier la valeur des exposants à cause de l'auto-dualité du système. La figure 2.3.16 suggère pour le modèle de Potts un effet de cross-over plutôt que de marginalisme de la perturbation. En effet, les exposants effectifs pour $r = 5$ et $r = 10$ convergent vers une même limite thermodynamique.

3.3.2. Propriétés critiques magnétiques

Afin de tenir compte d'éventuelles corrections d'échelle, dont la forme analytique n'est a priori pas connue, nous utilisons une série d'interpolations en loi de puissance pour les tailles $L \geq L_{\min}$. L'exposant effectif $x_{\sigma}^b(L_{\min})$ obtenu est ensuite extrapolé dans la limite $L_{\min} \rightarrow +\infty$. Cette technique a été systématiquement appliquée à toutes les séquences. Les exposants présentés dans la suite et rassemblés dans les tableaux 2.3.2 à 2.3.5 sont le résultat d'une interpolation quadratique des exposants effectifs en fonction de $1/L_y^{\min}$. Deux types d'effets rendent difficile voire impossible l'extrapolation des exposants effectifs. Lorsque les effets de cross-over sont trop marqués, un polynôme de degré deux ne suffit pas à reproduire fidèlement la courbe d'exposants effectifs. Or, si un degré supérieur permet une meilleure estimation de l'exposant critique, il introduit également une plus grande instabilité de l'interpolation qui se traduit par une variance plus importante des résultats. De tels effets de cross-over sont présents pour la séquence Thue-Morse comme le montrent les figures 2.3.17 et 2.3.18 et il faut atteindre une taille de cross-over L_y^* (1.2.34) avant que le régime de premier ordre ne soit observé. Lorsque cette situation se présente, seule la valeur correspondant aux exposants effectifs calculés sur les trois plus grandes tailles (et non plus extrapolés) est reportée entre crochets dans le tableau 2.3.3.

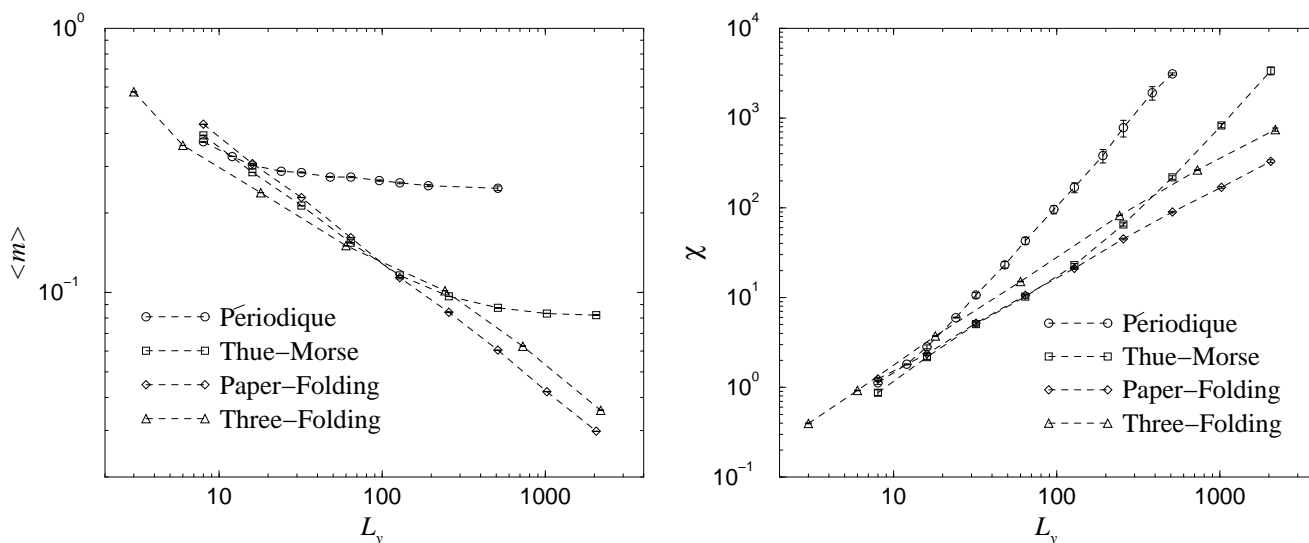


Figure 2.3.17 : Aimantation (à gauche) et susceptibilité magnétique (à droite) en fonction de la taille L_y pour $r = 5$. On notera les effets de cross-over importants sur les quantités associées aux transitions du premier ordre.

D'autre part, des corrections d'échelle présentant un comportement oscillant sont parfois observées lorsque deux échelles d'énergie interviennent dans le système [127]. C'est le cas des séquences a périodiques et ces corrections, dont la figure 2.3.19 présente un exemple, ne permettent pas une interpolation suivant le schéma jusqu'ici utilisé. Cette situation se produit pour la séquence Three-Folding et sera marquée de l'abréviation "osc." dans le tableau 2.3.5.

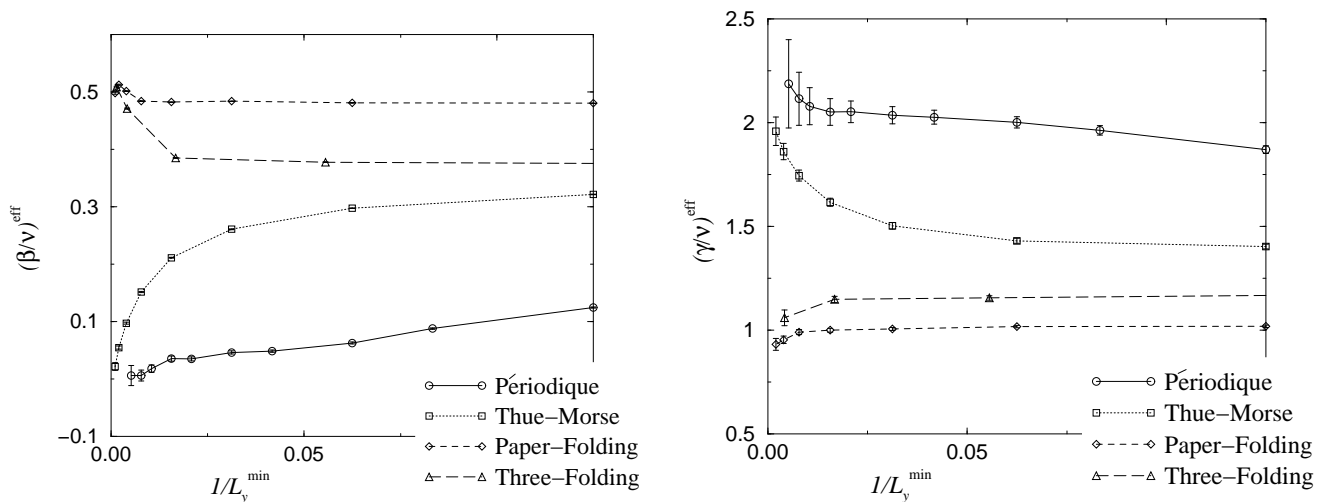


Figure 2.3.18 : Exposants effectifs $(\beta/\nu)^{\text{eff}}$ (à gauche) et $(\gamma/\nu)^{\text{eff}}$ (à droite) avec l'inverse de la taille minimale L_y^{min} entrant dans l'interpolation pour $r = 5$.

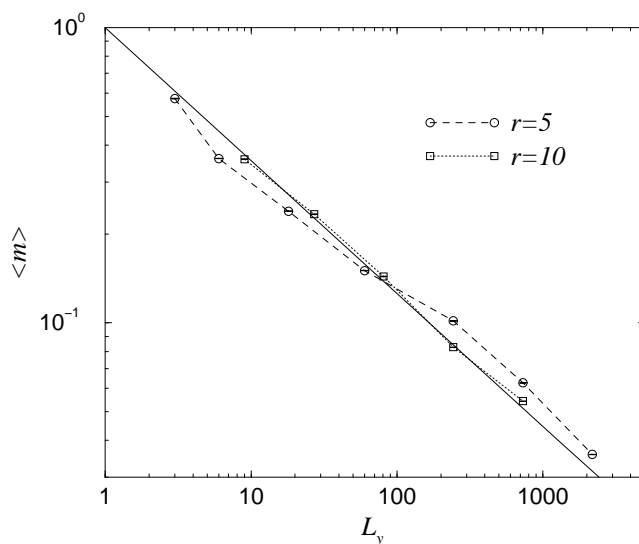


Figure 2.3.19 : Aimantation au point critique en fonction de la taille du système pour la séquence Three-Folding. On notera la présence d'une correction au comportement en loi de puissance qui semble oscillante. La droite correspond à une loi de puissance d'exposant 0.45.

Séquences induisant une transition du premier ordre

On s'attend dans le cas d'une transition du premier ordre à observer les exposants effectifs $(\beta/\nu)^{\text{eff}} = 0$ et $(\gamma/\nu)^{\text{eff}} = d$ avec la taille du système. Les résultats obtenus pour les séquences périodique et Thue-Morse sont conformes à ces prédictions (tableaux 2.3.2 et 2.3.3) et constituent une forte présomption de l'existence d'une transition du premier ordre.

	$r = 1/5$	$r = 5$	$r = 10$
$(\beta/\nu)^{\text{eff}}$	0.047(5)	0.019(3)	0.006(3)
$(\gamma/\nu)^{\text{eff}}$	2.02(10)	2.06(5)	2.082(7)

Tableau 2.3.2 : Exposants effectifs pour la séquence périodique.

	$r = 1/5$	$r = 5$	$r = 10$
$(\beta/\nu)^{\text{eff}}$	[0.055(6)]	[0.022(7)]	[0.228(2)]
$(\gamma/\nu)^{\text{eff}}$	[1.96(15)]	[2.03(16)]	[1.55(6)]

Tableau 2.3.3 : Exposants effectifs pour la séquence Thue-Morse. Les valeurs entre crochets signalent des estimations sur les trois plus grandes tailles.

Séquences induisant une transition du second ordre

Les exposants critiques obtenus pour les séquences Paper-Folding et Three-Folding (tableaux 2.3.4 et 2.3.5) confirment l'existence d'une transition du second ordre induite par la perturbation aperiodique.

	$r = 1/5$	$r = 2$	$r = 3$	$r = 5$	$r = 10$
β/ν	[0.4938(9)]	[0.486(1)]	0.492(2)	0.4908(3)	0.4654(6)
γ/ν	1.002(12)	1.07(1)	0.984(5)	0.975(8)	0.959(3)

Tableau 2.3.4 : Exposants critiques pour la séquence Paper-Folding.

	$r = 1/5$	$r = 5$	$r = 10$
β/ν	<i>osc.</i>	<i>osc.</i>	<i>osc.</i>
γ/ν	0.96(2)	1.07(1)	1.14(3)

Tableau 2.3.5 : Exposants critiques pour la séquence Three-Folding.

La figure 2.3.19 montre que la composante non oscillante de l'aimantation pour la séquence Three-Folding est une loi de puissance d'exposant proche de 0.45.

3.3.3. Propriétés thermiques critiques

L'existence d'une partie régulière présentant une dépendance avec la taille du système rend difficile l'application directe de la méthode des effets de taille finie à l'énergie. Il est néanmoins possible d'annuler les premiers termes du développement en $1/L$ de la partie régulière. Notons $e_{l/r}(L)$ la densité d'énergie au point critique à une taille L et avec des conditions aux limites l à gauche et r à droite. La partie régulière

comporte un terme de volume $e^{\text{vol.}}$ indépendant des conditions aux limites et deux termes surfaciques à gauche et à droite $e_{l/r}^{\text{surf.}}$:

$$e_{l/r}(L) = e^{\text{vol.}} + [e_l^{\text{surf.}}(L) + e_r^{\text{surf.}}(L)] \frac{1}{L} + \mathcal{A}_{l/r} L^{-(1-\alpha)/\nu} + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (2.3.33)$$

La géométrie cylindrique choisie est caractérisée par un caractère d'Euler nul ce qui assure l'annulation des corrections logarithmiques habituellement présentées par la densité d'énergie libre et donc d'énergie ^[39]. La combinaison linéaire

$$\begin{aligned} \Delta e &= e_{FF} + e_{ff} - e_{fF} - e_{Ff} \\ &= [\mathcal{A}_{FF} + \mathcal{A}_{ff} - \mathcal{A}_{fF} - \mathcal{A}_{Ff}] \cdot L^{-(1-\alpha)/\nu} + \mathcal{O}(1/L^2) \end{aligned} \quad (2.3.34)$$

des densités d'énergie avec conditions Fixe-Fixe (e_{FF}), Libre-Libre (e_{ff}), Libre-Fixe (e_{fF}) et Fixe-Libre (e_{Ff}) ne possède pas de partie régulière aux deux premiers ordres en $1/L$. Il est donc en principe possible de distinguer un exposant $(1-\alpha)/\nu$ supérieur à -2 . Le calcul d'exposants effectifs pour une gamme de tailles $L \geq L_{\min}$ données puis leur extrapolation dans la limite $L_{\min} \rightarrow +\infty$ conduit dans le cas de la séquence Paper-Folding à

$$\frac{1-\alpha}{\nu} \simeq 0.979(14). \quad (2.3.35)$$

En ce qui concerne la séquence Three-Folding, la présence de corrections oscillantes ne permet pas d'interpolation.

4. Conclusion

Nous avons présenté une étude du modèle de Potts bidimensionnel perturbé par une modulation des couplages d'échange d'une rangée à la suivante. Dans le cas d'une distribution aléatoire de couplages, le désordre entraîne le système vers un même point fixe désordonné pour toutes les valeurs de q , notamment dans le régime du premier ordre du système pur ($q > 4$). Nos résultats numériques confirment les prédictions de Senthil et Majumdar ^[206] obtenues par le groupe de renormalisation. Nous avons également montré qu'une distribution aperiodique des couplages d'échange adoucit une transition du premier ordre et peut la rendre continue lorsque la divergence de ses fluctuations géométriques est suffisamment rapide. Alors que la transition du modèle de Potts $q = 8$ reste du premier ordre sous l'influence de la séquence Thue-Morse ($\omega = -\infty$), nos résultats numériques montrent le passage à une transition du second ordre pour les séquences Paper-Folding et Three-Folding ($\omega = 0$). On peut alors conjecturer une généralisation du critère de Luck aux transitions du premier ordre pour lequel l'exposant de cross-over devient $\phi = 1 + (\omega - 1)/d$, c.à.d. où l'exposant ν a été remplacé par $1/d$.

Chapitre 3

DÉSORDRE BIDIMENSIONNEL HOMOGENÈ

1. Introduction

Nous présentons une étude de l'influence d'un désordre homogène couplé à la densité d'énergie dans le modèle de Potts à q états en dimension $d = 2$. Le cas marginal du modèle d'Ising ($q = 2$) a été très largement étudié et son comportement critique est désormais connu. Le régime $2 < q \leq 4$, de second ordre dans le cas homogène, a été exploré au moyen de calculs perturbatifs. Le régime de premier ordre ($q > 4$) n'est quant à lui au centre des investigations que depuis la mise en évidence en 1992 d'une transition du second ordre induite par le désordre. Les principaux résultats sont rassemblés dans une première partie bibliographique. Nous nous intéressons dans un premier temps à la classe d'universalité du modèle de Potts désordonné dans le régime $q > 4$. Nous montrons au moyen de simulations Monte Carlo combinées à une étude des effets de taille finie que le modèle de Potts à $q = 8$ états n'appartient pas à la classe d'universalité du modèle d'Ising, comme cela avait été suggéré par Chen *et al.* ^[49, 50]. Nous montrons par la suite que les expressions des profils et des fonctions de corrélation prédits par l'invariance conforme sont compatibles avec les résultats numériques pour le modèle de Potts désordonné. Nous proposons une estimation des exposants critiques mettant à profit ces résultats issus de projections conformes dans des géométries adaptées aux calculs numériques. Enfin, nous présentons une comparaison des résultats numériques avec les développements perturbatifs au voisinage de $q = 2$. L'accent sera mis sur la question de la multifractalité, de l'universalité et sur la possibilité d'une brisure spontanée de la symétrie des répliques.

1.1. Modèle d'Ising désordonné

L'intérêt pour les systèmes désordonnés s'est développé au cours des années '60 et l'existence d'une solution exacte du modèle d'Ising homogène ^[177] a focalisé une grande partie de l'attention vers ce modèle. Des études ont mis en évidence, au moyen d'un développement haute température de l'énergie libre, la diminution de la température critique avec la concentration en impuretés ^[196]. Lorsque le désordre est modélisé par une dilution de site ou de liaison, la transition disparaît en dessous du seuil de percolation.

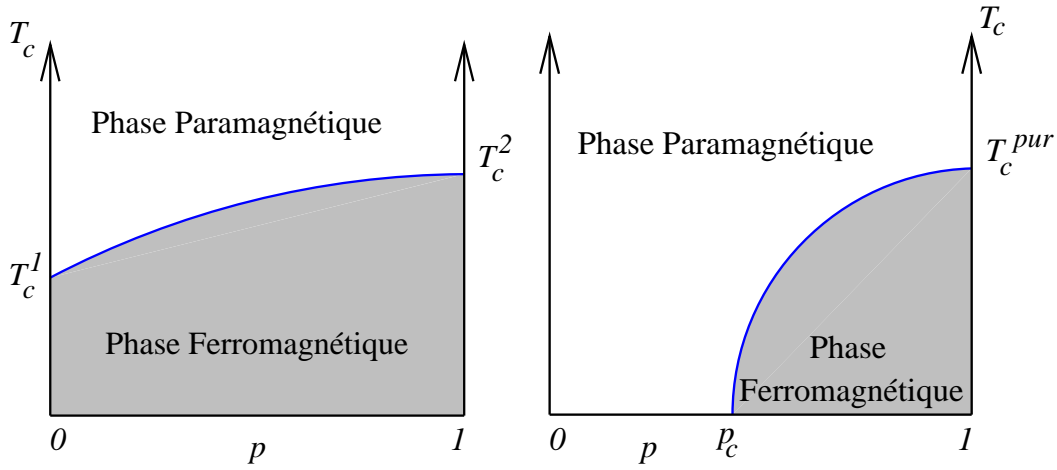


Figure 3.1.1 : Diagrammes de phase pour un désordre modélisé par une distribution binaire de couplages K_1 et K_2 de concentrations respectives p et $1 - p$ (à gauche) et pour un désordre de dilution de concentration p (à droite).

La divergence logarithmique ($\alpha = 0$) de la chaleur spécifique du modèle d'Ising homogène bidimensionnel ne permet pas au critère de Harris (Chapitre 1, paragraphe 4.3.1) de trancher quant à la pertinence du désordre. L'introduction en physique statistique des techniques basées sur le groupe de renormalisation a ouvert la voie dans les années '70 à l'étude des propriétés critiques du modèle $O(n)$ désordonné [95]. Il apparaît au premier ordre en $\epsilon = 4 - d$ un nouveau point fixe stable qui est repoussé à l'infini dans le cas du modèle d'Ising ($n = 1$) bidimensionnel. Il s'en est suivi une courte controverse opposant d'une part les partisans d'un comportement gouverné par le point fixe du modèle d'Ising homogène [95] et d'autre part ceux suggérant la disparition des singularités en l'interprétant comme le signe d'une transition du premier ordre [92] ou comme le fait d'une transition adoucie [143]. Un nouveau point fixe stable a été identifié au premier ordre en $\sqrt{\epsilon}$ peu de temps après (1975) [128] avec des exposants critiques différents de ceux du modèle d'Ising homogène [93, 121, 209] :

$$\eta = -\frac{\epsilon}{106} + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad \nu = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left[\frac{6\epsilon}{53} \right]^{1/2} + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (3.1.1)$$

Les simulations Monte Carlo du modèle d'Ising dilué, que ce soit dans le cas de la dilution de site [52, 215, 135] ou dans celui de la dilution de liaison [239], étaient alors trop peu précises pour permettre de distinguer une éventuelle variation des exposants critiques. Le recours au groupe de renormalisation dans l'espace direct ne permit pas non plus une détermination précise des exposants critiques [122, 234].

L'existence d'un nouveau point fixe stable a été de nouveau démontrée en 1981 par Dotsenko et Dotsenko en utilisant l'équivalence du modèle d'Ising désordonné avec un modèle de Gross-Neveu dans la limite de $n \rightarrow 0$ composante [63, 64, 65]. La statistique du modèle d'Ising désordonné est gouvernée par la densité lagrangienne d'un gaz parfait de fermions avec une masse aléatoire. La méthode des répliques fait apparaître une interaction à quatre fermions dont l'intensité g_0 est proportionnelle à la largeur de la distribution de désordre. Ce type de modèle est renormalisable en dimension $d = 2$. Dotsenko et Dotsenko ont déterminé le comportement critique des

grandeurs thermiques et notamment mis en évidence l'existence d'un cross-over avec l'amplitude g_0 du désordre :

$$C \sim \frac{1}{g_0} \ln \left[1 + \frac{4g_0}{\pi} \ln \frac{1}{|t|} \right] \sim \begin{cases} \ln \frac{1}{|t|}, & t \gg e^{-\pi/4g_0} \\ \ln \ln \frac{1}{|t|}, & t \ll e^{-\pi/4g_0} \end{cases} \quad (3.1.2)$$

où $t = (T - T_c)/T_c$ est la température réduite. Par la suite, Shalaev montra la stabilité du point fixe homogène ^[207, 208] ; le désordre est marginalement non pertinent et ne se manifeste que par la présence de corrections logarithmiques :

$$\chi \sim t^{-7/4} (\ln |t|)^{7/8}. \quad (3.1.3)$$

La décroissance asymptotique des fonctions de corrélation spin-spin et de ses moments :

$$\overline{\langle \sigma(0)\sigma(r) \rangle^n} \sim r^{-n/4} (\ln r)^{n(n-1)/8} \quad (3.1.4)$$

a été calculée par Ludwig ^[147] et confirmée par Shankar ^[210]. Les exposants critiques prédits par Shalaev ont été reproduits par un calcul de renormalisation perturbative à l'ordre à quatre boucles ^[156]. Des résultats exacts ont également été obtenus pour le modèle d'Ising avec dilution de site et montrent en particulier un comportement en double logarithme de la chaleur spécifique, identique à celui du problème de liaisons ^[187]. Des simulations Monte Carlo ^[224, 7, 225, 204, 218] ainsi que des calculs par matrices de transfert ^[90, 194, 195] ont confirmé les prédictions théoriques de Shalaev, Shankar et Ludwig. L'hypothèse d'une universalité faible ^[130, 131], c.à.d. d'une variation des exposants critiques ν et γ avec l'amplitude du désordre laissant η inchangé ^[216], a été écartée ^[1, 2, 8, 157]. Récemment, une détermination de l'exposant 7/8 de la correction logarithmique de la susceptibilité magnétique par un développement en série a apporté une nouvelle confirmation des résultats de Shalaev, Shankar et Ludwig ^[198, 199].

Les propriétés critiques de surface n'ont été étudiées que plus récemment par Selke *et al.* qui proposent sur la base de simulations Monte Carlo un exposant magnétique de surface $\beta_1 = 1/2$ identique à celui du système homogène ^[205]. Des résultats similaires ont été obtenus en utilisant une technique exacte basée sur la transformation étoile-triangle ^[104].

1.2. Modèle de Potts à 3 et 4 états

L'exposant α de la chaleur spécifique étant positif lorsque $q > 2$, on doit s'attendre d'après le critère de Harris à observer un nouveau comportement critique en présence de désordre. Les premières études, fondées sur des méthodes approchées dont notamment la renormalisation dans l'espace direct "à la Migdal-Kadanoff" ^[132, 6] ou la renormalisation sur réseau hiérarchique ^[60], suggéraient, en accord avec le critère de Harris, une évolution des exposants critiques avec le nombre d'états q .

Par la suite, Ludwig explora les propriétés critiques du modèle de Potts désordonné au voisinage du point fixe du modèle d'Ising en utilisant un développement perturbatif à l'ordre à deux boucles en $q - 2$ mettant à profit la théorie conforme ^[146]. Il a notamment

calculé l'exposant thermique de la longueur de corrélation qui, pour le modèle de Potts à 3 états, prend la valeur $\nu \simeq 1.02$ et montré que η restait inchangé. L'hypothèse d'une universalité faible, étayée par des résultats de simulations Monte Carlo, a alors été suggérée par certains auteurs ^[129]. L'exposant ν proposé par Ludwig est en bon accord avec celui qu'avait calculé numériquement Glaus en utilisant très tôt dans le contexte des systèmes bidimensionnels désordonnés la technique de matrice de transfert ^[90]. Le calcul perturbatif de Ludwig donne également accès à la charge centrale ^[149]. Il a été par la suite étendu à l'ordre à trois boucles par Dotsenko, Picco et Pujol ^[72, 73, 74] qui ont utilisé la représentation du gaz de Coulomb des théories conformes. Ils ont montré qu'une faible déviation de l'exposant magnétique par rapport à celui du système pur apparaît à l'ordre à trois boucles :

$$\eta \simeq 4/15 + 0.00264 = 0.26931. \quad (3.1.5)$$

Par la suite, Dotsenko, Dotsenko, Picco et Pujol ont montré que ces résultats n'étaient valables que si le couplage entre répliques reste constant ^[69]. En effet, l'existence d'une brisure spontanée de la symétrie entre les répliques entraîne l'apparition d'un nouveau point fixe stable caractérisé par $\nu \simeq 1 + \mathcal{O}(\epsilon^3)$ où ϵ est un paramètre perturbatif relié à $q - 2$. Une tentative ultérieure de vérification des prédictions théoriques de Dotsenko *et al.* pour le modèle de Potts à 3 états s'est heurtée à des obstacles numériques ^[184]. La question n'a été tranchée en faveur d'une absence de brisure spontanée de la symétrie entre les répliques que très récemment ^[68].

Les exposants critiques du modèle de Potts à 4 états ont été mesurés expérimentalement ^[203] :

$$\nu = 1.03(8), \quad \gamma = 1.68(15) \quad (3.1.6)$$

et sont compatibles, dans les barres d'erreur, avec ceux du modèle d'Ising pur ($\nu = 1$ et $\gamma = 1.75$). L'hypothèse selon laquelle le point fixe désordonné prédit par le critère de Harris serait celui du modèle d'Ising homogène quelque soit le système avait été avancée en 1984 à la suite d'études perturbatives ^[66, 67, 62] du modèle de Baxter (modèle d'Ising avec une interaction à quatre spins) suivies de simulations Monte Carlo ^[155]. L'idée d'une super-universalité du modèle de Potts désordonné avec le modèle d'Ising homogène a été confortée par une étude des propriétés des interfaces sur réseau hiérarchique ^[126]. La non-pertinence observée des bulles se formant sur une interface limite à deux le nombre des états du modèle de Potts jouant un rôle effectif lors de la transition. De plus, une simulation Monte Carlo du modèle d'Ashkin-Teller (deux plans d'Ising couplés par une interaction énergie-énergie) désordonné montre des exposants critiques proches de ceux du modèle d'Ising sur toute la ligne critique et notamment au point appartenant à la classe d'universalité du modèle de Potts à 4 états dans le cas homogène ^[230]. Le recours à un calcul basé sur des matrices de transfert a permis de clarifier la situation et de trancher en faveur d'une nouvelle classe d'universalité pour les modèles de Potts à $q = 3$ et 4 états conformément aux prédictions des calculs perturbatifs ^[38, 112].

1.3. Modèle de Potts $q > 4$

On sait depuis une vingtaine d'années que le désordre peut adoucir une transition du premier ordre au point de la rendre continue. Toutefois, une telle modification de

l'ordre de la transition n'a été observée que récemment par Chen, Ferrenberg et Landau lors d'une simulation Monte Carlo du modèle de Potts à 8 états en présence de désordre de liaisons ^[49, 50]. Le passage à une transition continue a également été observé depuis dans le cas du modèle de Potts sur les graphes de la théorie en φ^3 qui présente un intérêt en gravité quantique ^[117]. Un désordre modélisé par un réseau aléatoire poissonien n'est en revanche pas assez fort pour modifier l'ordre de la transition ^[119, 120]. Dans un travail numérique précurseur, Chen *et al.* ont calculé les exposants critiques associés à la transition du second ordre du modèle de Potts $q = 8$ désordonné. Leurs résultats, en accord avec ceux du modèle d'Ising, ont longuement accrédité l'idée d'une super-universalité des propriétés critiques du modèle de Potts désordonné pour toutes les valeurs de q . L'analyse de Kardar *et al.* ^[126] offrait une justification heuristique à cette hypothèse. De plus, Cardy montra que le système formé de n plans d'Ising couplés par leur densité d'énergie est un exemple de modèle présentant dans le cas homogène une transition du premier ordre, moins marquée que celle du modèle de Potts et qui sous l'influence du désordre donne lieu à une transition continue dans la classe d'universalité du modèle d'Ising ^[36]. La théorie est alors décrite pour toute valeur de n par le point fixe associé à n plans d'Ising décorrélés.

Auteurs	Date	Technique	β/ν
Chen, Ferrenberg et Landau ^[49]	1992	Monte Carlo	0.118(8)
Cardy et Jacobsen ^[38]	Mai 1997	Mat. transfert	0.142(1)
Chatelain et Berche ^[42]	Oct. 1997	Monte Carlo	0.153(3)
Picco ^[186]	Fév. 1998	Monte Carlo	0.153(1)
Chatelain et Berche ^[43, 15]	Oct. 1998	Monte Carlo	0.1499(1)
		Mat. transfert	0.1496(9)
Chatelain et Berche ^[44]	Fév. 1999	Mat. transfert	0.1505(31)
		Monte Carlo	0.152(3)
		Monte Carlo	0.1487(32)
Olson et Young ^[176]	Mars 1999	Monte Carlo	0.159(3)
Jacobsen et Picco ^[113]	Oct. 1999	Mat. transfert	0.1535(10)
Ying et Harada ^[235]	Jan. 2000	Monte Carlo	0.151(3)

Tableau 3.1.1 : Chronologie des exposants magnétiques du modèle de Potts à 8 états en présence d'un désordre de liaisons. La date correspond à la première publication sur le serveur de preprint <http://arXiv.org> ou, à défaut, dans une revue traditionnelle.

Par la suite, Picco montra que la charge centrale du modèle de Potts désordonné était voisine de celle de n plans d'Ising décorrélés ($c(n) = n/2$) lorsque le nombre d'états était de la forme $q = 2^n$ ^[185]. Il proposa la loi de factorisation

$$c(q_1 \times q_2) = c(q_1) + c(q_2) \quad (3.1.7)$$

c.à.d. un comportement logarithmique de la charge centrale $c(q)$ avec le nombre d'états q . Toutefois, les résultats de Chen *et al.* ont depuis été contredits par de nombreux auteurs et un consensus s'est établi en faveur d'une nouvelle classe d'universalité [37]. Comme dans les cas $q = 3$ et $q = 4$, Cardy et Jacobsen montrèrent au moyen de calculs de matrices de transfert qu'à chaque valeur de q correspond une nouvelle classe d'universalité [38, 112]. Leurs résultats mettent en évidence une augmentation monotone de l'exposant magnétique $x_\sigma^b = \beta/\nu$ avec q . La dépendance de l'exposant de la longueur de corrélation avec q n'a été vérifiée numériquement que très récemment [110]. De nombreuses études numériques ont par la suite confirmé ces résultats et affiné la valeur des exposants (tableau 3.1.1) tout en prenant en compte de plus en plus de sources d'erreurs possibles. L'influence du type de désordre a également fait l'objet d'une récente étude numérique qui montre pour le modèle de Potts $q = 5$ que les exposants critiques sont identiques, dans les barres d'erreur, en présence de dilution de site et avec une distribution binaire de couplages d'échange [180].

2. Propriétés critiques du modèle de Potts $q = 8$ désordonné

Cette section reprend l'étude des propriétés critiques de volume du modèle de Potts désordonné à 8 états publiée dans la référence [42] qui a marqué le début de notre intérêt pour ce système. Nous présenterons dans un premier temps les détails des simulations Monte Carlo auxquelles nous avons eu recours. La deuxième partie sera consacrée aux arguments qui montrent l'apparition en présence de désordre d'une transition du second ordre. La présentation de la détermination des exposants critiques de volume par l'étude des effets de taille finie constituera une partie importante de cette section. Les données présentées ici ont été analysées avec de nouvelles techniques tenant compte de manière plus précise des incertitudes numériques. De ce fait, les résultats diffèrent légèrement de ceux de la référence [42]. Dans la dernière partie, il sera fait mention de résultats obtenus concernant le comportement critique de surface.

2.1. Détails des simulations

2.1.1. Algorithmes

Les travaux de Chen, Ferrenberg et Landau [49,50] montrant de manière indiscutable le passage à une transition du second ordre sous l'influence du désordre, nous avons opté pour l'algorithme d'amas de Swendsen et Wang (voir Annexe) qui réduit de manière importante le ralentissement critique. L'étude du comportement critique de surface [†] entrant également dans nos objectifs, nous avons écarté l'algorithme de Wolff dont la dynamique est considérablement ralentie en présence de bords fixes. La technique de “*multi-spin coding*” dont il a déjà été question dans le cas des séquences apériodiques (Chapitre 2, paragraphe 3.2.1) a permis d'accélérer l'exécution. Le générateur de nombres pseudo-aléatoires était ici aussi le générateur RANMAR.

2.1.2. Paramètres de la simulation

La discussion portera dans cette section sur des quantités de volume calculées sur des systèmes carrés de côté L avec des conditions aux limites périodiques dans

[†] Nous y reviendrons dans la partie 3.5.

les deux directions. Les exposants critiques ont été déterminés en exploitant les effets de taille finie au point critique du système infini et aux maxima de la susceptibilité magnétique. Nous avons localisé ces maxima au moyen de la technique de repondération de l'histogramme (voir Annexe). Les paramètres de la simulation sont rassemblés dans le tableau 3.2.1. Les simulations Monte Carlo comportent un nombre d'itérations suffisamment important pour que puisse être négligée, dans la gamme de températures présentée, la déviation systématique des résultats issus de la technique de repondération de l'histogramme. Pour des raisons de temps de calcul, il ne nous a toutefois pas été possible de choisir un nombre de configurations de désordre suffisant pour que les contributions à l'erreur sur l'aimantation d'origine thermique et dues au désordre soient approximativement de même ordre de grandeur.

L	τ_e	Therm.	Nb. itér.	Nb. conf.	$\Delta m^{\text{therm.}}$	$\Delta m^{\text{dés.}}$
12	13.3	5000	200000	500	$6.22 \cdot 10^{-5}$	$2.57 \cdot 10^{-3}$
64	24.6	5000	300000	333	$7.18 \cdot 10^{-5}$	$3.85 \cdot 10^{-3}$
88	28.8	5000	400000	250	$7.60 \cdot 10^{-5}$	$4.48 \cdot 10^{-3}$

Tableau 3.2.1 : Paramètres des simulations Monte Carlo utilisées pour le calcul des exposants critiques du modèle de Potts à 8 états en présence de désordre. Le nombre d'itérations de thermalisation (Therm.) est toujours supérieur à $20\tau_e$ (τ_e est le temps d'auto-corrélation de l'énergie défini dans l'annexe) et le nombre d'itérations (Nb. itér.) est de l'ordre de $10^4 \cdot \tau_e$. La contribution à l'erreur sur la densité d'aimantation d'origine thermique ($\Delta m^{\text{therm.}}$) est négligeable devant celle due aux fluctuations sur les configurations (Nb. conf.) de désordre ($\Delta m^{\text{dés.}}$).

2.1.3. Modélisation du désordre

Estimant que l'origine de l'importante déviation entre les estimations des exposants critiques de Chen, Ferrenberg et Landau ^[49,50] et de Cardy et Jacobsen ^[38, 112] pouvait être due à un cross-over avec le point fixe homogène en désordre faible, nous avons choisi un désordre fort modélisé par la distribution binaire de couplages d'échange

$$\wp(K_{ij}) = \frac{1}{2} [\delta(K_{ij} - K_1) + \delta(K_{ij} - K_2)] \quad (3.2.1)$$

avec $K_1/K_2 = r = 10$. Des arguments de dualité permettent la détermination exacte de la ligne critique pour cette distribution ^[132]. Dans le cas général d'une distribution binaire de couplages K_1 et K_2 distribués aléatoirement avec des probabilités respectives p et $1 - p$, la densité d'énergie libre moyenne a pour image lors d'une transformation de dualité

$$\overline{f(K_1, p; K_2, 1 - p)} \longrightarrow \overline{f(K_1^*, p; K_2^*, 1 - p)}. \quad (3.2.2)$$

La condition d'auto-dualité au point critique impose, outre la solution homogène $K_1 = K_2$,

$$\begin{cases} p = 1 - p \Leftrightarrow p = 1/2, \\ K_1^c = (K_2^c)^* \Leftrightarrow (e^{K_1^c} - 1)(e^{K_2^c} - 1) = q. \end{cases} \quad (3.2.3)$$

Afin de réduire les fluctuations des grandeurs thermodynamiques, toutes les configurations de désordre comportent un même nombre de couplages K_1 et K_2 (**désordre canonique**).

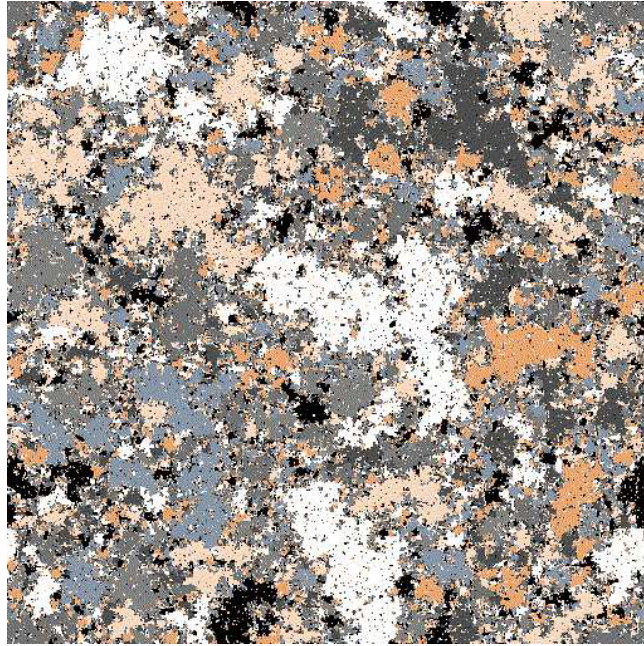


Figure 3.2.1 : Configuration typique du modèle de Potts homogène à 8 états au voisinage de la température de transition. Le système est un carré de 512 spins de côté et chaque couleur est associée à un état du modèle de Potts.

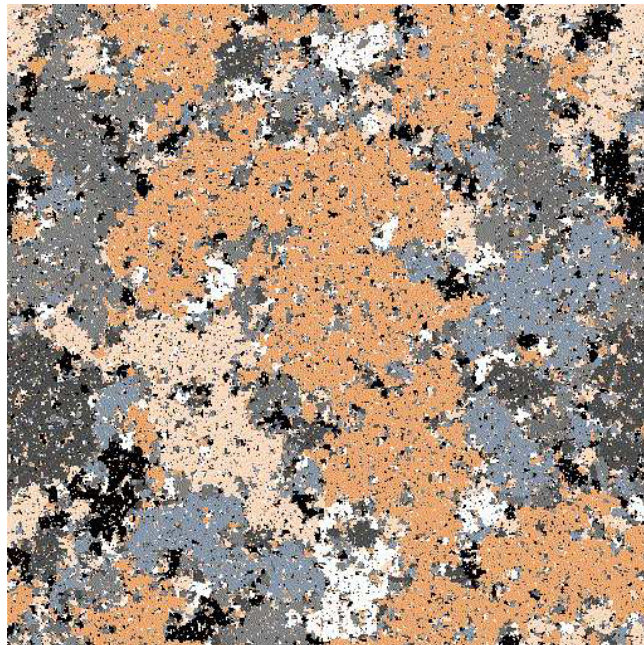


Figure 3.2.2 : Configuration typique du modèle de Potts à 8 états désordonné ($r = 10$) au voisinage du point critique.

2.2. Ordre de la transition de phase

2.2.1. Configurations de spin

Les figures 3.2.1 et 3.2.2 présentent une configuration typique du modèle de Potts $q = 8$ dans les cas homogène et désordonné ($r = 10$) au voisinage des températures de transition correspondantes. Alors que dans le cas du modèle de Potts $q = 8$ pur les amas de spins dans le même état ont une extension spatiale limitée, même au point de transition (figure 3.2.1), les configurations de spin les plus probables du système désordonné, que l'on peut observer au cours d'une simulation Monte Carlo, montrent clairement l'apparition d'amas dont le diamètre moyen est de l'ordre de grandeur de la taille du système (figure 3.2.2). On s'attend pour le modèle pur à une distribution de probabilité du diamètre l des amas corrélé de la forme ^[25]

$$\wp(l) = \mathcal{A} e^{-l/\xi} \quad (3.2.4)$$

et donc à un diamètre moyen $\langle l \rangle$ des amas de l'ordre de la longueur de corrélation ξ . Dans le cas du système pur, la longueur de corrélation est de l'ordre de $\xi \simeq 24$ pas de réseau ^[30]. Si l'expression de $\wp(l)$ reste valable dans le cas désordonné, les figures 3.2.1 et 3.2.2 témoignent d'une augmentation de la longueur de corrélation sous l'influence du désordre, c.à.d. de l'adoucissement de la transition prédit par le critère d'Imry-Wortis ^[109].

2.2.2. Distribution de probabilité

Chen, Ferrenberg et Landau ^[49,50] ont étudié la distribution de probabilité de l'énergie et montré que la barrière d'énergie séparant les pics associés aux phases ordonnées et désordonné s'annulait à mesure qu'augmentait la taille du système et donc que la transition était selon toute vraisemblance du second ordre.

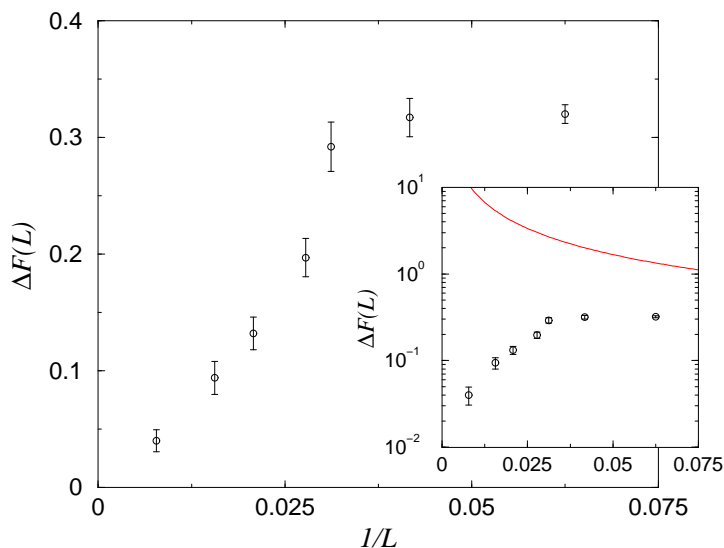


Figure 3.2.3 : Évolution de la barrière d'énergie libre $\Delta F(L)$ calculée par Chen *et al.* avec l'inverse de la taille L du système pour un désordre faible $r = 2$. La courbe continue dans le graphique en insert correspond à la barrière d'énergie du modèle de Potts $q = 8$ homogène.

La figure 3.2.3 est une reproduction de la figure 2 de la référence [50]. Une étude ultérieure de la distribution de probabilité de l'énergie montre que, pour un système de taille finie, la transition ne devient continue que pour une amplitude r de désordre finie [233]. Dans la limite thermodynamique, cette amplitude s'annule conformément au théorème établi par Aizenman et Wehr [5].

2.2.3. Temps d'auto-corrélation

L'existence d'une barrière d'énergie libre séparant les phases ordonnée et désordonnée se manifeste par une divergence exponentielle du temps d'auto-corrélation avec la taille du système pour une transition du premier ordre (cf Annexe). Chen et Landau [51] ont observé pour le modèle de Potts $q = 8$ désordonné un comportement en loi de puissance des temps d'auto-corrélation intégrés et exponentiel, typique d'une transition du second ordre. Les exposants dynamiques z associés aux temps d'auto-corrélation intégrés de l'aimantation et de l'énergie sont respectivement égaux à

$$z_{\tau_e} \simeq 0.25(4), \quad z_{\tau_m} \simeq 0.40(4) \quad (3.2.5)$$

et sont légèrement inférieurs à nos valeurs (figure 3.2.4) à système identique (algorithme de Swendsen-Wang, $q = 8$ et $r = 10$)

$$z_{\tau_e} \simeq 0.38, \quad z_{\tau_m} \simeq 0.45. \quad (3.2.6)$$

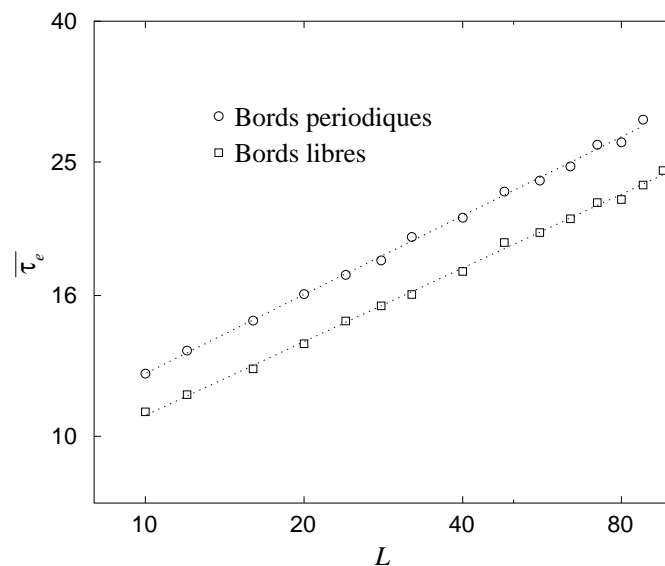


Figure 3.2.4 : Temps d'auto-corrélation intégré τ_e de l'énergie totale en fonction de la taille L du système pour des conditions aux limites périodiques et libres. Les droites correspondent à une interpolation en loi de puissance.

2.3. Comportement critique de volume

2.3.1. Effets de taille finie de l'aimantation

La figure 3.2.5 présente la densité d'aimantation moyenne $\overline{\langle m \rangle}$ et deux de ses moments, $\overline{\langle m^2 \rangle}$ et $\overline{\langle m^4 \rangle}$, dont on attend au point critique du système infini un comportement de la forme

$$\overline{\langle m \rangle} \sim L^{-\beta/\nu}, \quad \overline{\langle m^2 \rangle} \sim L^{-2\beta/\nu}, \quad \overline{\langle m^4 \rangle} \sim L^{-4\beta/\nu} \quad (3.2.7)$$

en fonction de la taille L du système. En effet, on peut remarquer que les moments "thermiques" découlent d'une mesure de Boltzmann moyenne

$$\overline{\langle m^n \rangle} = \sum_{\{\sigma\}} [m(\{\sigma\})]^n \left[\frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}}{\mathcal{Z}} \right] = \sum_{\{\sigma\}} [m(\{\sigma\})]^n \frac{e^{-\beta\mathcal{H}^{\text{eff.}}(\{\sigma\})}}{\mathcal{Z}^{\text{eff.}}} \quad (3.2.8)$$

qui par des arguments d'échelle imposent les comportements (3.2.7) alors que les moments dont il sera question au paragraphe 4.3 sont ceux de la distribution de désordre :

$$\overline{\langle m \rangle^n} = \left[\sum_{\{\sigma\}} m(\{\sigma\}) \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}}{\mathcal{Z}} \right]^n. \quad (3.2.9)$$

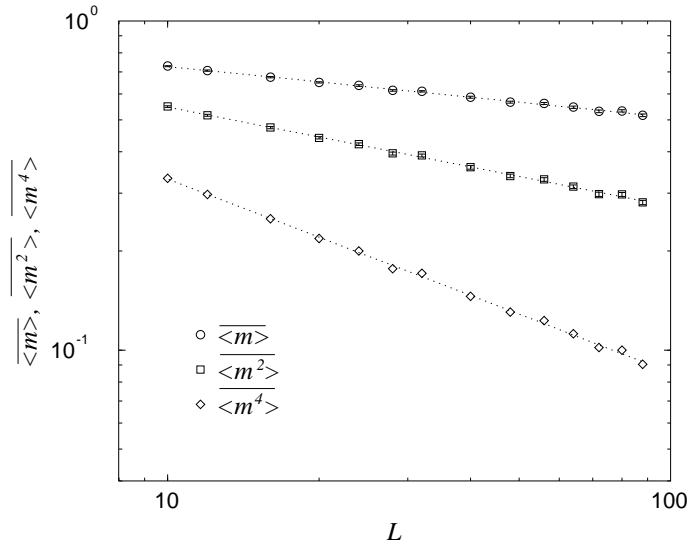


Figure 3.2.5 : Comportement de la densité d'aimantation et de deux de ses moments en fonction de la taille du système. Les droites correspondent à des interpolations en loi de puissance.

Une interpolation linéaire (dans une échelle doublement logarithmique) des quantités moyennes $\{\overline{\langle m^n \rangle}\}_{n=1,2,4}$ conduit aux estimations suivantes de l'exposant critique magnétique :

$$\beta/\nu \simeq 0.155(2), \quad 0.151(2) \quad \text{et} \quad 0.147. \quad (3.2.10)$$

Les exposants critiques et les erreurs associées ont été calculés en utilisant une interpolation linéaire sur les données pondérées par l'inverse de leur erreur quadratique ^[190]. Aucune erreur n'ayant été calculée pour $\langle m^4 \rangle$, l'estimation proposée correspond à une simple interpolation linéaire et ne peut donc prétendre à la même valeur que les résultats déduits de $\langle m \rangle$ et $\langle m^2 \rangle$. L'évolution monotone des exposants critiques (3.2.10) avec l'ordre du moment suggère l'existence de corrections d'échelle relativement importantes. La figure 3.2.6 présente les résultats d'une interpolation de $\langle m \rangle$ et $\langle m^2 \rangle$ en retirant les tailles les plus petites. L'exposant critique β/ν effectif obtenu est représenté en fonction de l'inverse de la taille la plus petite L_{\min} entrant dans l'interpolation. L'erreur croît à mesure que le nombre de points conservés diminue. L'estimation finale de l'exposant β/ν que nous proposons a été obtenue par interpolation linéaire dans la région délimitée par une flèche sur la figure 3.2.6. Les quantités $\langle m \rangle$ et $\langle m^2 \rangle$ conduisent à

$$\beta/\nu \simeq 0.152(4), \quad 0.1495(36) \quad (3.2.11)$$

compatibles dans les barres d'erreur.

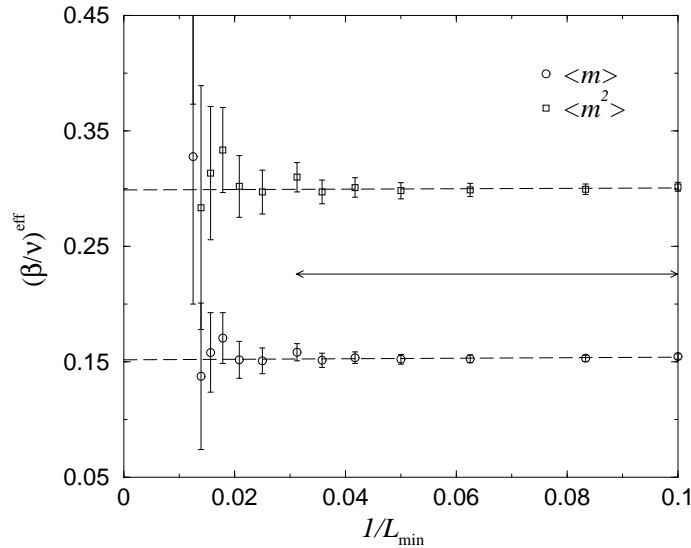


Figure 3.2.6 : Exposants critiques effectifs obtenus par interpolation linéaire des estimations Monte Carlo de $\langle m \rangle$ et $\langle m^2 \rangle$ pour les systèmes de taille supérieure à L_{\min} .

2.3.2. Effets de taille finie de la susceptibilité magnétique

La figure 3.2.7 présente le comportement de la susceptibilité magnétique moyenne $\bar{\chi}$ avec la taille L du système. L'estimation de l'exposant critique γ , calculé par simple interpolation en loi de puissance des données numériques, est entachée d'une erreur importante :

$$\gamma/\nu \simeq 1.74(9) \quad (3.2.12)$$

qui ne permet pas de distinguer entre l'exposant du modèle d'Ising pur $\gamma/\nu = 7/4$ prédit par Chen *et al.* et une valeur tirée de la relation d'échelle $\gamma/\nu = d - 2\beta/\nu \simeq 1.696$ avec

l'estimation (3.2.11) de β/ν . L'importance des erreurs sur les données Monte Carlo ne permet pas non plus une extrapolation d'un exposant effectif en fonction de la taille minimale à partir de laquelle on le calcule.

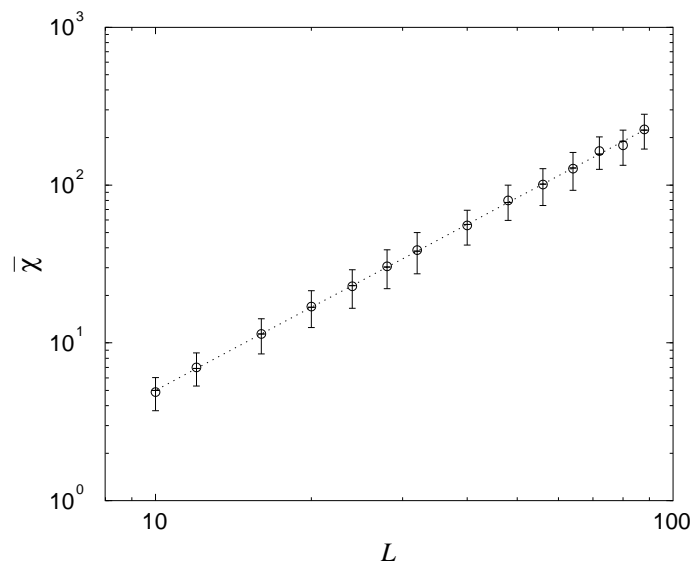


Figure 3.2.7 : Comportement de la susceptibilité magnétique en fonction de la taille du système. La droite correspond à une interpolation en loi de puissance.

Le nombre important d'itérations pour chaque configuration de désordre permet en revanche l'utilisation de la technique de repondération de l'histogramme (voir Annexe) sur une gamme de température relativement étendue. La relation (5.1.27) conduit à une zone de validité des résultats de la technique de repondération de l'histogramme correspondant à l'intervalle $[1.44, 4.79]$ de K_1 pour la taille $L = 88$. La position du maximum de la susceptibilité magnétique permet une détermination de deux exposants critiques, l'un thermique et l'autre magnétique. En effet, la température $T_1^{\max}(L) = 1/K_1^{\max}(L)$ à laquelle est observé le maximum pour un système de taille L permet la définition d'une température de "transition" dont le déplacement par rapport à la température critique $T_1^{\max}(\infty)$ du système infini est de la forme

$$T_1^{\max}(L) \underset{L \gg 1}{\sim} T_1^{\max}(\infty) + \mathcal{A} L^{-1/\nu}. \quad (3.2.13)$$

On s'attend à un comportement analogue pour le déplacement du couplage K_1 de transition. Les exposants critiques tirés d'une extrapolation en loi de puissance sont (figure 3.2.8)

$$\nu \simeq 1.005(30), \quad 1.063(63). \quad (3.2.14)$$

Les données calculées par la méthode de repondération de l'histogramme étant nombreuses, le temps nécessaire au calcul des incertitudes était trop long au regard des moyens de calcul dont nous disposions alors. Les barres d'erreur sur les exposants (3.2.14) correspondent à la déviation standard de l'interpolation en loi de puissance. La méthode utilisée précédemment pour s'affranchir d'éventuelles corrections d'échelle n'a pu être appliquée ici à cause de barres d'erreur trop importantes.

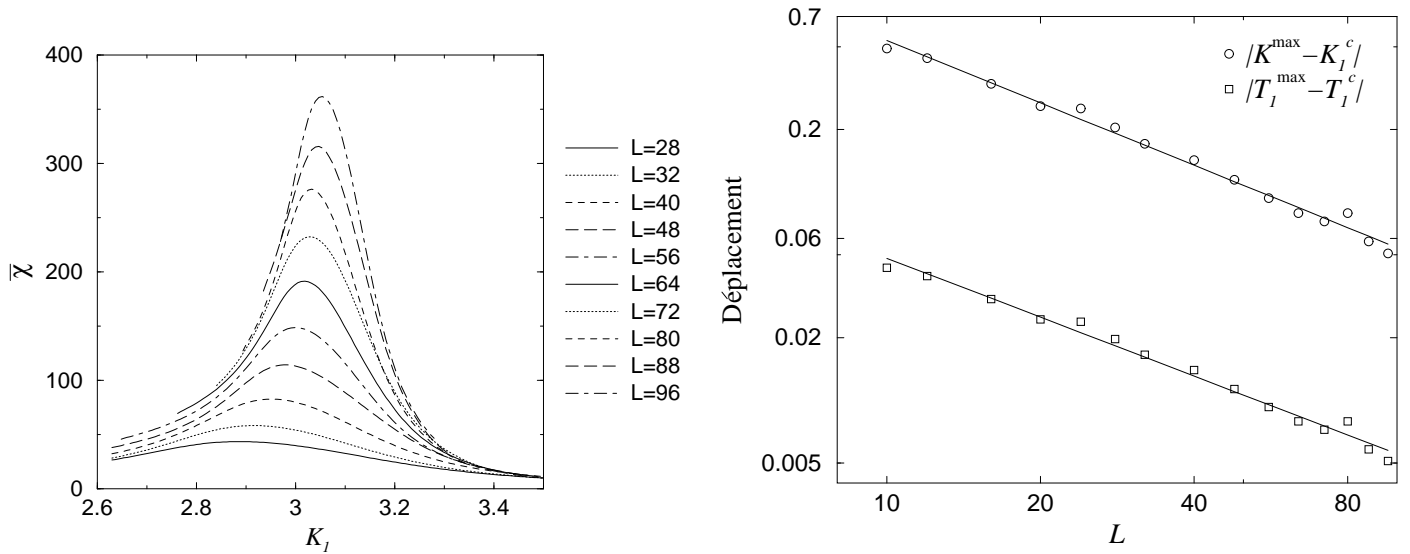


Figure 3.2.8 : Comportement de la susceptibilité magnétique χ en fonction du couplage d'échange K_1 pour des tailles de $L = 28$ à $L = 96$ (à gauche). Le point critique correspond à $K_1 \simeq 3.127$. A droite, évolution avec la taille L du système du déplacement de la température $T_1^{\max}(L)$ et du couplage $K_1^{\max}(L)$ de transition. Les droites correspondent à des interpolations en loi de puissance.

Outre la position du maximum du pic de susceptibilité magnétique avec la température, on peut également s'intéresser à sa hauteur dont le comportement avec la taille du système donne accès à une détermination de γ/ν :

$$\bar{\chi}^{\max} \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (3.2.15)$$

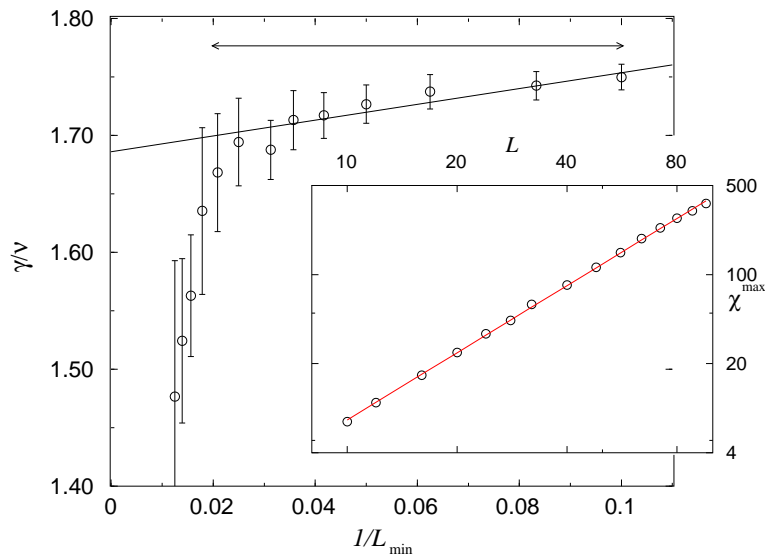


Figure 3.2.9 : Valeur maximale de la susceptibilité magnétique en fonction de la taille du système (en insert). La droite correspond à une interpolation en loi de puissance. La courbe principale correspond à l'exposant tiré d'une interpolation dans la gamme de tailles $L \geq L_{\min}$.

Une interpolation en loi de puissance sur l'ensemble des tailles disponibles conduit à l'estimation (figure 3.2.9)

$$\gamma/\nu \simeq 1.750(9) \quad (3.2.16)$$

compatible avec l'estimation (3.2.12). La courbe présente moins de fluctuations que celle obtenue par mesure de la susceptibilité au point critique et laisse apparaître une courbure. La figure 3.2.9 présente les exposants effectifs calculés par interpolation sur la gamme de tailles $L \in [L_{\min}; 96]$ en fonction de $1/L_{\min}$. Les barres d'erreur correspondent à la déviation standard de l'interpolation. Il existe de toute évidence une correction d'échelle. Une interpolation linéaire des exposants critiques dans la gamme de tailles marquée par une double flèche conduit à l'estimation finale

$$\gamma/\nu \simeq 1.686(17). \quad (3.2.17)$$

2.4. Comportement critique de surface

La détermination complète de la classe d'universalité d'un système requiert, outre la connaissance des propriétés de volume, celle des propriétés de surface. Deux techniques différentes ont été utilisées pour la détermination de l'exposant magnétique de surface β_1 : l'étude des effets de taille finie de l'aimantation de surface et son évolution avec la température réduite vers le point critique. Les deux estimations obtenues sont incompatibles sans qu'il soit possible d'identifier la source de la différence. Le lecteur pourra s'en convaincre en parcourant l'exposé des résultats des deux méthodes, brièvement présentés dans les paragraphes 2.4.1 et 2.4.2. La confrontation des données numériques avec les expressions conformes permettra de trancher.

2.4.1. Effets de taille finie

Des simulations sur un système avec des conditions aux bords libres cette fois sur deux des surfaces nous ont permis d'estimer l'exposant magnétique de surface β_1/ν à partir de la dépendance avec la taille L du système de l'aimantation de surface $\overline{\langle m_1 \rangle}$ et de ses moments $\overline{\langle m_1^2 \rangle}$ et $\overline{\langle m_1^4 \rangle}$. Une interpolation en loi de puissance des résultats numériques présentés sur la figure 3.2.10 conduit aux exposants

$$\beta_1/\nu \simeq 0.460(3), \quad 0.454(3), \quad 0.443 \quad (3.2.18)$$

pour l'aimantation de surface et ses moments d'ordre deux et quatre. La méthode d'interpolation utilisée au paragraphe 2.3 pour tenir compte d'éventuelles corrections a été appliquée aux deux premiers moments de l'aimantation de surface. L'interpolation linéaire en $1/L_{\min}$ des exposants effectifs calculés sur la gamme de taille $[L_{\min}; 96]_{L_{\min}=10..32}$ conduit aux estimations finales

$$\beta_1/\nu \simeq 0.475(6), \quad 0.475(6). \quad (3.2.19)$$

Faute d'avoir calculé une erreur Monte Carlo sur $\overline{\langle m_1^4 \rangle}$, la méthode n'a été appliquée qu'aux seuls deux premiers moments de l'aimantation de surface. L'accord est surprenant et est certainement la conséquence du fait que les estimations numériques

des moments sont calculées à partir d'une même dynamique Monte Carlo et donc nécessairement corrélées.

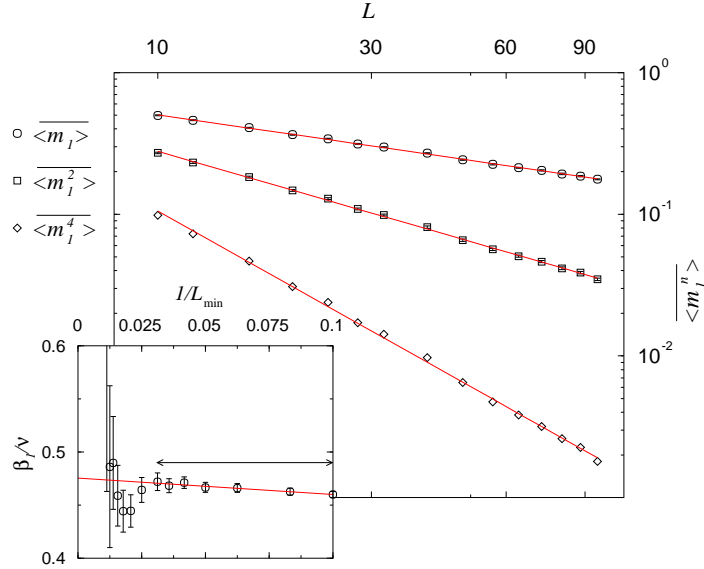


Figure 3.2.10 : Dépendance de l'aimantation de surface $\langle m_1 \rangle$ et de ses moments $\langle m_1^2 \rangle$ et $\langle m_1^4 \rangle$ avec la taille L du système et, en insert, exposants effectifs calculés sur la gamme de tailles $[L_{\min}; 96]$ en fonction de $1/L_{\min}$.

2.4.2. Approche en température du point critique

Dans le cadre d'une collaboration avec G. Palágyi (Université de Veszprém, Hongrie) et F. Iglói (Research Institute for Solid State Physics and Optics, Hongrie), nous avons réalisé des simulations Monte Carlo au voisinage du point critique ^[179] afin de tester les comportements :

$$\overline{\langle m \rangle} \underset{t \rightarrow 0}{\sim} t^\beta, \quad \overline{\langle m_1 \rangle} \underset{t \rightarrow 0}{\sim} t^{\beta_1}. \quad (3.2.20)$$

L'approche en température s'est faite à amplitude de désordre constante $r = K_1/K_2 = 10$. Les simulations ont été réalisées sur des systèmes de tailles allant de 160×160 à 640×320 et supposés suffisamment grands pour que les effets de taille finie soient négligeables dans l'intervalle de température considéré. Chaque simulation comportait 5000 itérations pour chacune des quelques centaines de configurations de désordre utilisées (jusqu'à 317 pour la taille la plus grande). Les résultats montrent l'absence de tout comportement multifractal des aimantations de volume et de surface, rendant donc moins problématique qu'au point critique la moyenne sur le désordre. L'estimation de l'exposant de volume obtenue :

$$\beta \simeq 0.151(1) \quad (3.2.21)$$

est parfaitement compatible avec celles tirées de l'étude des effets de taille finie ($\beta/\nu = 0.152(4)$ et $\nu \simeq 1.005(30)$). Pour l'estimation de l'exposant de surface, nous avons utilisé une expression incluant une correction d'échelle

$$\overline{\langle m_1 \rangle} = at^{\beta_1} [1 + bt^\theta]. \quad (3.2.22)$$

En pratique, l'exposant de la correction est proche de la valeur $\theta = 1$. On peut noter que l'exposant magnétique de surface obtenu

$$\beta_1 \simeq 0.597(23) \quad (3.2.23)$$

est incompatible avec ceux tirés de l'étude au point critique ($\beta_1/\nu \simeq 0.475(6)$ et $\nu \simeq 1.005(30)$), ce que nous tenterons d'éclaircir au paragraphe 3.5.2.

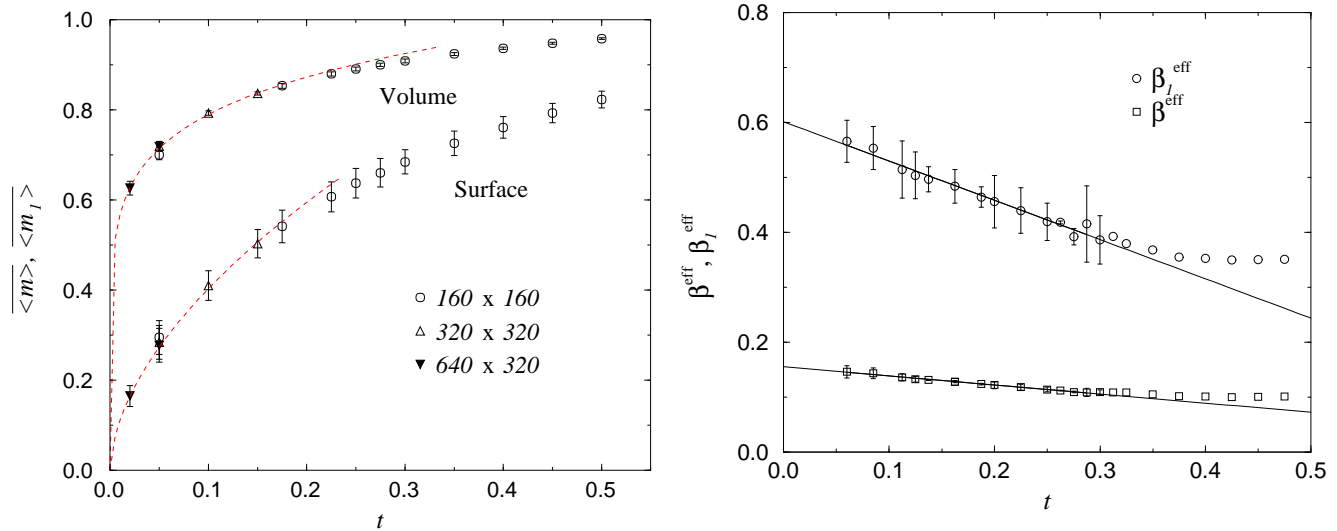


Figure 3.2.11 : Aimantation de volume et de surface en fonction de la température réduite $t = |K_1^c - K_1|$ pour plusieurs tailles (à gauche) et exposants effectifs associés à l'aimantation de volume et de surface et calculés par dérivation numérique (à droite), par exemple

$$\beta^{\text{eff}}(t) = \frac{d \ln \langle m \rangle}{d \ln t} \underset{\Delta t \rightarrow 0}{\sim} \frac{\ln \langle m(t + \Delta t/2) \rangle - \ln \langle m(t - \Delta t/2) \rangle}{\ln(t + \Delta t/2) - \ln(t - \Delta t/2)}.$$

2.5. Conclusion

Si nos résultats confirment l'hypothèse avancée par Chen, Ferrenberg et Landau de l'existence d'une transition du second ordre pour le modèle de Potts $q = 8$ désordonné, ils indiquent clairement l'existence d'un nouveau point fixe désordonné caractérisé par des exposants différents de ceux du modèle d'Ising et dont nos meilleures estimations sont :

$$\beta/\nu \simeq 0.152(4), \quad \gamma/\nu \simeq 1.686(17), \quad \nu \simeq 1.005(30). \quad (3.2.24)$$

Le désaccord avec les résultats de Cardy et Jacobsen ^[38, 112] est probablement le fait d'effets de cross-over avec le point fixe pur ($r = 1$, figure 3.2.13). Les données numériques de Picco, reproduites sur la figure 3.2.12, illustrent l'effet du cross-over sur l'aimantation moyenne. Le désordre étant couplé à la densité d'énergie, le champ d'échelle g , responsable des effets de cross-over, est de la forme $|r - r^*|$ et sa dimension d'échelle est $y_g = \alpha/\nu$. Il se manifeste par conséquent jusqu'à la taille $L^* \sim |r - r^*|^{-\nu/\alpha}$

(1.2.34) avec $-\nu/\alpha \simeq 100$, obtenu en utilisant la relation d'hyperscaling (1.2.7) et l'estimation (3.2.24). Il est donc essentiel de déterminer précisément l'amplitude de désordre r^* associé au point fixe désordonné. L'utilisation dans le prochain paragraphe des techniques conformes permettra cette détermination.

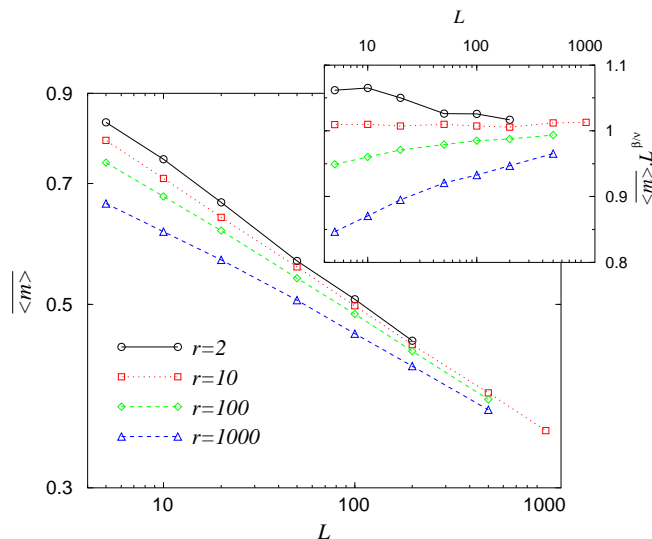


Figure 3.2.12 : Manifestation du cross-over avec les points fixes pur et de type percolation sur l'aimantation moyenne du modèle de Potts $q = 8$ désordonné. En insert, fonction d'échelle associée à l'aimantation en fonction de la taille L du système. Cette figure a été reproduite à partir de la référence [186].

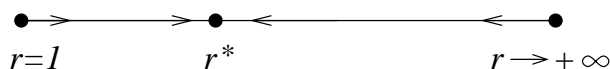


Figure 3.2.13 : Flot de renormalisation suivant la direction associée à l'amplitude du désordre.

La situation est plus confuse en ce qui concerne le comportement critique de surface et nous ne pouvons ici apporter de conclusions définitives. Cette question sera de nouveau examinée au prochain paragraphe en mettant à profit la validité des expressions conformes des profils et des fonctions de corrélation.

3. Applications de l'invariance conforme

3.1. Introduction

La présence de désordre brise l'invariance par translation et rotation et donc les prédictions de la théorie conforme concernant la forme des profils et des fonctions de corrélation perdent toute justification pour une configuration particulière de désordre. Toutefois, on peut supposer que la moyenne sur l'ensemble des configurations de désordre restaure les invariances requises par la théorie conforme. Des résultats numériques confortent cette hypothèse pour le modèle d'Ising désordonné ^[193]. Cependant, une certaine prudence est de rigueur : certains systèmes désordonnés ont montré des résultats incompatibles avec les prédictions de la théorie conforme ^[166].

Les propriétés critiques du modèle de Potts désordonné ont été étudiées par Ludwig ^[146] au moyen d'un calcul de renormalisation perturbative à l'ordre à deux boucles dans lequel le désordre intervient sous la forme de n répliques du système pur couplées par leur densité d'énergie et dans la limite $n \rightarrow 0$. L'utilisation du développement en produit d'opérateurs (*Operator Product Expansion*) limite la technique au modèle de Potts $q \leq 4$. Ludwig et Cardy, partant de l'hypothèse que les propriétés moyennes pouvaient être décrites par une théorie conforme dans le formalisme des répliques, ont calculé en particulier la charge centrale $c(n)$ avec le nombre n de répliques ^[149]. Toutefois, plusieurs difficultés apparaissent, notamment le fait que la définition

$$c' = \lim_{n \rightarrow 0} c(n) = 0 \quad (3.3.1)$$

de la charge centrale ne permet pas de rendre compte de la variation des exposants avec le nombre d'états q calculée par Ludwig ^[146]. Le terme suivant du développement de $c(n)$ avec n

$$c'' = \left[\frac{\partial c(n)}{\partial n} \right]_{n \rightarrow 0} \quad (3.3.2)$$

conduit en revanche à une dépendance avec q et, dans la limite $q \rightarrow 2$, la quantité (3.3.2) tend vers la valeur $c = 1/2$ du modèle d'Ising pur comme le prévoit l'hypothèse d'un désordre marginalement non pertinent et les études numériques ^[193]. L'observation que n répliques du modèle de Potts à q états correspondent à un modèle à q^n états ^[112], donne accès à la dépendance de la charge centrale avec le nombre d'états q :

$$c''(q) = \left[\frac{\partial c(q^n)}{\partial n} \right]_{n \rightarrow 0} = \lim_{n \rightarrow 0} \ln q \, q^n \left[\frac{\partial c(p)}{\partial p} \right]_{p=q^n} = \ln q \left[\frac{\partial c(p)}{\partial p} \right]_{p \rightarrow 1} = \frac{5\sqrt{3}}{4\pi} \ln q. \quad (3.3.3)$$

Les résultats numériques ^[38, 112, 44] sont compatibles avec un comportement logarithmique de la charge centrale avec q mais le préfacteur mesuré correspond à celui d'une loi logarithmique passant par le point $c(q = 2) = 1/2$.

Ludwig a étendu son calcul perturbatif à tous les moments de la fonction de corrélation et montré que la relation gap-exposant (1.2.43) se généralisait pour le modèle de Potts désordonné sous la forme d'une relation entre les exposants de Lyapunov (5.2.9) Λ_0 et Λ_1 du produit de matrices désordonnées et l'exposant typique ^[148] :

$$\Lambda_0 - \Lambda_1 = \frac{2\pi}{L} x_\sigma^b(0). \quad (3.3.4)$$

Certains auteurs ont utilisé cette relation pensant mesurer l'exposant associé aux grandeurs moyennes et les résultats obtenus ^[90, 194, 195] ont contribué à alimenter les controverses concernant une hypothétique universalité faible [†].

[†] Les expressions des fonctions de corrélation spin-spin typiques et moyennes (3.1.4) du modèle d'Ising désordonné se distinguent par la présence de corrections logarithmiques dans le premier cas. L'utilisation de la relation (3.3.4) conduit numériquement à un exposant instable.

La suite de l'exposé se limite à une étude de la validité dans les systèmes désordonnés des expressions des profils et des fonctions de corrélation prédites par l'invariance conforme. L'objectif est ici de comparer les exposants obtenus par interpolation avec les expressions conformes à ceux précédemment calculés par une étude des effets de taille finie et présentés dans la précédente section. Dans un deuxième temps, la validité des expressions conformes étant établie, certaines des techniques les plus précises seront appliquées à d'autres valeurs du nombre d'états q . Finalement, les expressions conformes seront mises à profit pour déterminer l'exposant critique magnétique de surface.

3.2. Modèle de Potts désordonné en géométrie cylindrique

La géométrie cylindrique a souvent été utilisée pour le calcul de propriétés critiques, car il est possible d'y construire une matrice de transfert qui, dans le cas de systèmes invariants dans la direction du ruban, permet une détermination exacte d'un certain nombre de grandeurs thermodynamiques. Dans le cas du modèle de Potts, la technique introduite par Blöte et Nightingale ^[23] (présentée en annexe) réduit considérablement la dimension de l'espace de Hilbert. La généralisation à un système désordonné est triviale. Nous avons eu recours à une variante de cette technique, optimisée pour le calcul des fonctions de corrélation. Pour plus de détails, le lecteur est invité à consulter l'annexe. Le système étudié est identique à celui présenté au paragraphe 2.

3.2.1. Charge centrale

Dans le cas d'un système désordonné, la densité d'énergie libre moyenne $f = L^{-1}\Lambda_0$ (5.2.8) est reliée à l'exposant de Lyapunov Λ_0 (5.2.9) d'un produit d'une infinité de matrices de transfert.

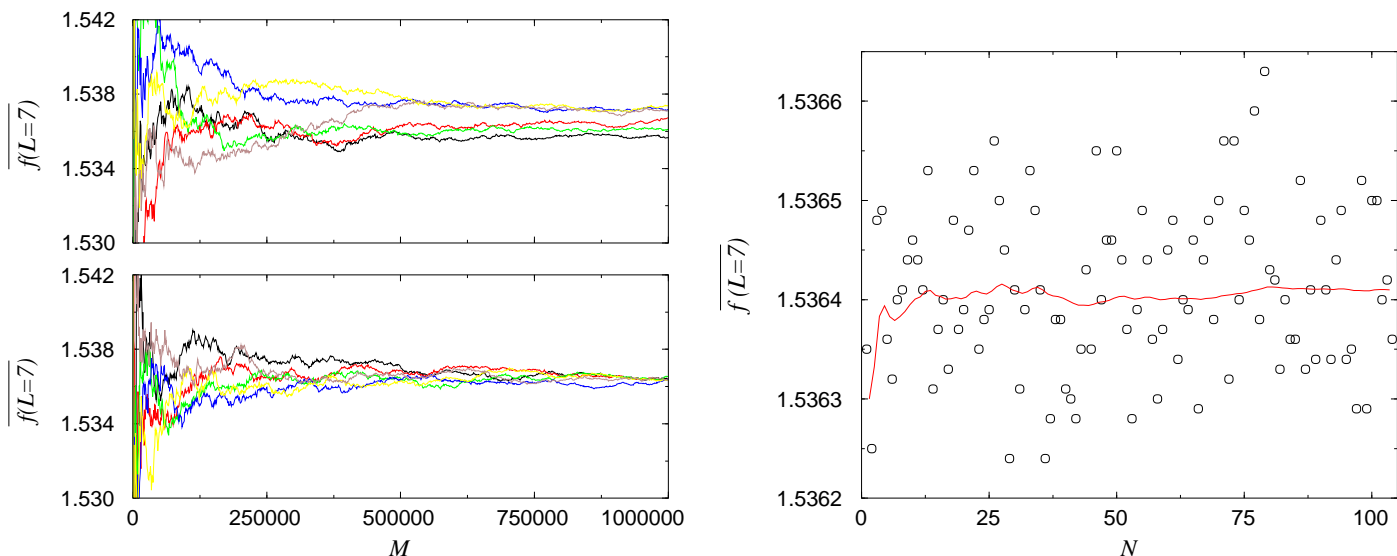


Figure 3.3.1 : Évolution de la densité d'énergie libre moyenne pour le modèle de Potts $q = 8$, avec un désordre d'amplitude $r = 10$ et sur un ruban de largeur $L = 7$ en fonction de la longueur M dans le cas d'un désordre grand-canonique (en haut à gauche) et canonique (en bas à gauche) et convergence de la moyenne sur un nombre N de configurations de désordre (à droite). Chaque symbole correspond à une configuration de désordre.

Les fluctuations présentées par la densité d'énergie lorsque le produit est limité à un nombre fini de matrices de transfert peuvent être atténuées en choisissant un désordre, non plus grand-canonique, mais canonique (figure 3.3.1). Nous avons utilisé des rubans construits à partir d'un produit de $M = 10^6$ matrices de transfert avec un nombre égal de couplages K_1 et K_2 répartis de manière aléatoire sur le système. Des tests préliminaires montrent que, pour réduire davantage les fluctuations de la densité d'énergie libre, il est préférable de moyennner les résultats obtenus avec un nombre N de rubans avec pour chacun une configuration différente de couplages plutôt que de continuer à augmenter la longueur M d'un unique ruban. Le calcul présenté dans la suite de ce paragraphe correspond à $N = 48$ rubans de largeur variant de $L = 2$ à $L = 8$ et de longueur $M = 10^6$. Ces paramètres réduisent l'erreur sur la densité d'énergie libre à une valeur inférieure à 10^{-5} dans tous les cas étudiés.

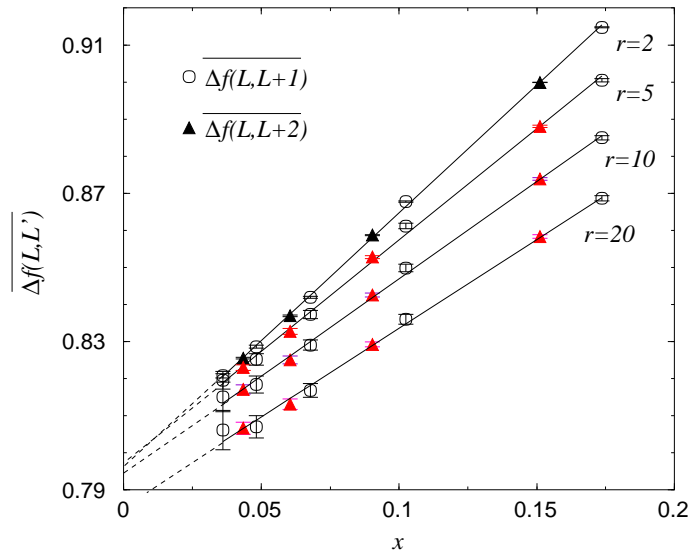


Figure 3.3.2 : Différences de la densité d'énergie libre pour le modèle de Potts $q = 3$ pour deux largeurs de ruban différentes en fonction du paramètre x et pour plusieurs valeurs de l'amplitude du désordre r . La charge centrale est donnée par l'ordonnée à l'origine des droites interpolées.

La charge centrale est liée aux corrections d'effets de taille finie à l'ordre le plus bas de la densité d'énergie libre par la relation (1.2.44). La largeur maximale L accessible restant petite, on s'attend à ce que les corrections d'effets de taille finie d'ordre supérieur ne puissent pas être négligées. Un terme d'ordre supérieur a été ajouté au développement de la densité d'énergie libre :

$$\overline{f(L)} = \overline{f(\infty)} - \frac{\pi c}{6L^2} + \frac{\mathcal{A}}{L^4}. \quad (3.3.5)$$

Le terme $\overline{f(\infty)}$ peut être éliminé en définissant la quantité

$$\overline{\Delta f(L, L')} = \frac{6}{\pi} \frac{\overline{f(L)} - \overline{f(L')}}{L'^{-2} - L^{-2}} = c - \frac{6}{\pi} \mathcal{A} x, \quad x = \frac{L'^{-4} - L^{-4}}{L'^{-2} - L^{-2}} \quad (3.3.6)$$

dont l'interpolation linéaire en x donne la charge centrale c . Cette méthode est plus stable qu'une interpolation quadratique en $1/L^2$ de la densité d'énergie libre (3.3.5).

Bien que $\overline{\Delta f(L, L+1)}$ et $\overline{\Delta f(L, L+2)}$ soient des grandeurs corrélées, des résultats plus précis peuvent être obtenus si on les fait entrer dans la même interpolation. La figure 3.3.2 présente un exemple de la procédure pour $q = 3$.

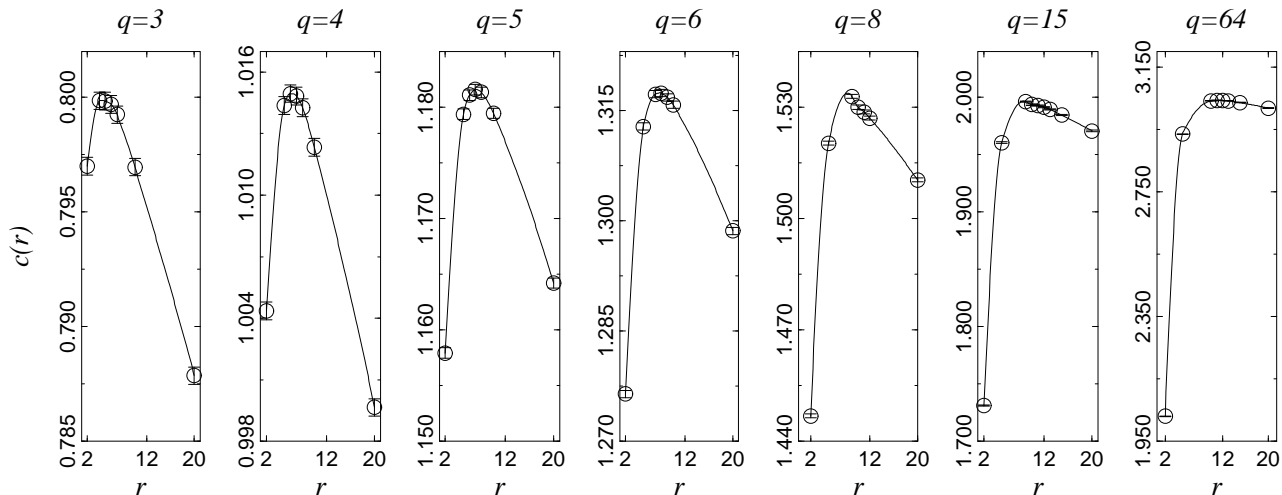


Figure 3.3.3 : Charge centrale $c(r)$ en fonction de l'amplitude du désordre r pour des valeurs de q allant de 3 à 64.

Comme l'ont remarqué Ludwig et Cardy^[149], la théorie critique du modèle de Potts désordonné est non-unitaire. La charge centrale au point fixe désordonné n'est donc pas nécessairement approchée par les valeurs supérieures comme l'exige le théorème c de Zamolodchikov pour les théories unitaires^[237]. Le calcul perturbatif de Ludwig et Cardy suggère une approche de la charge centrale au point fixe désordonnée par les valeurs inférieures. Comme le montre la figure 3.3.3, la charge centrale présente un maximum pour l'amplitude de désordre r^* dont on suppose qu'il correspond au régime du point fixe désordonné. La charge centrale décroît de part et d'autre, dans les limites de faible désordre (cross-over avec le point fixe pur) et de fort désordre (cross-over avec un point fixe de type percolation). Les amplitudes de désordre r^* obtenues pour plusieurs valeurs du nombre d'états q sont rassemblées dans le tableau 3.3.1.

$q = 3$	4	5	6	8	15	64
$r^* = 5$	7	7	8	10	10	12
$c(r^*) = 0.7998(4)$	1.0148(4)	1.1816(5)	1.3174(5)	1.5300(5)	1.9937(6)	3.0430(7)

Tableau 3.3.1 : Maximum de la charge centrale $c(r^*)$ et amplitude de désordre r^* associée pour diverses valeurs du nombre d'états q . Les barres d'erreur correspondent à l'incertitude lors de l'interpolation et ne tiennent donc pas compte des déviations systématiques dont la plus importante semble être due à la moyenne sur le désordre.

Nous avons effectué un balayage sur un certain nombre d'amplitudes de désordre r allant de 2 à 20 et limité aux valeurs entières. Le calcul des exposants critiques

montrent qu'une variation $\Delta r^* \simeq 1$ sur l'amplitude de désordre au point fixe ne modifie les exposants critiques pour $q = 8$ que d'une quantité inférieure aux barres d'erreur de ces exposants. La dépendance de la charge centrale au point fixe avec le nombre d'états q satisfait de manière relativement précise la loi (3.3.3) avec un préfacteur $(2 \ln 2)^{-1}$ et non celui attendu dans la limite $q \rightarrow +\infty$ (figure 3.3.4). Ce résultat a été récemment confirmé par Jacobsen et Picco ^[113].

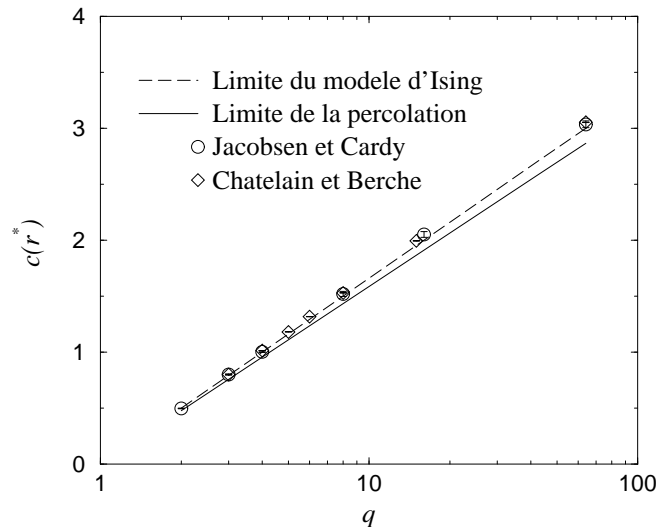


Figure 3.3.4 : Dépendance de la charge centrale avec le nombre d'états q obtenus par Jacobsen et Cardy et Chatelain et Berche comparée aux prédictions dans les limites $q \rightarrow 2$ (Ising) et $q \rightarrow +\infty$ (percolation).

3.2.2. Décroissance des fonctions de corrélation spin-spin

La décroissance asymptotiquement exponentielle (1.2.42) des fonctions de corrélation spin-spin dans la direction infinie du ruban

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle} = \frac{q \overline{\langle \delta_{\sigma_i, \sigma_{i+u}} \rangle} - 1}{q - 1} \underset{u \gg 1}{\sim} e^{-\frac{2\pi x_\sigma^b}{L} u} \quad (3.3.7)$$

obtenue en utilisant l'invariance conforme (paragraphe 2.3.2.2 du chapitre 1) résulte de l'introduction d'une échelle de longueur (L) lorsqu'on confine le système sur un cylindre. En utilisant cette expression, Cardy et Jacobsen ^[38, 112] obtiennent une estimation de l'exposant magnétique pour le modèle de Potts à $q = 8$ états, $x_\sigma^b \simeq 0.1415(36)$. Cette valeur est incompatible avec celle que nous avons tirée de l'étude des effets de taille finie au point critique ($x_\sigma^b \simeq 0.152(4)$) et qui a depuis été confirmée par Picco ^[186]. On peut alors s'interroger sur la validité de la relation (3.3.7) pour le modèle de Potts désordonné.

Cardy et Jacobsen ont utilisé une matrice de transfert construisant un système présentant une ligne de frustration qui donne accès à $\overline{\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$ et à ses moments.

C'est d'un développement en cumulants

$$\begin{aligned}
 \overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n} &= \overline{e^{n \ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}} \\
 &= \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{n^p}{p!} \overline{[\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle]^p} \\
 &= e^{\overline{n \ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle} + \frac{n^2}{2} [\overline{[\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle]^2} - \overline{\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}^2]} + \dots
 \end{aligned} \tag{3.3.8}$$

qu'ils ont ensuite déduit la fonction de corrélation spin-spin moyenne. Cette méthode est sans conteste la plus prudente lorsqu'on a, comme on peut le supposer pour le modèle de Potts, une distribution de probabilité $\wp(\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle)$ proche d'une loi log-normale. Nous avons utilisé une matrice de transfert qui permet une détermination très précise de la fonction de corrélation spin-spin $\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle$ pour une configuration de couplages donnée en tirant parti du fait qu'il est possible pour le modèle de Potts de construire directement la fonction de corrélation spin-spin connectée, sans avoir à retirer la contribution de la partie non connectée ce qui est un facteur important d'instabilité numérique. Le calcul de $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$ nécessite une moyenne sur un très grand nombre de configurations de désordre.

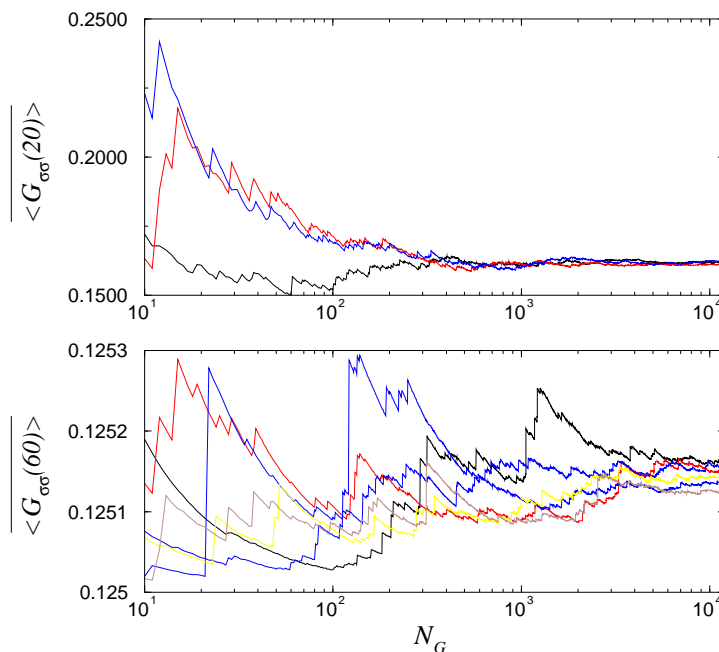


Figure 3.3.5 : Fonctions de corrélation spin-spin moyennes $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$ en fonction du nombre N_G de configurations de désordre pour deux valeurs de u . Les sauts brusques dans les courbes sont l'effet de configurations rares pour lesquelles les corrélations décroissent plus lentement que la moyenne.

En effet, comme le montre la figure 3.3.5, les événements rares qui correspondent aux configurations présentant une densité importante de couplages forts, contribuent fortement à la moyenne, particulièrement à grande distance. Des tests préliminaires nous ont permis d'estimer que $N_G = 80000$ configurations de désordre conduisent à un échantillonnage convenable de ces événements rares. La figure 3.3.6 témoigne de la bonne

définition de la distribution de probabilité $\wp(\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle)$ des fonctions de corrélation à une distance u donnée, en particulier dans la région des événements rares au voisinage de $\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle = 1$. Enfin, le calcul de la moyenne de $\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle$ et de ses moments donne, en utilisant le développement en cumulants (3.3.8), une moyenne $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$ compatible avec celle obtenue par le calcul direct (figure 3.3.6 à droite).

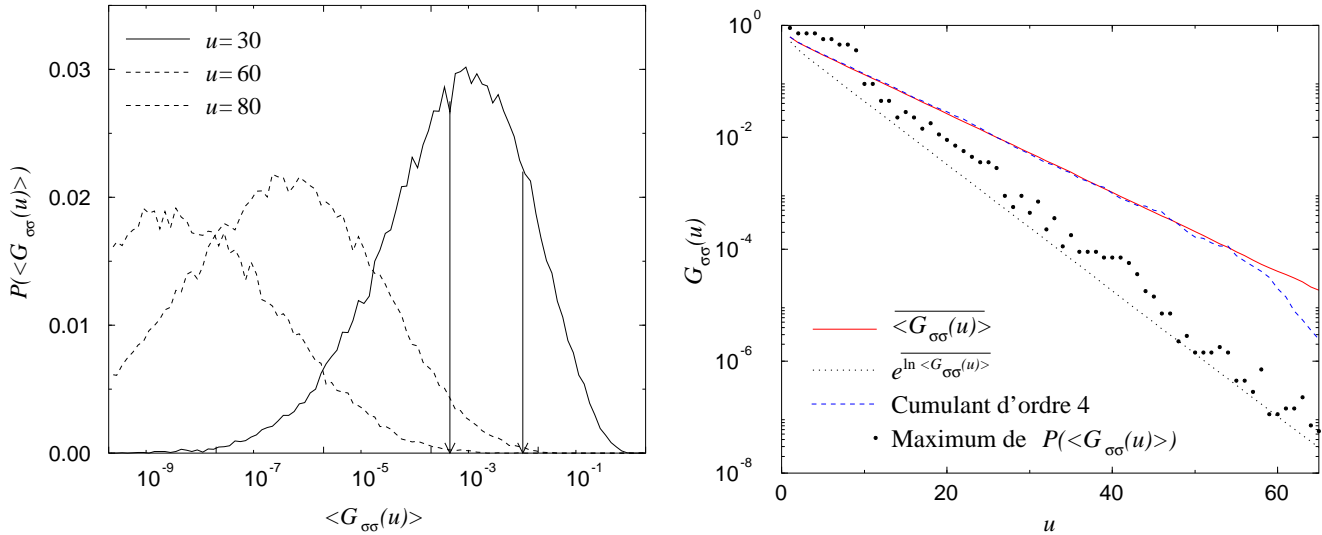


Figure 3.3.6 : Distribution de probabilité de la fonction de corrélation spin-spin $\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle$ pour le modèle de Potts $q = 8$ à $r = 10$ définie à partir de 63436 configurations de désordre pour plusieurs valeurs de u (à gauche). Les flèches marquent la position de la moyenne et de $e^{\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$. À droite, fonction de corrélation moyenne, typique et calculée par le développement en cumulants jusqu'à l'ordre quatre en fonction de u . Notons la compatibilité des résultats typiques et de $e^{\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$ ce qui confirme la forme log-normale de la distribution.

Notons que les fluctuations des moments $[\ln \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle]^n$ croissent rapidement avec l'ordre n et avec l'amplitude du désordre r ce qui limite le calcul du développement en cumulants (3.3.8) à un ordre relativement bas et à un désordre faible. Lors de nos tests, le développement devenait instable aux grandes distances u à partir de l'ordre quatre. Le calcul direct de la fonction de corrélation et de ses moments ne présente pas cet inconvénient. L'erreur sur les fonctions de corrélation spin-spin moyennes a été estimée par leur écart quadratique

$$\Delta \overline{\langle G(u) \rangle} = \left[\frac{\overline{\langle G(u) \rangle^2} - \overline{\langle G(u) \rangle}^2}{N_G} \right]^{1/2}. \quad (3.3.9)$$

Il ne peut en aucun cas s'agir d'une détermination précise des fluctuations de la fonction de corrélation, car l'expression (3.3.9) ne se justifie que pour une moyenne de termes indépendants et normalement distribués, ce qui n'est pas le cas ici. Les exposants effectifs $x_\sigma^b(L)$ pour chaque largeur de ruban L ont été calculés par interpolation des fonctions de corrélation spin-spin moyennes $\overline{\langle G(u) \rangle}$ avec la forme (3.3.7). Chaque point est pondéré par l'inverse de son erreur quadratique lors de l'interpolation ce qui permet une estimation plus "réaliste" de l'erreur sur l'exposant ^[190]. L'interpolation a été limitée

à la gamme de distance $u \in [5; u_{\max}]$. La borne inférieure a été choisie de manière à éliminer le régime pré-asymptotique dans lequel les corrections à la forme (3.3.7) ne peuvent pas être négligées et la borne supérieure u_{\max} telle que $\langle G(u_{\max}) \rangle \simeq 10^{-5}$ est destinée à écarter de l'interpolation des points dont l'erreur relative deviendrait d'ordre $\mathcal{O}(1)$.

Nos estimations des exposants x_{σ}^b (tableau 3.3.2) correspondent à l'extrapolation dans la limite thermodynamique des exposants effectifs $x_{\sigma}^b(L)$ obtenus pour chaque taille L de ruban considérée. Nous avons pour cela utilisé une interpolation linéaire en $1/L$. La figure 3.3.7 (à droite) ne permet pas de déceler d'éventuelles corrections d'ordre supérieur en $1/L$. Dans le régime du point fixe désordonné $r \simeq r^*$, les exposants convergent vers une même limite thermodynamique alors qu'un désordre trop faible conduit à un exposant très différent (figure 3.3.7 (à gauche)).

$q = 3$	4	5	6	8	15	64
$x_{\sigma}^b = 0.1321(3)$	0.1385(3)	0.1423(3)	0.1456(3)	0.1505(3)	0.1572(3)	0.1669(3)

Tableau 3.3.2 : Exposants critiques magnétiques tirés de la décroissance exponentielle des fonctions de corrélation spin-spin sur ruban pour plusieurs valeurs du nombre d'états q du modèle de Potts.

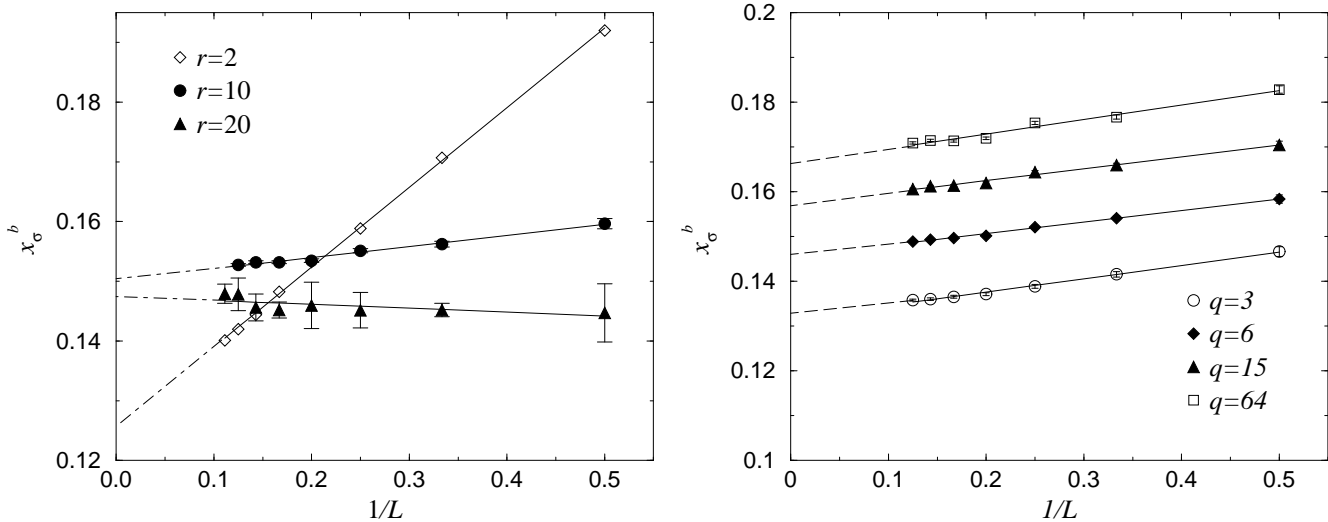


Figure 3.3.7 : Exposants critiques x_{σ}^b en fonction de la largeur L du ruban sur lequel ils ont été calculés pour le modèle de Potts $q = 8$ avec des amplitudes de désordre $r = 2, 10$ et 20 (à gauche). La statistique pour $r = 2$ est moins bonne que pour les deux autres valeurs de r . A droite, exposants critiques en fonction de $1/L$ et leur interpolation pour plusieurs valeurs de q à l'amplitude de désordre optimale r^* .

La valeur obtenue pour le modèle de Potts $q = 8$ (0.1505(3)) est compatible, dans les barres d'erreur, à celle tirée de l'analyse des effets de taille finie de la densité d'aimantation ($x_{\sigma}^b \simeq 0.152(4)$) ce qui milite en faveur de la validité de l'expression

conforme (3.3.7) pour le modèle de Potts désordonné. La différence par rapport à l'estimation de Cardy et Jacobsen ^[38, 112] ($x_\sigma^b \simeq 0.1415(36)$) semble due au recours au développement en cumulants qui a contraint ces auteurs à choisir une amplitude de désordre $r = 2$ dont il vient d'être montré qu'elle était trop faible et en dehors du régime du point fixe désordonné. Notons toutefois que leur estimation $x_\sigma^b = 0.13467(13)$ dans le cas $q = 3$ est parfaitement compatible avec la valeur prédite par les calculs perturbatifs ^[72, 73, 74] (0.13465) alors que notre estimation, plus proche de la valeur du système pur, suggère un effet de cross-over avec le point fixe homogène. L'amplitude de désordre que nous avons choisie ($r^* \simeq 5$) était en effet légèrement trop faible pour $q = 3$ et une valeur plus précise ($r^* \simeq 5.36$) conduisant à des exposants cette fois compatibles avec les développements perturbatifs sera utilisée au paragraphe 4.

Il est en principe possible d'extraire l'exposant thermique ν de la décroissance des fonctions de corrélation énergie-énergie. Malheureusement, il n'existe pas à notre connaissance de technique permettant le calcul direct des fonctions de corrélation énergie-énergie connectées. De plus, la décroissance rapide de ces fonctions de corrélation est très vite noyée dans les fluctuations de la partie non connectée et 800000 configurations de désordre ne suffisent pas à extraire une estimation précise de ν . Le calcul a néanmoins été récemment mené par Jacobsen dont les estimations de ν , légèrement supérieures à 1, sont parfaitement compatibles avec les développements perturbatifs ^[111].

3.3. Modèle de Potts désordonné en géométrie carrée

Afin de s'assurer que la validité des prédictions de l'invariance conforme en géométrie cylindrique n'était pas une particularité de cette géométrie, nous nous sommes également intéressé à une géométrie carrée. La transformation conforme utilisée est cette fois la transformation de Schwartz-Christoffel (1.2.45). Nous avons étudié d'une part la décroissance des fonctions de corrélation spin-spin depuis la surface sur un carré en condition de bords libres et de l'autre la forme du profil d'aimantation sur un carré en bords fixes.

3.3.1. Fonctions de corrélation en conditions de bords libres

Nous nous sommes limité au calcul des fonctions de corrélation spin-spin depuis le point $\zeta_1 = i$ situé au milieu d'une des surfaces du carré défini par $\zeta = u + iv$ avec $(u, v) \in [-N/2; N/2] \times [0; N]$ (figure 3.3.8). L'expression découlant de la covariance par transformation conforme est obtenue en appliquant la loi de transformation (1.2.35) à la forme des fonctions de corrélation en géométrie semi-infinie (1.2.37) avec l'expression du facteur d'échelle local dans la transformation de Schwartz-Christoffel (1.2.47). Il vient

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(\zeta) \rangle} = \text{cste} [|\zeta'(z)|\Im(z(\zeta))]^{-x_\sigma^b} \psi(\omega). \quad (3.3.10)$$

La fonction d'échelle $\psi(\omega)$ n'étant connue que dans la limite asymptotique $\omega \rightarrow +\infty$, l'expression (3.3.10) ne peut être testée efficacement qu'en se plaçant sur les courbes $\omega(\zeta) = \text{cste}$. Un exemple de quelques unes de ces courbes est donné par la figure 3.3.9.

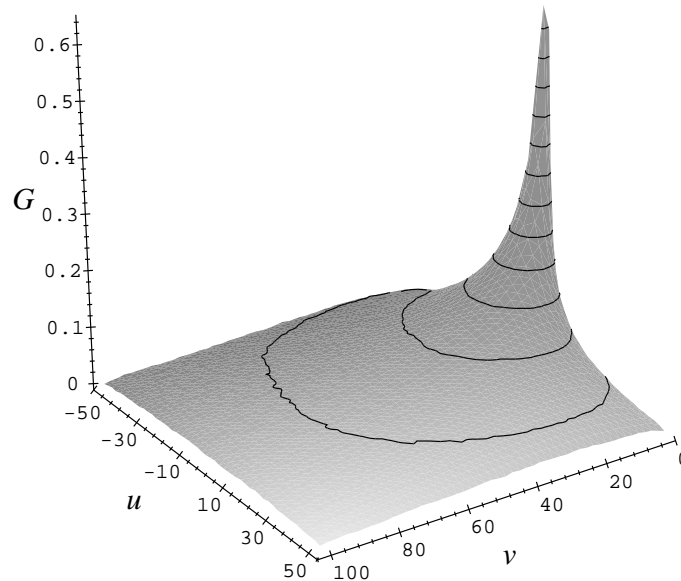


Figure 3.3.8 : Fonction de corrélation spin-spin moyenne $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(\zeta = u + iv) \rangle}$ entre un point à la surface et tous les autres points ζ à l'intérieur du carré.

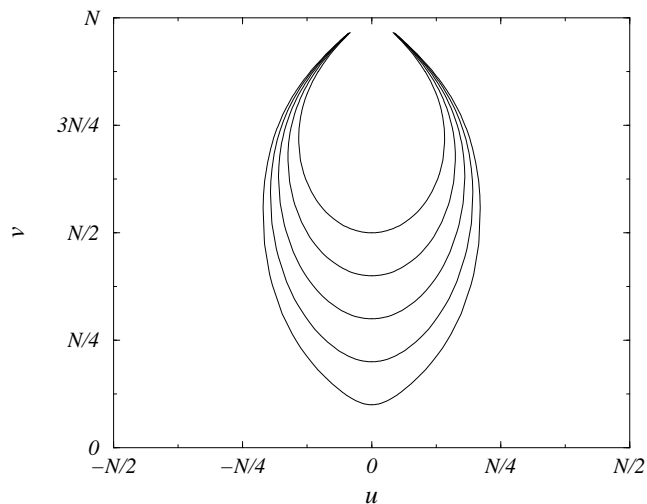


Figure 3.3.9 : Exemples de courbes $\omega = \text{cste}$ sur le carré défini par $\zeta = u + iv$ avec $(u, v) \in [-N/2; N/2] \times [0; N]$.

Alors que la géométrie cylindrique se prêtait à l'utilisation d'une technique de matrice de transfert, la géométrie carrée impose le recours à des simulations Monte Carlo. La transformation de Schwartz-Christoffel projette la surface $\Im(z) = 0$ du demi-plan sur les quatre surfaces du carré. Le système consiste en un carré dont toutes les surfaces sont libres et de taille arbitrairement fixée à $N = 101$. L'algorithme de Swendsen-Wang a été préféré à celui de Wolff, moins efficace avec des conditions aux limites autres que périodiques. L'étude a été limitée au modèle de Potts à $q = 8$ états pour lequel le temps d'auto-corrélation de l'aimantation est de l'ordre de $\tau_\sigma \sim 35$ itérations. Les 5000 premières itérations Monte Carlo ont été rejetées et les moyennes ont été calculées sur les 10000 itérations suivantes. Les résultats ont ensuite été moyennés

sur 3000 configurations. Le nombre de sites du réseau sur les courbes $\omega = \text{cste}$ étant insuffisant pour permettre une interpolation des résultats, la fonction de corrélation spin-spin a été interpolée sur ces courbes à partir des quatre points les plus proches. L'expression (3.3.10) montre un comportement en loi de puissance des fonctions de corrélation spin-spin depuis la surface sur les courbes $\omega = \text{cste}$:

$$\ln \overline{\langle G_{\sigma\sigma}(\zeta) \rangle} = \text{cste} + \ln \psi(\omega(\zeta)) - x_{\sigma}^b \ln \kappa(\zeta), \quad \kappa(\zeta) = |\zeta'(\zeta)| \Im(z(\zeta)). \quad (3.3.11)$$

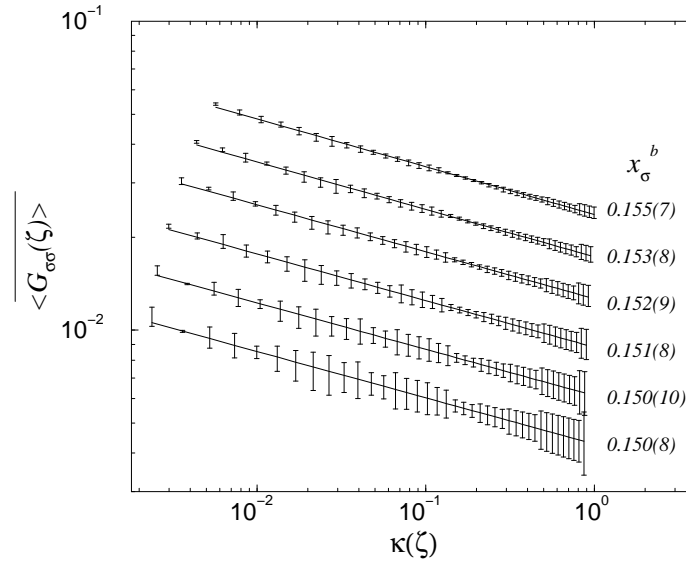


Figure 3.3.10 : Fonctions de corrélation spin-spin moyennes $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(\zeta) \rangle}$ pour plusieurs valeurs de ω en fonction de la variable réduite $\kappa(\zeta)$. Les exposants critiques tirés d'une interpolation en loi de puissance des courbes sont indiqués à l'extrémité droite des courbes associées.

La figure 3.3.10 présente les résultats obtenus pour plusieurs valeurs de ω . Les barres d'erreur ne tiennent pas compte ici des incertitudes sur le désordre. Leur variation avec $\kappa(\zeta)$ traduit le fait que les courbes $\omega = \text{cste}$ correspondent à des ensembles de points à des distances différentes de la surface. L'exposant critique peut être estimé en moyennant les valeurs obtenues sur les courbes $\omega = \text{cste}$ et l'incertitude reliée à la variance de ces valeurs. Il vient alors l'estimation finale :

$$x_{\sigma}^b = 0.152(3). \quad (3.3.12)$$

3.3.2. Profil d'aimantation en conditions de bords fixes

Contrairement aux fonctions de corrélation à deux points, l'expression du profil d'aimantation, corrélateur à un point, est entièrement déterminée par l'hypothèse conforme. De ce fait, l'ensemble des points du profil entrent dans l'interpolation, ce qui permet une estimation plus précise des exposants. L'invariance par translation et dilatation impose au profil de la densité d'aimantation dans le demi-plan une décroissance en loi de puissance depuis une surface fixe :

$$\overline{\langle m(z) \rangle} \sim y^{-x_{\sigma}^b}. \quad (3.3.13)$$

La transformation de Schwartz-Christoffel (1.2.45) et la loi de transformation (1.2.35) des fonctions de corrélation permettent d'en déduire l'expression dans un carré dont les spins sur les quatre surfaces ont été fixés (figure 3.3.11) :

$$\overline{\langle m(\zeta) \rangle} \sim |\zeta'(\zeta)|^{-x_\sigma^b} [\mathfrak{S}(z(\zeta))]^{-x_\sigma^b} = \left[\frac{\mathfrak{S}(z(\zeta))}{\sqrt{(1-z^2(\zeta))(1-k^2z^2(\zeta))}} \right]^{-x_\sigma^b}. \quad (3.3.14)$$

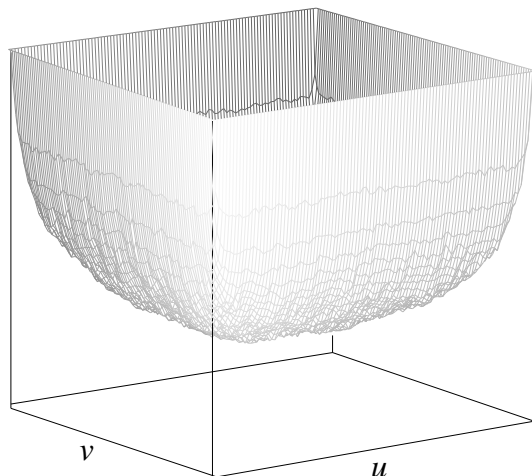


Figure 3.3.11 : Exemple de profil d'aimantation moyen obtenu pour le modèle de Potts $q = 8$.

Ici encore les conditions aux limites justifient l'utilisation de l'algorithme de Swendsen-Wang plutôt que celui de Wolff. En conditions de bords fixes, l'amas percolant est généralement celui incluant les spins fixés de la surface et ne peut donc pas être modifié. La dynamique de l'algorithme de Wolff, conçu pour ne modifier que l'amas percolant, est fortement ralentie. Les simulations ont été réalisées sur des carrés de côtés $N = 101$. Comme précédemment, les 5000 premières itérations ont été écartées de la statistique et les 10000 suivantes utilisées pour le calcul du profil d'aimantation. Les résultats ont été moyennés sur 5000 configurations de désordre. Les simulations ont été menées à l'amplitude de désordre r^* correspondant au point fixe désordonné et estimée en géométrie cylindrique. Dans le cas $q = 8$ par exemple, l'erreur sur la densité d'aimantation est de l'ordre de $1.4 \cdot 10^{-2}$.

Le logarithme de la densité d'aimantation (3.3.14) varie linéairement avec le logarithme de la variable réduite

$$\kappa(\zeta) = \frac{\mathfrak{S}(z(\zeta))}{\sqrt{(1-z^2(\zeta))(1-k^2z^2(\zeta))}} \quad (3.3.15)$$

avec une pente égale au signe près à l'exposant critique magnétique x_σ^b (figure 3.3.12). Le tableau 3.3.3 présente le résultat de l'interpolation pour diverses valeurs du nombre d'états q . Les incertitudes tiennent compte de toutes les sources d'erreurs. La contribution principale est due à la moyenne sur un nombre fini de configurations de désordre. Dans le cas du modèle de Potts $q = 8$, l'erreur sur l'exposant x_σ^b dû au désordre est

de l'ordre de $3.1 \cdot 10^{-3}$. Malgré l'apparente dispersion des points de la figure 3.3.12, l'interpolation est réalisée sur 10000 points ce qui conduit à une erreur sur la pente de la droite moyenne de l'ordre de 10^{-4} . Les effets de réseau sont ici négligeables. Une interpolation des données numériques avec l'expression conforme des profils sur réseau carré ^[98] ne modifie pas la valeur des exposants présentés dans le tableau 3.3.3.

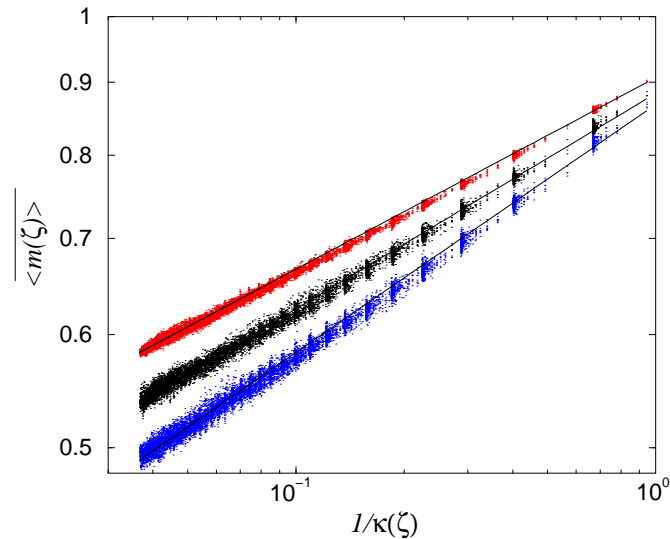


Figure 3.3.12 : Comportement linéaire du logarithme du profil de la densité d'aimantation sur un carré en bords fixes pour les modèles de Potts $q = 3, 8$ et 64 (de haut en bas).

q	r^*	x_σ^b
3	5	0.13357(3)
4	7	0.13815(4)
5	7	0.14302(4)
6	8	0.14621(5)
8	10	0.15031(5)
15	10	0.15984(6)
64	12	0.17299(6)

Tableau 3.3.3 : Exposants critiques magnétiques extraits du profil de la densité d'aimantation pour plusieurs valeurs du nombre d'états q et à l'amplitude de désordre r^* du point fixe désordonné.

3.3.3. Profil d'énergie en conditions de bords fixes

Le profil de la densité d'énergie $\overline{\langle e(\zeta) \rangle}$ peut être interpolé de la même manière que celui de l'aimantation avec l'expression conforme (3.3.14) où on aura remplacé x_σ^b par x_ϵ^b . La densité d'énergie a été définie comme la moyenne des énergies associées aux quatre

liaisons bordant chaque plaquette et a été débarrassée d'une contribution régulière de volume estimée en moyennant la densité d'énergie loin de la surface pour deux systèmes avec des conditions de bords libres et fixes, selon une méthode analogue à celle du paragraphe 3.3.3 du chapitre 2. La forte dispersion des résultats, présentés sur la figure 3.3.12, limite l'efficacité de la méthode. Par conséquent, nous avons restreint l'étude au modèle de Potts $q = 8$. L'estimation $\nu = 1.011(8)$ obtenue par interpolation linéaire ne tient compte, contrairement aux résultats pour le profil d'aimantation, que de la variance de l'interpolation et pas des incertitudes numériques. Sa valeur est compatible avec les résultats obtenus par l'étude des effets de taille finie (1.005(30), 1.063(63)).

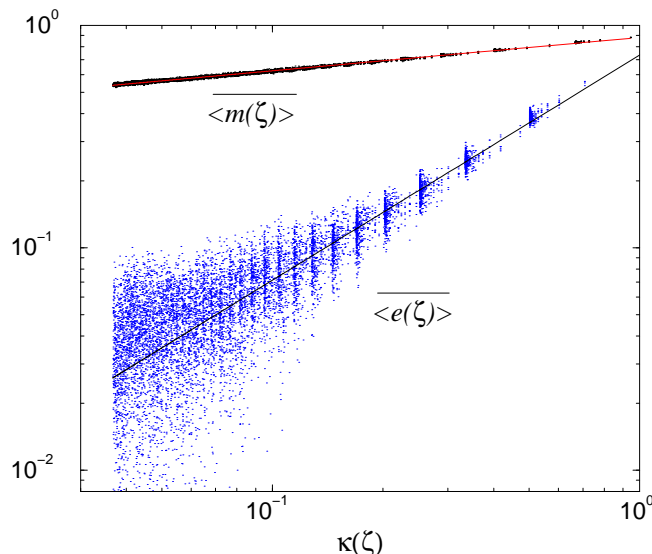


Figure 3.3.12 : Profils d'aimantation $\overline{m(\zeta)}$ et d'énergie $\overline{e(\zeta)}$ en fonction de la variable réduite $\kappa(\zeta)$ pour le modèle de Potts $q = 8$ à l'amplitude de désordre $r = 10$. Les exposants x_σ^b et x_e^b sont donnés par la pente des droites.

3.4. Discussion

Les expressions des fonctions de corrélation obtenues par covariance conforme sont reproduites de manière satisfaisante par les résultats numériques présentés dans ce chapitre. Leur interpolation dans les géométries cylindrique et carrée donne accès à des exposants critiques qui sont compatibles dans les barres d'erreur avec les estimations tirées de l'étude des effets de taille finie. Pour mémoire, les différentes techniques et les exposants critiques magnétiques x_σ^b dont elles ont permis l'estimation sont rappelées dans le tableau 3.3.4. Ces résultats accréditent l'hypothèse d'une validité des conséquences de l'invariance conforme au cas du modèle de Potts désordonné lorsqu'on place dans le régime du point fixe désordonné.

Le recours à un algorithme Monte Carlo impose de se placer dans un système de taille finie. Généralement, on fait l'hypothèse que le système est assez grand pour que puisse être observée sur une distance limitée une décroissance algébrique des fonctions de corrélation ou du profil d'aimantation dont on peut ensuite extraire les exposants critiques. Les techniques fondées sur l'expression conforme en géométrie carrée présentées dans ce chapitre ne présentent pas cet inconvénient, car elles tiennent

explicitement compte des effets de taille finie du carré. Seule l'existence d'un effet de réseau peut en principe engendrer une déviation des résultats par rapport à la forme conforme. Dans la pratique, un tel effet n'a pu être identifié. L'interpolation du profil d'aimantation sur le carré s'est révélée particulièrement adaptée à l'estimation de l'exposant x_σ^b avec une précision qui rivalise avec celle des techniques de matrice de transfert. A titre de comparaison, les exposants critiques magnétiques x_σ^b en fonction du nombre d'états q et obtenus en géométries cylindrique et carrée sont présentés sur la figure 3.3.13. L'accord est relativement bon mais se dégrade aux grandes valeurs de q . L'efficacité moindre des algorithmes Monte Carlo à mesure que q augmente est l'explication la plus plausible de ce désaccord.

Méthode utilisée	x_σ^b
Effets de taille finie de $\overline{\langle m^n \rangle}$	0.152(4)
Décroissance des fonctions de corrélation sur le cylindre	0.1505(3)
Décroissance des fonctions de corrélation sur le carré en conditions de bords libres.	0.152(3)
Forme du profil d'aimantation sur le carré en conditions de bords fixes.	0.15031(5)

Tableau 3.3.4 : Estimations de l'exposant critique magnétique obtenu par diverses techniques pour le modèle de Potts $q = 8$ pour une amplitude de désordre $r^* = 10$.

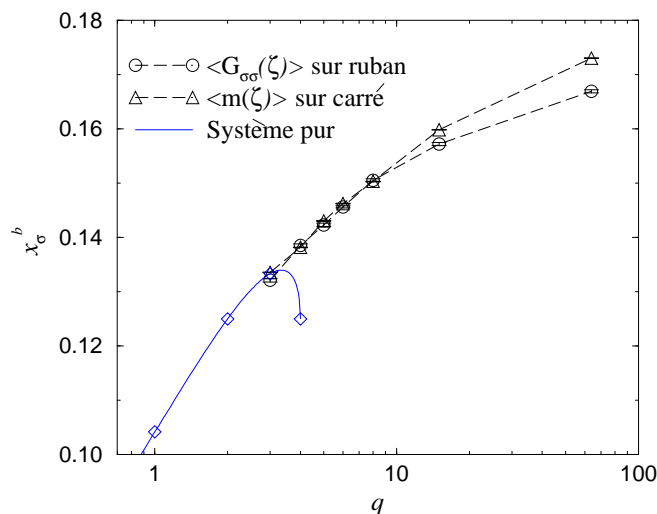


Figure 3.3.13 : Exposant critique magnétique x_σ^b en fonction du nombre d'états q comparé au système pur.

3.5. Comportement critique de surface

3.5.1. Introduction

Les techniques tirant profit des expressions conformes des profils et des fonctions de corrélation sont utilisées ici pour déterminer le comportement critique de surface du modèle de Potts désordonné. Leur efficacité permet de trancher entre les estimations incompatibles de l'exposant x_σ^1 obtenues par l'étude des effets de taille finie et de la dépendance en température de l'aimantation de surface (paragraphe 2.4). La présence de corrections de taille finie importantes est l'explication la plus probable quant à la différence observée sur x_σ^1 . Les expressions conformes présentent l'intérêt d'inclure les effets de taille finie qui apparaissent lorsqu'on confine le système.

3.5.2. Profils conformes d'aimantation

Nous présentons une étude du profil d'aimantation sur un ruban avec des conditions aux limites fixe sur l'une des surfaces et libre sur la seconde. Le ruban étant de largeur L , on s'attend ^[85] à ce que le profil d'aimantation se comporte suivant

$$\langle m_L(i) \rangle = L^{-x_\sigma^b} \mathcal{F} \left(\frac{i}{L} \right) \quad (3.3.16)$$

ce qui assure un comportement de volume de la forme $\langle m \rangle \sim L^{-x_\sigma^b}$ pour tout point à grande distance i de la surface avec $i/L = \text{cste}$. La fonction d'échelle \mathcal{F} dépend des conditions aux limites. Dans la géométrie semi-infinie (à gauche sur la figure 3.2.11), le profil d'aimantation se comporte comme ^[32]

$$\langle m_L(z = x + iy) \rangle = y^{-x_\sigma^b} \mathcal{G} \left(\frac{x}{r} \right), \quad (r^2 = x^2 + y^2). \quad (3.3.17)$$

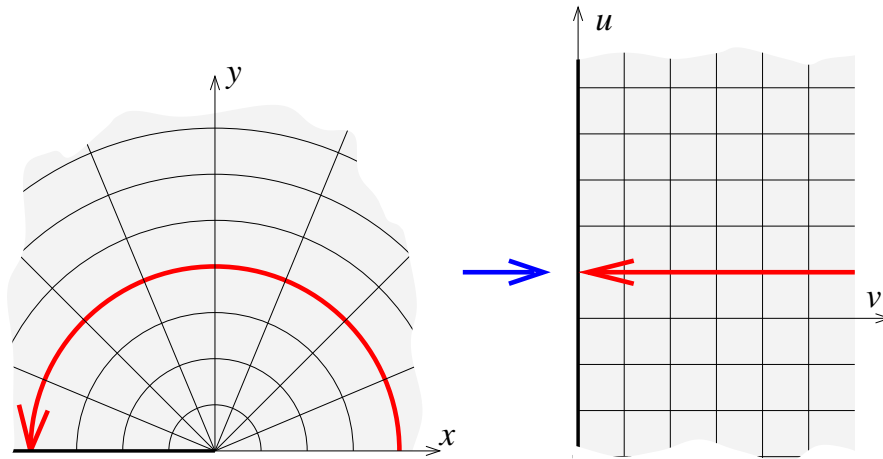


Figure 3.2.11 : Profil d'aimantation dans le demi-plan et son image sur le ruban par la transformation conforme $w = \frac{L}{2\pi} \ln z$.

L'expression correspondante sur ruban est obtenue en utilisant la transformation conforme $w = u + iv = \frac{L}{\pi} \ln z$ et la loi de transformation (1.2.35) :

$$\langle m_L(w) \rangle = |w'(z)|^{-x_\sigma^b} \langle m_L(z(w)) \rangle = \mathcal{A} \left[\frac{L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi v}{L} \right) \right]^{-x_\sigma^b} \mathcal{G} \left[\cos \left(\frac{\pi v}{2L} \right) \right]. \quad (3.3.18)$$

Dans la limite thermodynamique, le comportement d'échelle sur la surface libre $v \rightarrow L$ de l'aimantation de surface $\langle m_1 \rangle \sim L^{-x_\sigma^1}$ impose un comportement asymptotique de $G(\rho)$ de la forme $\rho^{x_\sigma^1}$. L'expression du profil d'aimantation tend asymptotiquement vers

$$\langle m_L(\ell) \rangle \underset{L \rightarrow +\infty}{\sim} \left[\frac{L}{\pi} \sin(\pi\ell) \right]^{-x_\sigma^b} \left[\cos\left(\frac{\pi\ell}{2}\right) \right]^{x_\sigma^1}, \quad \left(\ell = \frac{v}{L}\right). \quad (3.3.19)$$

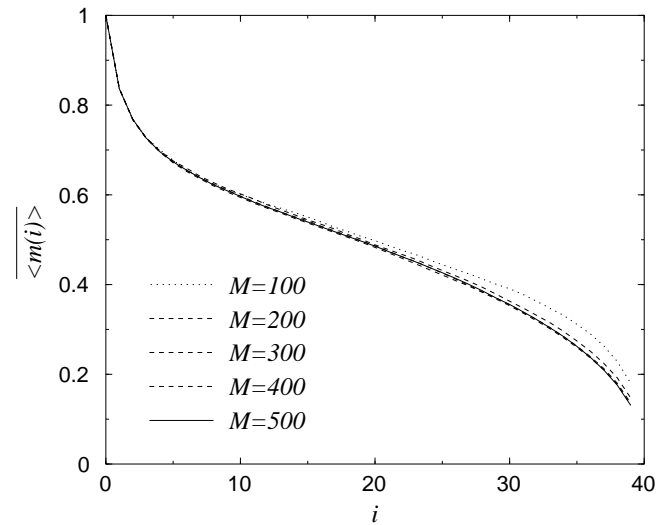


Figure 3.3.14 : Profils d'aimantation pour le modèle de Potts $q = 8$ avec une amplitude de désordre $r^* = 10$ mesurés sur des rubans de largeur $L = 40$ et de longueurs M allant de 100 à 500. Les barres d'erreur, de largeur inférieure à l'épaisseur du trait, ne sont pas représentées.

L	M	Nb. config.
10	100, 200, 300, 400 et 500	1000
14	100, 200, 300, 400 et 500	1000
18	138, 277, 555, et 833	1000
24	80 et 96	1000
	192, 384 et 500	4000
30	100 et 200	1000
	300, 400 et 500	4000
24	100 et 200	1000
	300, 400 et 500	4000

Tableau 3.3.5 : Nombre de configurations (Nb. config.) utilisées en fonction de la largeur L et de la longueur M du ruban.

Nous avons fait le choix de simulations Monte Carlo plutôt que de matrices de transfert. Il nous est ainsi possible de considérer des profils sur des rubans de largeur L allant jusqu'à 40 sites. En contrepartie, les rubans ont une longueur M finie supposée suffisamment grande pour que les expressions conformes relatives au ruban infini puissent être utilisées. La figure 3.3.14 témoigne de la faible variation des profils d'aimantation avec la longueur M du ruban pour $M \simeq 500$. Chaque simulation comporte 1000 itérations de thermalisation suivies de 5000 autres pour le calcul du profil d'aimantation. Les résultats ont été moyennés sur plusieurs milliers de configurations de désordre : 1000 pour les rubans les plus petits et 4000 pour les plus longs et/ou les plus larges (tableau 3.3.5). L'algorithme de Swendsen et Wang a été préféré à celui de Wolff à cause de la présence de conditions aux bords fixes.

En combinant les aimantations de deux points disposés symétriquement par rapport au centre du ruban, c.à.d. en ℓ et $1-\ell$, on peut extraire l'exposant magnétique de surface x_σ^1 . En effet, en utilisant l'expression conforme (3.3.19), il vient

$$x_\sigma^1 = \frac{\ln \langle m_L(1-\ell) \rangle - \ln \langle m_L(\ell) \rangle}{\ln \tan(\pi\ell/2)}. \quad (3.3.20)$$

L'exposant de volume x_σ^b peut également être obtenu à partir d'une combinaison des aimantations aux points ℓ , $1-\ell$ et $1/2$:

$$x_\sigma^b = \frac{\ln \left[\frac{\langle m(\ell) \rangle}{\langle m(1/2) \rangle} \right] \ln \left[\sqrt{2} \cos \left(\frac{\pi(1-\ell)}{2} \right) \right] - \ln \left[\frac{\langle m(1-\ell) \rangle}{\langle m(1/2) \rangle} \right] \ln \left[\sqrt{2} \cos \left(\frac{\pi\ell}{2} \right) \right]}{\ln \sin(\pi\ell) \ln \left[\cotan \left(\frac{\pi\ell}{2} \right) \right]} \quad (3.3.21)$$

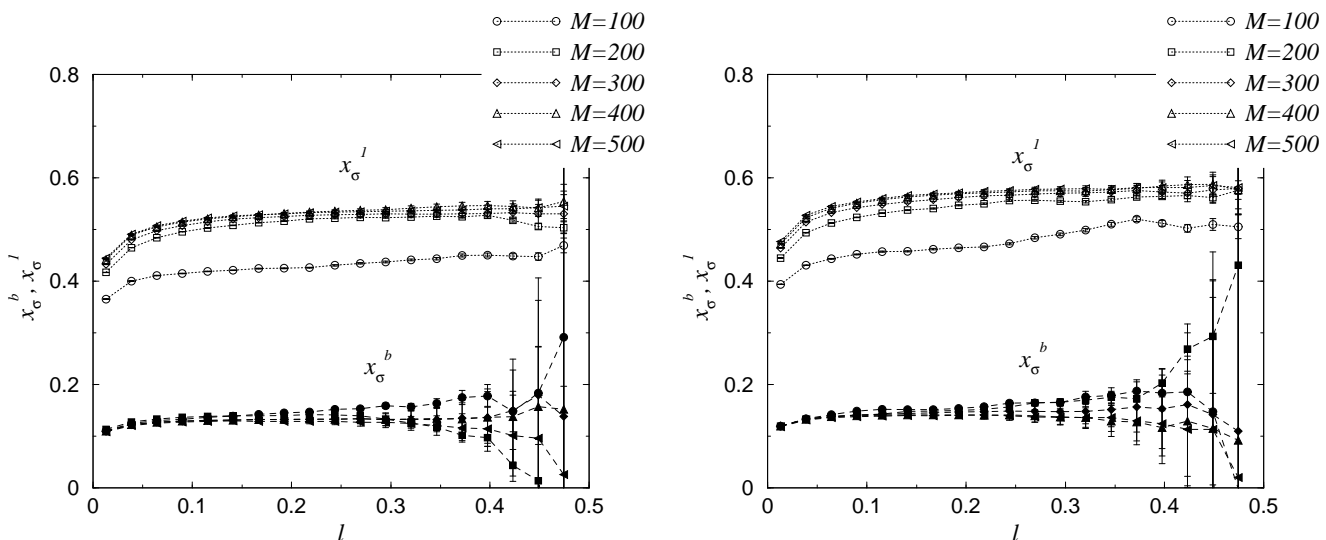


Figure 3.3.15 : Exposants critiques x_σ^b et x_σ^1 calculés en combinant les données en $\ell, 1-\ell$ et $1/2$ du profil d'aimantation du modèle de Potts $q = 4$ (à gauche) et $q = 8$ (à droite) sur des rubans de largeur $L = 40$ et de longueurs $M = 100, 200, 300, 400$ et 500 .

Toutefois, les erreurs numériques s'accumulant, cette dernière technique est moins précise que celles précédemment présentées pour l'estimation de x_σ^b . On s'attend à ce que les courbes d'exposants effectifs (figure 3.3.15) tendent vers une unique valeur quelque soit ℓ dans la limite thermodynamique $M \rightarrow +\infty$ et $L \rightarrow +\infty$. Nous avons considéré, au vu des figures 3.3.15, que la limite $M \rightarrow +\infty$ était atteinte pour les rubans de longueur $M \geq 300$. Pour ces rubans, les exposants effectifs ont été extrapolés linéairement en $1/L$ dans la limite $L \rightarrow +\infty$ pour toute valeur de ℓ .

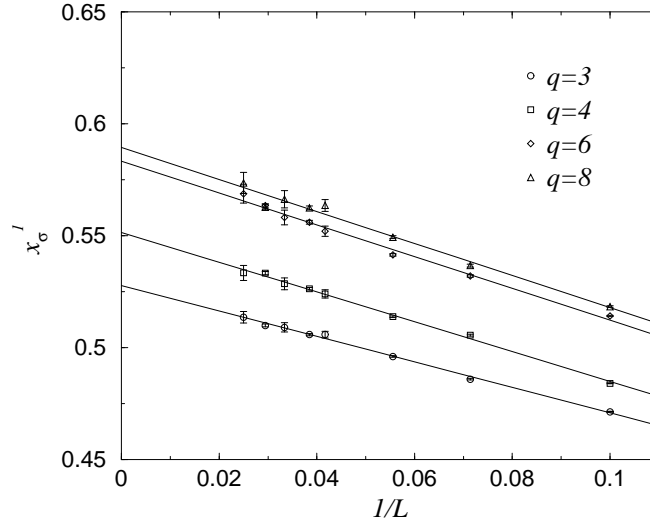


Figure 3.3.16 : Extrapolation dans la limite $L \rightarrow +\infty$ des exposants effectifs de surface x_σ^1 calculés en $\ell = 1/4$.

q	r^*	β_1 (§ 2.4.2)	$x_\sigma^1 = \beta_1/\nu$
3	5	0.542(11)	0.526(3)
4	7	0.561(22)	0.553(2)
6	8	0.581(28)	0.577(2)
8	10	0.597(23)	0.588(3)

Tableau 3.3.6 : Exposants magnétiques de surface en fonction du nombre d'états du modèle de Potts q et calculés d'une part par l'étude de la dépendance de l'aimantation de surface avec la température et d'autre part en interpolant les profils d'aimantation sur ruban avec l'expression conforme.

Les exposants effectifs pour des valeurs de ℓ voisines de $1/2$ sont calculés à partir des aimantations sur des sites ℓ et $1 - \ell$ proches l'un de l'autre. De ce fait, la différence des logarithmes de ces aimantations est du même ordre de grandeur, voire supérieure à la somme des erreurs numériques associées. C'est pourquoi, les courbes 3.3.15 présentent d'importantes fluctuations au voisinage de $\ell = 1/2$. De plus, l'expression conforme du profil d'aimantation (3.3.19) n'est valable que dans la limite continue. Des effets de réseau apparaissent à proximité des surfaces, c.à.d. pour $\ell \simeq 0$ en ce qui concerne

les exposants effectifs de la figure 3.3.15. La région idéale où les erreurs numériques sont faibles et les effets de réseau auront peu d'influence se situe donc aux alentours de $\ell \simeq 1/4$. La figure 3.3.16 présente l'extrapolation dans la limite $L \rightarrow +\infty$ des exposants effectifs pour $\ell = 1/4$. Les exposants critiques magnétiques de surface x_σ^1 sont rassemblés dans le tableau 3.3.6. Si on accepte l'hypothèse d'un exposant ν légèrement supérieur à 1, ces exposants sont compatibles dans les barres d'erreur avec ceux obtenus par l'étude de la dépendance avec la température de l'aimantation de surface, présentée au paragraphe 2.4.2. Le désaccord avec les résultats d'effets de taille finie est probablement la conséquence de l'existence de corrections de taille finie importantes dont l'interpolation du paragraphe 2.4.1 ne tient pas compte.

4. Universalité et multifractalité

4.1. Introduction

Cette section est consacrée à l'étude du comportement critique du modèle de Potts désordonné au voisinage du cas marginal $q = 2$. Les résultats numériques sont obtenus par matrices de transfert et comparés aux résultats perturbatifs ; ils ont été publiés dans la référence [45].

La méthodologie suivie est dans les grandes lignes identique à celle présentée au paragraphe 3.2 mais un effort particulier est porté à la précision des résultats. La densité d'énergie libre a été calculée en utilisant un nombre d'itérations de la matrice de transfert de connectivité porté à $M = 96.10^6$. La précision gagnée permet une détermination plus précise qu'au paragraphe 3.2 de la charge centrale c . Cette dernière a été extraite d'une interpolation de la densité d'énergie libre avec un polynôme de degré 4 en $1/L^2$:

$$\overline{f(L)} = \overline{f(\infty)} - \frac{\pi c}{6L^2} + \frac{\mathcal{A}_4}{L^4} + \frac{\mathcal{A}_6}{L^6} + \frac{\mathcal{A}_8}{L^8}. \quad (3.4.1)$$

La valeur de la charge centrale ainsi obtenue reste encore relativement sensible aux paramètres du calcul et ce d'autant plus que le nombre d'états est proche de $q = 2$. Cependant, l'amplitude optimale de désordre r^* rendant maximale la charge centrale fluctue peu : pour $q = 3.5$ par exemple, on a $r^* = 6.47$ avec une interpolation polynomiale de degré 3 en $1/L^2$ et $r^* = 6.44$ au degré 4. Une telle déviation de r^* n'entraîne qu'une faible variation des exposants $x_\sigma^b(n)$ des moments $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n}^{1/n}$ de la fonction de corrélation spin-spin (figure 3.4.1).

Comme précédemment, les moments de la fonction de corrélation spin-spin ont été moyennés sur $N = 80.10^3$ configurations de désordre. La technique de calcul des fonctions de corrélation spin-spin (voir Annexe) et de ses moments permet une sensibilité de l'ordre de la précision machine (10^{-308}). Nous avons fait l'hypothèse que la loi de covariance (1.2.35) des corrélations s'applique également aux moments des fonctions de corrélation spin-spin et relie leur décroissance en géométrie infinie $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(\mathbf{r}) \rangle^n}^{1/n} \sim r^{-2x_\sigma^b(n)}$ à celle sur le cylindre :

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n}^{1/n} \underset{u \gg 1}{\sim} e^{-\frac{2\pi}{L} x_\sigma^b(n) \cdot u}. \quad (3.4.2)$$

Les exposants $x_\sigma^b(n)$ ainsi obtenus pour chaque largeur de ruban L ont été finalement extrapolés dans la limite thermodynamique avec un polynôme de degré 2 en $1/L$. Nous conserverons dans la suite la notation x_σ^b pour désigner l'exposant $x_\sigma^b(1)$ associé à l'aimantation moyenne. Les erreurs sur les fonctions de corrélation ont été estimées en utilisant leur variance (3.3.9). Lors de toutes les interpolations, chaque point a été pondéré par l'inverse du carré de son erreur ^[190] afin de tenir compte de l'ensemble des sources d'erreurs dans l'estimation des exposants critiques.

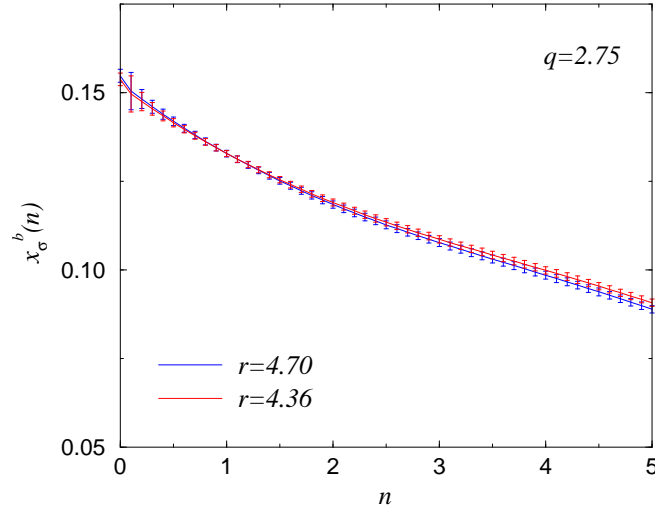


Figure 3.4.1 : Comparaison des exposants $x_\sigma^b(n)$ des moments $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^{n^{1/n}}}$ de la fonction de corrélation spin-spin en fonction de l'ordre n à $q = 2.75$ pour une distribution binaire des couplages d'échange avec des amplitudes de désordre $r^* = 4.70$ et $r = 4.36$.

4.2. Universalité des propriétés critiques magnétiques

4.2.1. Comparaison avec les développements perturbatifs

Les calculs perturbatifs à l'ordre à trois boucles montrent une déviation non nulle de l'exposant magnétique sous l'effet du désordre ^[72, 73, 74] :

$$x_\sigma^b = x_\sigma^{b,\text{Pur}} + \frac{\Gamma^2(-\frac{2}{3})\Gamma^2(\frac{1}{6})}{32\Gamma^2(-\frac{1}{3})\Gamma^2(-\frac{1}{6})} y_H^3 + \mathcal{O}(y_H^4) \quad (3.4.3)$$

où y_H est la dimension d'échelle du champ couplé au désordre, ici la densité d'énergie ($y_H = \alpha/\nu$ est donné exactement par (1.3.11) et (1.3.12)) et $x_\sigma^{b,\text{Pur}}$ est l'exposant associé au système pur. L'amplitude de désordre r apparaît dans le développement perturbatif sous la forme d'un couplage entre les répliques. L'exposant critique (3.4.3) ne dépend donc que de sa valeur r^* au point fixe du groupe de renormalisation. Les estimations numériques de x_σ^b présentent, d'un auteur à l'autre, des variations qui ont parfois été interprétées comme une absence d'universalité. Cependant, comme l'a montré Picco ^[186], il existe d'importants effets de cross-over entre le point fixe désordonné et les points fixes homogène ($r \rightarrow 1$) et de type percolation ($r \rightarrow +\infty$) qui peuvent expliquer certains

désaccords numériques. Dans le but de confirmer cette hypothèse, nous présentons ici une détermination précise de l'amplitude de désordre correspondant au régime du point fixe désordonné et montrons la parfaite compatibilité des exposants magnétiques avec le développement (3.4.3).

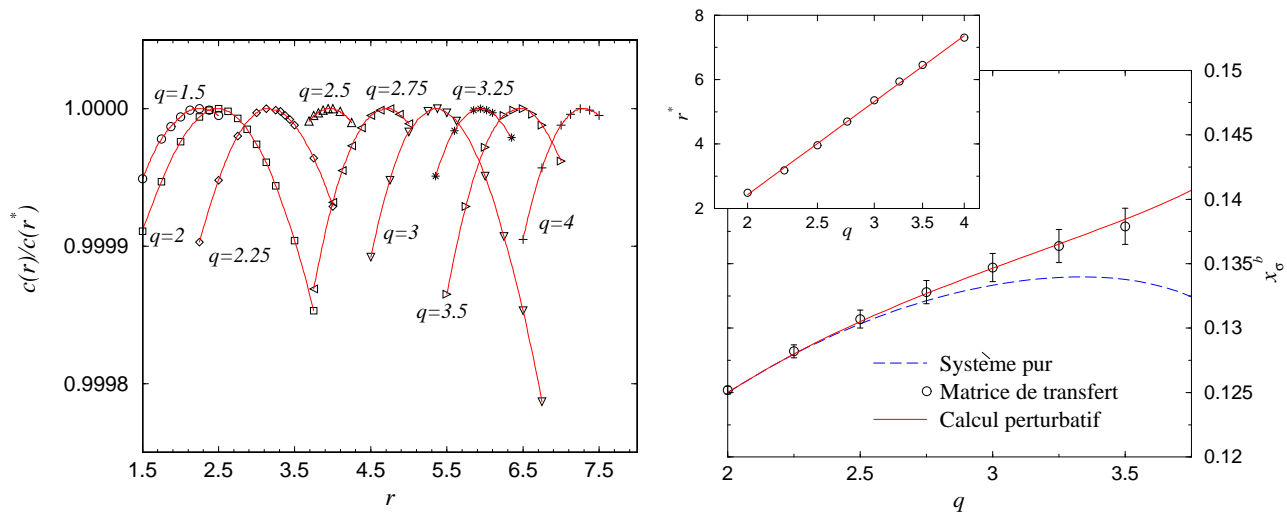


Figure 3.4.2 : Charge centrale $c(r)$ du modèle de Potts désordonné en fonction de l'amplitude du désordre r pour plusieurs nombres d'états q (à gauche) et comparaison des exposants critiques estimés numériquement avec les prédictions analytiques pour les systèmes homogène et désordonné (à droite)

q	r^*	x_σ^b (dév.)	x_σ^b (num.)
2	2.49	0.12500	0.1252(3)
2.25	3.18	0.12800	0.1282(5)
2.5	3.96	0.13051	0.1307(7)
2.75	4.70	0.13269	0.1328(9)
3	5.36	0.13465	0.1347(11)
3.25	5.94	0.13653	0.1364(13)
3.5	6.45	0.13845	0.1379(14)

Tableau 3.4.1 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b donnés par le développement perturbatif et obtenus numériquement à l'amplitude de désordre r^* correspondant au régime du point fixe désordonné.

Le développement (3.4.3) mettant à profit la théorie conforme, il perd toute justification au-delà de $q = 4$, régime où le système pur donne lieu à une transition du premier ordre. Nous avons donc restreint l'étude à l'intervalle $q \in [2; 4]$. La figure 3.4.2 (à gauche) présente la dépendance de la charge centrale c avec l'amplitude de

désordre r . Le régime du point fixe désordonné est supposé correspondre à l'amplitude de désordre r^* définie comme l'amplitude au maximum de la charge centrale. L'insert de la figure 3.4.2 montre une dépendance logarithmique de cette amplitude r^* avec le nombre d'états q du modèle de Potts. Les exposants critiques x_σ^b calculés à l'amplitude de désordre r^* sont rassemblés dans le tableau 3.4.1. Comme le montre la figure 3.4.2 (à droite), les estimations numériques, calculées avec la distribution binaire (3.2.1) sont parfaitement compatibles avec le développement perturbatif (3.4.3) pour lequel le désordre est distribué suivant une loi normale. Il semble donc que, contrairement à une suggestion récente ^[176], la forme particulière de la distribution de désordre n'ait aucune influence sur les propriétés critiques du modèle de Potts désordonné. Notons que, dans le cas $q = 3$, l'estimation numérique est compatible avec le développement perturbatif ce qui tend à prouver que l'estimation au paragraphe 3.2 était le fait d'un désordre trop faible.

4.2.2. Comparaison de plusieurs distributions

Nous présentons ici une comparaison des résultats obtenus pour plusieurs distributions de probabilité des couplages d'échange pour le modèle de Potts à $q = 3$ états.

Distribution ternaire

Nous avons dans un premier temps utilisé la distribution ternaire de couplages d'échange

$$\wp(K_{ij}) = \frac{1}{3} [\delta(K_{ij} - K_1) + \delta(K_{ij} - rK_1^c) + \delta(K_{ij} - K_c)] \quad (3.4.4)$$

pour laquelle la condition d'auto-dualité est

$$\left(e^{K_c} - 1\right)^2 = \left(e^{K_1^c} - 1\right) \left(e^{rK_1^c} - 1\right) = q \quad (3.4.5)$$

c.à.d. si K_c est son propre dual et si K_1^c et rK_1^c sont duaux l'un de l'autre ($K_1^c = (rK_1^c)^*$). L'amplitude du désordre est mesurée par le paramètre r . Il nous a été impossible de déterminer l'amplitude r^* , supposée correspondre au régime du point fixe désordonné, car toutes les interpolations de l'énergie libre que nous avons testées (polynôme de degré 2 à 4 en $1/L^2$ avec la présence ou non d'une correction logarithmique) ont conduit à une charge centrale évoluant de manière monotone avec r . L'énergie libre présente probablement des corrections importantes, l'effet de cross-over avec le point fixe homogène étant amplifié par la présence d'un tiers de couplages égaux à K_c , couplage critique du système pur. Les exposants critiques obtenus par interpolation des fonctions de corrélation spin-spin sont présentés dans le tableau 3.4.2. L'exposant critique magnétique présente un maximum avec l'amplitude du désordre r et sa valeur à ce maximum est compatible avec la valeur obtenue pour une distribution binaire de couplages d'échange.

Distribution	r	x_σ^b
Système pur	$r = 1$	0.1333
Distri. binaire	$r^* \simeq 5.363$	0.1347(11)
Distri. ternaire	$r = 2$	0.1339(3)
	$r = 4$	0.1343(6)
	$r = 5.363$	0.1344(8)
	$r = 8$	0.1344(10)
	$r = 12$	0.1343(13)
	$r = 20$	0.1341(15)

Tableau 3.4.2 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b obtenus pour la distribution ternaire à diverses amplitudes de désordre r à ceux du système pur et pour une distribution binaire.

Distribution quaternaire

Afin de faire disparaître les termes K_c , nous nous sommes par la suite intéressé à la distribution quaternaire :

$$\wp(K_{ij}) = \frac{1}{4} [\delta(K_{ij} - K_1) + \delta(K_{ij} - rK_1) + \delta(K_{ij} - K_2) + \delta(K_{ij} - r^2K_2)] \quad (3.4.6)$$

pour laquelle on a auto-dualité du système lorsque

$$\left(e^{K_1^c} - 1\right) \left(e^{rK_1^c} - 1\right) = \left(e^{K_2^c} - 1\right) \left(e^{r^2K_2^c} - 1\right) = q \quad (3.4.7)$$

c.à.d. si K_1^c et rK_1^c d'une part et K_2^c et $r^2K_2^c$ d'autre part sont duaux l'un de l'autre ($K_1^c = (rK_1^c)^*$ et $K_2^c = (r^2K_2^c)^*$). L'amplitude du désordre est mesurée par r .

La définition (3.4.6) assure la correspondance des limites $r = 1$ et $r \rightarrow +\infty$ avec respectivement le système pur et un problème de type percolation. Le régime du point fixe désordonné, signalé par le maximum de la charge centrale de la figure 3.4.3, intervient à l'amplitude de désordre $r^* \simeq 2.000$. La charge centrale présente également un minimum aux alentours de $r_* \simeq 3.763$ qui, d'après le théorème *c* de Zamolodchikov ^[237] pour une théorie non-unitaire, correspond à un point fixe instable. À nouveau, l'exposant critique magnétique x_σ^b au point fixe désordonné est compatible dans les barres d'erreur avec les estimations obtenues avec d'autres distributions de couplages d'échange (tableau 3.4.3).

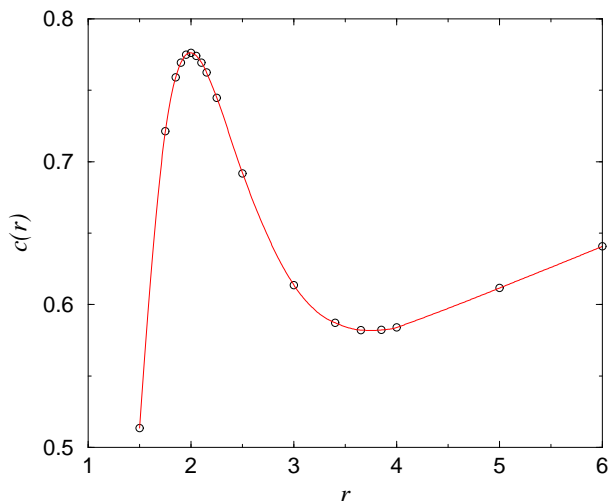


Figure 3.4.3 : Charge centrale c en fonction de l'amplitude du désordre pour la distribution quaternaire de couplages d'échange.

Distribution	r	x_σ^b
Système pur	$r = 1$	0.1333
Distri. binaire	$r^* \simeq 5.363$	0.1347(11)
Distri. quaternaire	$r^* \simeq 2.000$	0.1343(6)
	$r_* \simeq 3.763$	0.0097(12)

Tableau 3.4.3 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b obtenus pour la distribution quaternaire aux deux extremums de la charge centrale à ceux du système pur et pour une distribution binaire.

Distribution continue

Récemment, Olson et Young ^[176] ont proposé des estimations numériques des exposants critiques magnétiques légèrement supérieures à celles précédemment obtenues. Ce désaccord a été expliqué par leur choix d'une distribution continue de couplages d'échange qui selon eux correspond à un désordre plus fort que la distribution binaire jusqu'alors généralement utilisée. La distribution continue d'Olson et Young ne dépend d'aucun paramètre permettant le contrôle de l'amplitude du désordre. Généralisons leur distribution en définissant la distribution de probabilité

$$\wp(y_{ij}) = \frac{1}{\cosh \frac{y_{ij}}{\lambda}}, \quad e^{y_{ij}} = \frac{e^{K_{ij}} - 1}{\sqrt{q}} \quad (3.4.8)$$

où $r = e^\lambda$ est une mesure de l'amplitude du désordre définie de telle sorte que les limites $r = 1$ et $r \rightarrow +\infty$ correspondent respectivement au système pur et à un problème de type percolation. On retrouve la distribution continue d'Olson et Young en posant $r = e$.

La relation de dualité (1.3.8) permet de montrer que le dual y_{ij}^* du “poids” y_{ij} satisfait la relation

$$e^{y_{ij}^*} = \frac{e^{K_{ij}^*} - 1}{\sqrt{q}} = \frac{\sqrt{q}}{e^{K_{ij}^*} - 1} = e^{-y_{ij}}. \quad (3.4.9)$$

L’auto-dualité est obtenue pour un désordre homogène si la probabilité de chaque couplage est égale à celle de son dual :

$$\wp(y_{ij}) \left| \frac{dy_{ij}}{dy_{ij}^*} \right| = \wp(y_{ij}^*) \quad (3.4.10)$$

c.à.d. si la distribution $\wp(y_{ij})$ est paire, ce qui est bien le cas de (3.4.8). La distribution de probabilité des couplages d’échange est donnée par

$$\wp(K_{ij}) = \wp(y_{ij}(K_{ij})) \left| \frac{dy_{ij}}{dK_{ij}} \right| = 2 \frac{q^{1/2\lambda} e^{K_{ij}} (e^{K_{ij}} - 1)^{1/\lambda - 1}}{\pi\lambda (q^{1/\lambda} + (e^{K_{ij}} - 1)^{2/\lambda})} \quad (3.4.11)$$

et peut être numériquement générée par la relation

$$K_{ij} = \ln \left(1 + \sqrt{q} \tan^\lambda \frac{\pi x}{2} \right) \quad (3.4.12)$$

où $x \in [0; 1[$ est une variable aléatoire uniformément distribuée.

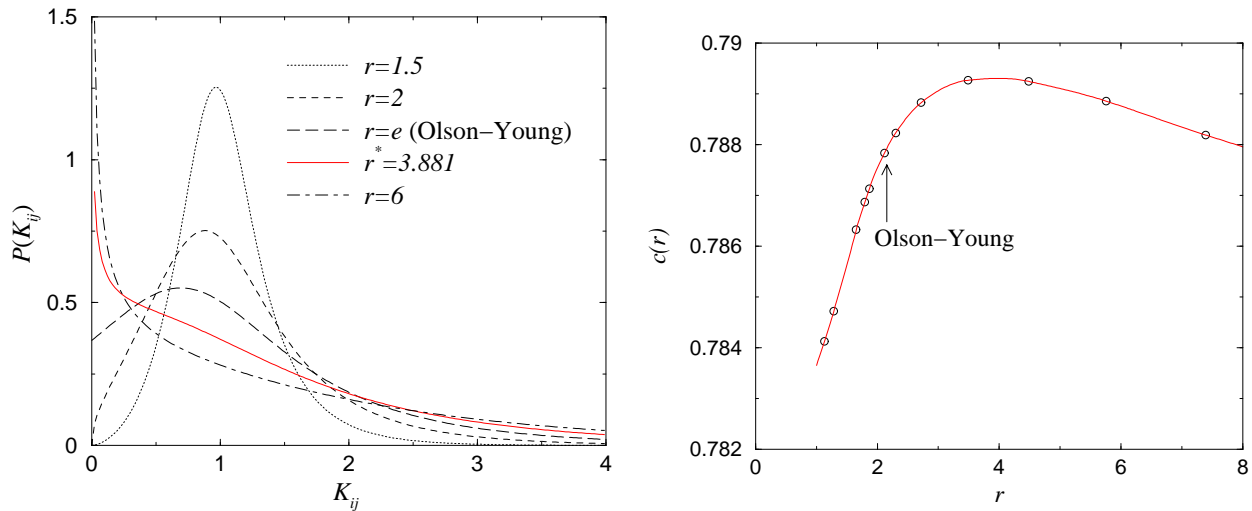


Figure 3.4.4 : Distribution de probabilité de couplage d’échange $\wp(K_{ij})$ pour plusieurs amplitudes de désordre r (à gauche) et comportement de la charge centrale $c(r)$ en fonction de l’amplitude de désordre r (à droite).

Comme dans le cas de la distribution ternaire, nous avons observé une grande sensibilité de la charge centrale avec le degré du polynôme utilisé lors de l’interpolation de la densité d’énergie libre. Il s’agit probablement d’un effet de cross-over dont les couplages forts $K_{ij} \gg 1$ (bien que peu probables) pourraient être à l’origine. La figure 3.4.4 (à droite) présente l’estimation de la charge centrale obtenue en interpolant la

densité d'énergie libre avec un polynôme de degré 3 en $1/L^2$. Le maximum de la charge centrale se situe à une amplitude de désordre $r^* \simeq 3.881$. Le tableau 3.4.4 rassemble les exposants magnétiques x_σ^b mesurés à diverses amplitudes de désordre. Au maximum r^* de la charge centrale, l'exposant est identique à ceux obtenus pour d'autres distributions ce qui apporte une preuve supplémentaire de l'existence d'une universalité dans le modèle de Potts désordonné.

Distribution	r	x_σ^b
Système pur	$r = 1$	0.1333
Distri. binaire	$r^* \simeq 5.363$	0.1347(11)
Distri. ternaire	$r = 5.363$	0.1344(8)
Distri. quaternaire	$r^* \simeq 2.000$	0.1343(6)
Distri. continue	$r = 1.133$	0.1338(1)
	$r = e$	0.1340(9)
	$r^* \simeq 3.881$	0.1344(13)
	$r = 7.389$	0.1348(17)

Tableau 3.4.4 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b obtenus pour le modèle de Potts $q = 3$ avec une distribution continue de couplages d'échange à diverses amplitudes de désordre r à ceux du système pur et avec d'autres distributions.

La distribution continue utilisée par Olson et Young correspond à une amplitude de désordre $r = e$ inférieure à l'amplitude r^* associée au régime du point fixe désordonné. Par conséquent, leurs estimations des exposants critiques doivent présenter une déviation causée par le cross-over avec le point fixe homogène. De plus, comme le montrent les tableaux 3.3.1 et 3.4.1, l'amplitude de désordre optimale r^* croît avec q ce qui doit se traduire par un effet de cross-over de plus en plus marqué à mesure que q augmente. Toutefois, alors que ce cross-over devrait conduire Olson et Young à des estimations des exposants trop faibles (voir le tableau 3.4.4), c'est précisément l'inverse qui se produit. L'explication la plus vraisemblable est que le nombre de configurations de désordre utilisé est insuffisant pour échantillonner correctement les événements rares qui contribuent majoritairement à la moyenne. Les fonctions de corrélation typiques ont effectivement une décroissance plus rapide que la moyenne (figure 3.3.6 à droite).

4.3. Multifractalité des moments de la fonction de corrélation

4.3.1. Auto-moyennance

L'absence d'auto-moyennance des fonctions de corrélation spin-spin est manifeste au vu de leur distribution de probabilité (figure 3.3.6 à gauche), proche d'une loi log-normale. L'écart quadratique réduit (1.4.16) des fonctions de corrélation spin-spin

$$R_{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle} = \frac{\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^2} - \langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^2}{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^2} \quad (3.4.13)$$

tend dans la limite thermodynamique $L \rightarrow +\infty$ vers une limite non nulle, signe de l'absence d'auto-moyennance. Ces limites ont été estimées par une interpolation polynomiale de degré deux en $1/L^2$ de $R_{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$ pour plusieurs valeurs du nombre d'états q (figure 3.4.5 à gauche). Les estimations obtenues présentent une dépendance qui semble être linéaire avec q (figure 3.4.5 à droite). Nous avons ensuite tenté de tester la relation (1.4.21) qui prédit un comportement en loi de puissance de l'écart quadratique réduit en fonction de L avec un exposant égal à α/ν . Pour ce faire, nous avons interpolé avec un polynôme de degré deux en $\ln L$ la quantité $\ln [R_{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle} - \lim_{L \rightarrow +\infty} R_{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}]$. Le terme d'ordre deux est nécessaire pour rendre compte de la courbure des données. Les estimations des exposants α/ν données par le coefficient du terme linéaire sont incohérentes car variant de -3.38 pour $q = 2$ jusqu'à -7.88 pour $q = 3.5$ et donc supérieures aux estimations données par les développements perturbatifs. Les résultats précédents ayant montré la fiabilité des données numériques, deux explications possibles viennent à l'esprit : soit la relation (1.4.21) ne s'applique pas au modèle de Potts désordonné, soit les largeurs de ruban considérées sont trop loin du régime asymptotique, la seconde étant la plus vraisemblable.

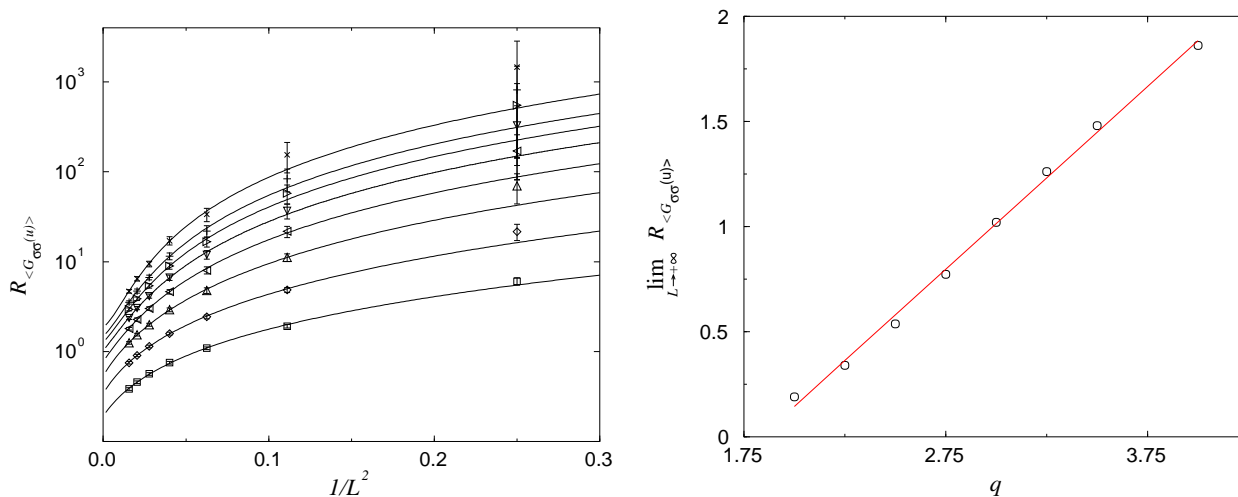


Figure 3.4.5 : Écart quadratique réduit $R_{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle}$ des fonctions de corrélation spin-spin sur ruban en fonction de l'inverse du carré de sa largeur L pour le modèle de Potts désordonné avec des nombres d'états allant de $q = 2$ à 4 (à gauche) et limite $L \rightarrow +\infty$ (à droite). Les courbes continues correspondent à des interpolations avec un polynôme de degré deux en $1/L^2$ à gauche et linéaire à droite.

4.3.2. Spectre multifractal

Les dimensions d'échelle $x_\sigma^b(n)$ associés aux moments $\overline{G_{\sigma\sigma}^n(u)}^{1/n}$ de la fonction de corrélation spin-spin du modèle de Potts désordonné à q états ont été calculés perturbativement à l'ordre à une boucle par Ludwig ^[148] :

$$x_\sigma^b(n) = x_\sigma^{b,\text{Pur}} - \frac{n-1}{16} y_H + \mathcal{O}(y_H^2). \quad (3.4.14)$$

où $y_H = \alpha/\nu$, dont la dépendance avec q est donnée par (1.3.11), mesure la pertinence du désordre. Le calcul a été récemment étendu à l'ordre à deux boucles par Lewis ^[140, 141] :

$$x_\sigma^b(n) = x_\sigma^{b,\text{Pur}} - \frac{n-1}{16} \left\{ y_H + \left[\frac{11}{12} - 4 \ln 2 + \frac{n-2}{24} \left(33 - \frac{29\pi}{\sqrt{3}} \right) \right] \frac{y_H^2}{2} \right\} + \mathcal{O}(y_H^3). \quad (3.4.15)$$

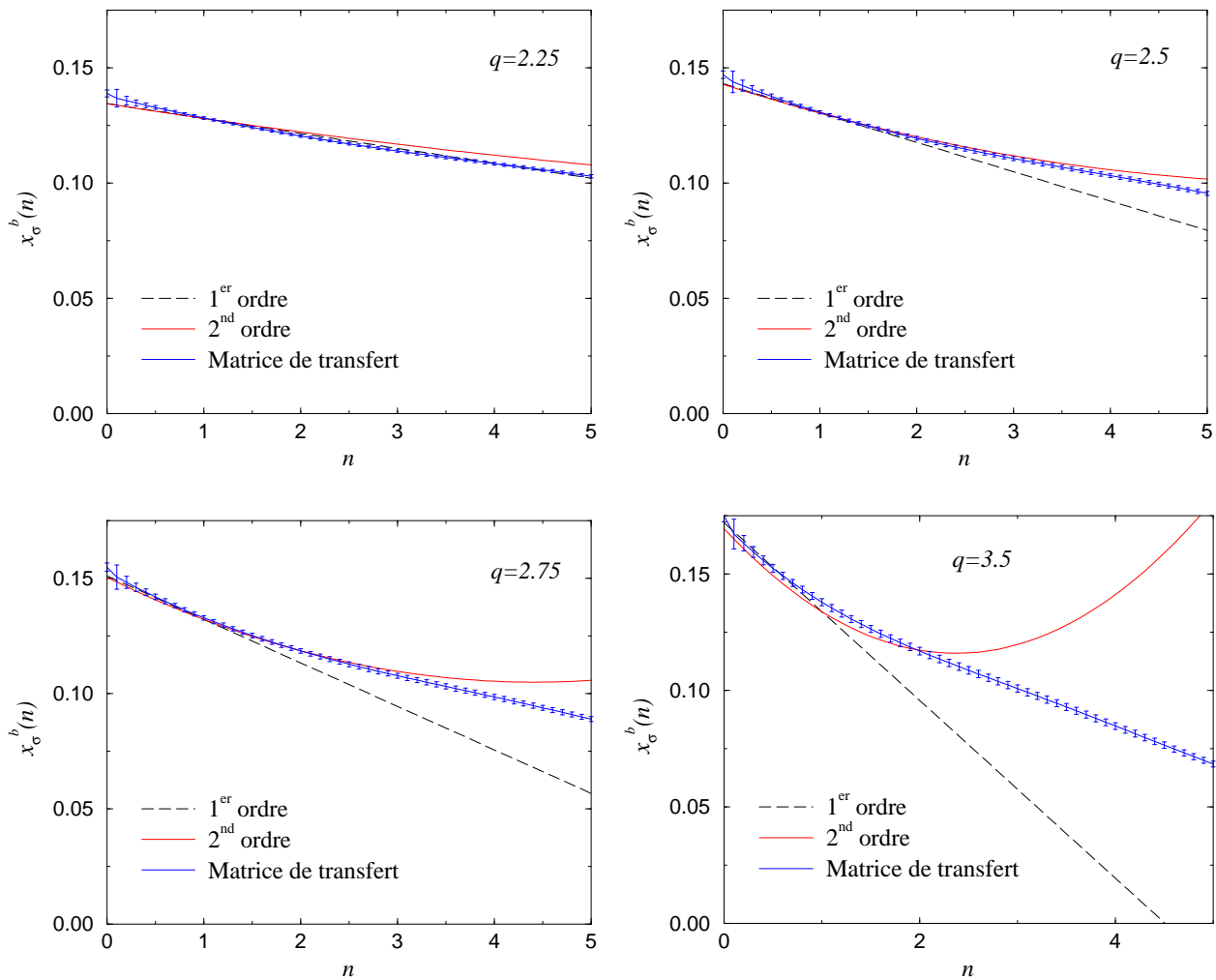


Figure 3.4.6 : Comparaison des estimations numériques des exposants critiques $x_\sigma^b(n)$, associés aux moments de la fonction de corrélation spin-spin, aux développements perturbatifs en fonction de l'ordre n du moment pour diverses valeurs du nombre d'états q .

Nous avons calculé numériquement les cent moments $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n}^{1/n}$ d'ordre n uniformément répartis sur l'intervalle $n \in]0; 10]$ pour la distribution binaire à l'amplitude de désordre optimale r^* . L'erreur a été estimée en utilisant leur variance

$$\Delta \overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n} = \left[\frac{\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^{2n}} - \overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n}^2}{N_G} \right]^{1/2} \quad (3.4.16)$$

et n'a donc pu être calculée que pour la moitié d'entre eux ($n < 5$). Le moment d'ordre $n = 0$ présenté a été défini comme $e^{\overline{\ln G_{\sigma\sigma}(u)}}$ et ne correspond à la fonction de corrélation typique que dans l'hypothèse d'une distribution de probabilité log-normale (ce qui semble approximativement le cas au vu de la figure 3.3.6).

Comme le montrent les figures 3.4.6, les résultats numériques sont parfaitement compatibles avec les développements perturbatifs (3.4.15), en particulier au voisinage de $q = 2$, région où les développements perturbatifs en $q - 2$ convergent le plus rapidement. Pour les valeurs de q plus éloignées de $q = 2$, le terme d'ordre deux contribue fortement au développement perturbatif et il est concevable d'imaginer qu'un terme d'ordre trois abaisserait la valeur des exposants $x_\sigma^b(n)$ de manière à les rapprocher des valeurs numériques. Il faut noter par ailleurs qu'en raison d'un argument de convexité ^[148], l'exposant $x_\sigma^b(n)$ doit être une fonction décroissante de n , ce qui limite la validité du développement perturbatif aux valeurs petites de n . L'augmentation des fluctuations sur les estimations numériques des moments d'ordre n petit est relativement peu perceptible. En revanche, les événements rares contribuant d'autant plus fortement aux moments d'ordre n que n est grand, le calcul des moyennes sur un nombre fini de configurations de désordre engendre des barres d'erreur de plus en plus importantes à mesure que n augmente.

4.3.3. Universalité du spectre multifractal

Nous avons montré au paragraphe 4.2 que les exposants critiques associés à la décroissance des fonctions de corrélation spin-spin ne dépendaient pas de la distribution de désordre sur laquelle elles étaient moyennées. Nous montrons ici qu'il est en de même pour les moments de la fonction de corrélation.

Nous avons calculé les moments de la fonction de corrélation spin-spin pour les distributions de couplages d'échange binaire (3.2.1) et continue (3.4.11) avec les amplitudes de désordre r^* rendant maximale la charge centrale pour chacune des deux distributions. Les estimations numériques des exposants associés à la décroissance de ces moments sont compatibles dans les barres d'erreur (figure 3.4.7). Notons que la déviation systématique entre les estimations numériques pour les moments d'ordre élevé est vraisemblablement liée à un échantillonnage moins bon des événements rares dans le cas de la distribution continue, pour laquelle les couplages d'échange peuvent prendre des valeurs arbitrairement grandes. La sous-estimation de la contribution des événements rares conduit par conséquent à un exposant plus proche de l'événement typique $x_\sigma^b(0)$.

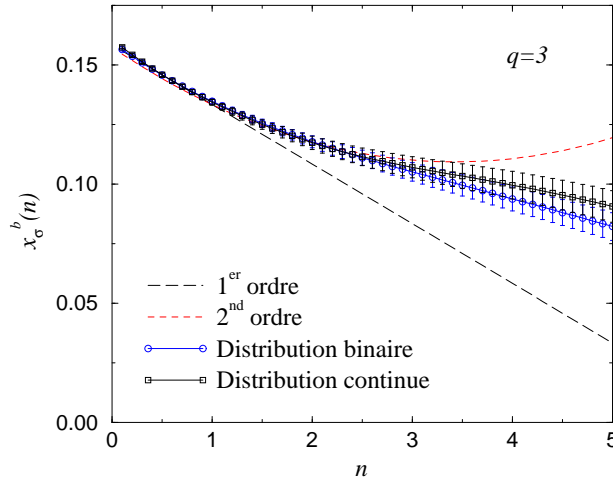


Figure 3.4.7 : Comparaison des estimations numériques des exposants critiques $x_\sigma^b(n)$, associés aux moments de la fonction de corrélation spin-spin, aux développements perturbatifs en fonction de l'ordre n du moment pour les distributions binaire et continue à $q = 3$.

4.3.4. Distribution de probabilité

En géométrie infinie, la décroissance asymptotique des moments $\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n}$ de la fonction de corrélation spin-spin est reliée à la distribution de probabilité $\wp_u(\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle)$ par

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n} = \int_0^1 dG \wp_u(G) G^n \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \mathcal{A}_n u^{-2X(n)} \quad (3.4.17)$$

où on a posé $X(n) = nx_\sigma^b(n)$. Le changement de variable $y = -\ln G$ avec la relation $\wp_u(G) dG = \tilde{\wp}_u(y) dy$ permet d'écrire la relation (3.4.17) sous la forme d'une transformée de Laplace de la distribution de probabilité $\tilde{\wp}_u(y)$:

$$\int_0^{+\infty} dy e^{-ny} \tilde{\wp}_u(y) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \mathcal{A}_n u^{-2X(n)}. \quad (3.4.18)$$

Par inversion, la transformée de Mellin-Fourier donne accès à l'expression de la distribution de probabilité en fonction des moments de la fonction de corrélation spin-spin :

$$\begin{aligned} \tilde{\wp}_u(y) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} & \frac{1}{2i\pi} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} dn \mathcal{A}_n u^{-2X(n)} e^{ny} \\ & = \frac{1}{2i\pi} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} dn e^{ny-2X(n) \ln u + \ln \mathcal{A}_n}. \end{aligned} \quad (3.4.19)$$

Le calcul de l'intégrale peut se faire dans l'approximation du point de selle :

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial n} [ny - 2X(n) \ln u + \ln \mathcal{A}_n] \right)_{n^*} = 0 \\ \Leftrightarrow \frac{1}{2} \frac{y}{\ln u} & = \left(\frac{\partial X(n)}{\partial n} \right)_{n^*} - \underbrace{\frac{1}{2 \ln u} \left(\frac{\partial \ln \mathcal{A}_n}{\partial n} \right)_{n^*}}_{\xrightarrow{u \rightarrow +\infty} 0} \end{aligned} \quad (3.4.20)$$

En posant $\alpha = y/2 \ln u$, il vient par conséquent

$$\tilde{\wp}_u(y) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{2i\pi} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} dn e^{-2 \ln u [X(n) - n\alpha]} \sim e^{-2 \ln u H(\alpha)} \quad (3.4.21)$$

où $H(\alpha)$ est la transformée de Legendre de l'exposant $X(n)$ définie comme

$$H(\alpha) = X(n^*) - \alpha n^*, \quad \alpha = \left(\frac{\partial X(n)}{\partial n} \right)_{n^*} \quad (3.4.22)$$

et où α est la variable conjuguée de n . $H(\alpha)$ est une fonction convexe ^[148] et donc $x_\sigma^b(n)$ décroît avec n .

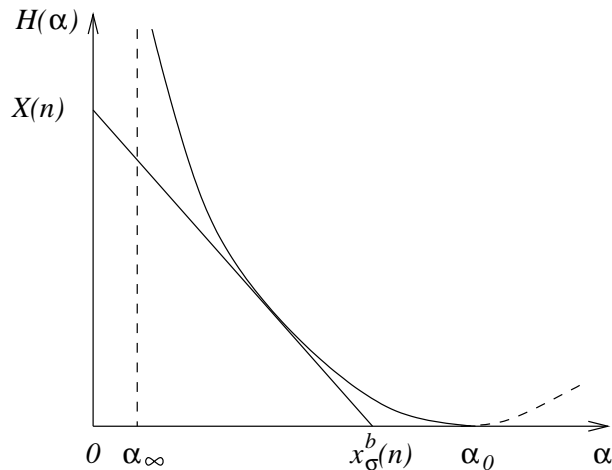


Figure 3.4.8 : Exemple de détermination géométrique des exposants $X(n)$ à partir de leur transformée de Legendre $H(\alpha)$.

D'après (3.4.19), le maximum de la distribution de probabilité est obtenu pour le minimum α_0 de la fonction de Legendre $H(\alpha)$. Les définitions de $y = -\ln G$ et de α (3.4.20) conduisent à la décroissance asymptotique des fonctions de corrélation typiques :

$$\alpha_0 = \frac{1}{2} \frac{y}{\ln u} = -\frac{1}{2} \frac{\ln G^{\text{typique}}(u)}{\ln u} \Leftrightarrow G^{\text{typique}}(u) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} u^{-2\alpha_0} \quad (3.4.23)$$

La relation (3.4.22) fait apparaître la méthode géométrique de détermination des exposants critiques $X(n) = n x_\sigma^b(n)$ présentée sur la figure 3.4.8. L'exposant $X(n)$ est donné par l'intersection de l'axe des ordonnées avec la droite tangente à la courbe $H(\alpha)$ et de pente $-n$.

En géométrie cylindrique, la décroissance des moments de la fonction de corrélation spin-spin est exponentielle (1.2.42) :

$$\overline{\langle G_{\sigma\sigma}(u) \rangle^n} = \int_0^1 dG G^n \wp_u(G) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \mathcal{A}_n e^{-\frac{2\pi u}{L} X(n)} \quad (3.4.24)$$

où on a de nouveau posé $X(n) = nx_\sigma^b(n)$. Le calcul est identique à celui présenté précédemment pour la géométrie plane. Le changement de variable $y = -\ln G$ puis une transformée de Mellin-Fourier conduisent à

$$\tilde{\varphi}_u(y) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{2i\pi} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} dn e^{ny - \frac{2\pi u}{L} X(n) + \ln \mathcal{A}_n}. \quad (3.4.25)$$

Le terme constant $\ln \mathcal{A}_n$ est négligeable devant les deux précédents aux grandes valeurs de u . L'intégrale peut être évaluée par la méthode du point de selle :

$$\tilde{\varphi}_u(y) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} e^{n^*y - \frac{2\pi u}{L} X(n^*)} = e^{-\frac{2\pi u}{L} H(\alpha)} \quad (3.4.26)$$

où la fonction de Legendre $H(\alpha)$ de $X(n)$ est définie par

$$H(\alpha) = X(n^*) - n^* \alpha, \quad \alpha = \left(\frac{\partial X(n)}{\partial n} \right)_{n^*} = \frac{L}{2\pi u} y. \quad (3.4.27)$$

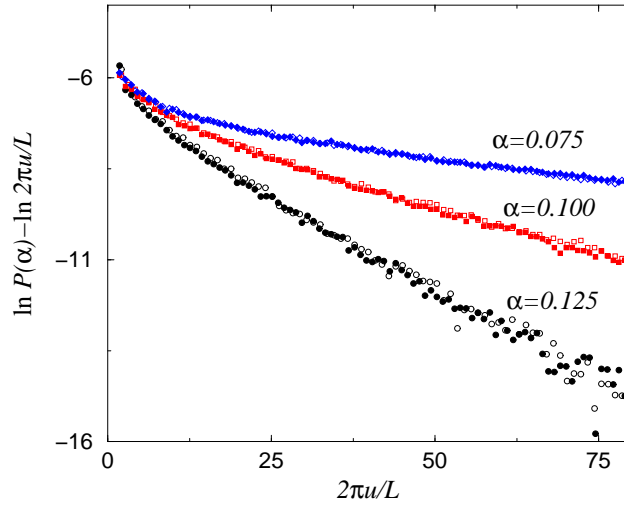


Figure 3.4.9 : Logarithme de la distribution de probabilité $\bar{\varphi}_u(\alpha)$ translatée de la constante $\ln \frac{2\pi u}{L}$. Les symboles ouverts (fermés) correspondent aux résultats obtenus sur un ruban de largeur $L = 6$ ($L = 7$).

La fonction de Legendre a été calculée par interpolation de la distribution de probabilité

$$\bar{\varphi}_u(\alpha) = \left| \frac{dy}{d\alpha} \right| \tilde{\varphi}_u(y) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{2\pi u}{L} e^{-\frac{2\pi u}{L} H(\alpha)} \quad (3.4.28)$$

reliée à celle de la fonction de corrélation spin-spin par le changement de variable $\alpha = \frac{L}{2\pi u} y = -\frac{L}{2\pi u} \ln G_{\sigma\sigma}(u)$. Les résultats numériques ont été obtenus pour le modèle de Potts à $q = 3$ états sur des rubans de largeur $L = 6$ et $L = 7$ avec 96000 configurations de désordre. La figure 3.4.9 montre une déviation relativement importante des données numériques pour un désordre binaire à l'amplitude de désordre r^* par rapport à la droite attendue d'après (3.4.28), en particulier à $2\pi u/L$ petit. Le désaccord est en grande

partie dû à l'approximation faite pour le calcul de l'intégrale (3.4.25). En approximant l'argument de l'exponentielle par $f(n) \underset{n \rightarrow n^*}{\sim} f(n^*) + \frac{1}{2}(n - n^*)^2 f''(n^*)$ et non plus seulement par sa valeur minimale $f(n^*) = H(\alpha)$, il vient ^[57]

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_u(y) &\underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \mathcal{A}_{n^*} e^{-\frac{2\pi u}{L}(X(n^*) - n^* \alpha)} \left(\frac{2\pi u}{L}\right)^{-1/2} \left[\left(\frac{\partial^2 X(n)}{\partial n^2} \right)_{n^*} \right]^{-1/2} \\ &\underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \left(\frac{2\pi u}{L}\right)^{-1/2} e^{-\frac{2\pi u}{L} H(\alpha)}. \end{aligned} \quad (3.4.29)$$

La relation (3.4.28) est alors remplacée par

$$\bar{\varphi}_u(\alpha) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} \left(\frac{2\pi u}{L}\right)^{1/2} e^{-\frac{2\pi u}{L} H(\alpha)} \quad (3.4.30)$$

qui, après inversion, permet la détermination numérique de la fonction de Legendre :

$$H(\alpha) \underset{u \rightarrow +\infty}{\sim} -\frac{L}{2\pi u} \left[\ln \bar{\varphi}_u(\alpha) - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi u}{L} \right) \right]. \quad (3.4.31)$$

L'estimation numérique du logarithme de la distribution de probabilité $\bar{\varphi}_u(\alpha)$ présentée sur la figure 3.4.10 est cette fois cohérente avec la relation (3.4.31).

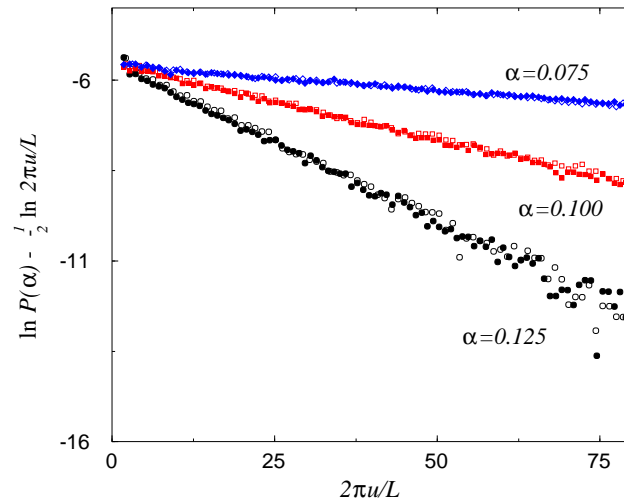


Figure 3.4.10 : Logarithme de la distribution de probabilité $\bar{\varphi}_u(\alpha)$ translatée de la constante $\frac{1}{2} \ln \frac{2\pi u}{L}$. Les symboles ouverts (fermés) correspondent aux résultats obtenus sur un ruban de largeur $L = 6$ ($L = 7$).

La fonction de Legendre $H(\alpha)$ est compatible pour $q = 3$ avec les résultats perturbatifs de Ludwig au premier ordre et de Lewis à l'ordre deux pour les grandes valeurs de α comme en témoigne la figure 3.4.11 (à gauche) où $H(\alpha)$ a été déduit de la donnée de $x_\sigma^b(n)$ en utilisant (3.4.27). Les estimations numériques pour d'autres valeurs du nombre d'états q du modèle de Potts sont présentées sur la figure 3.4.11 (à droite).

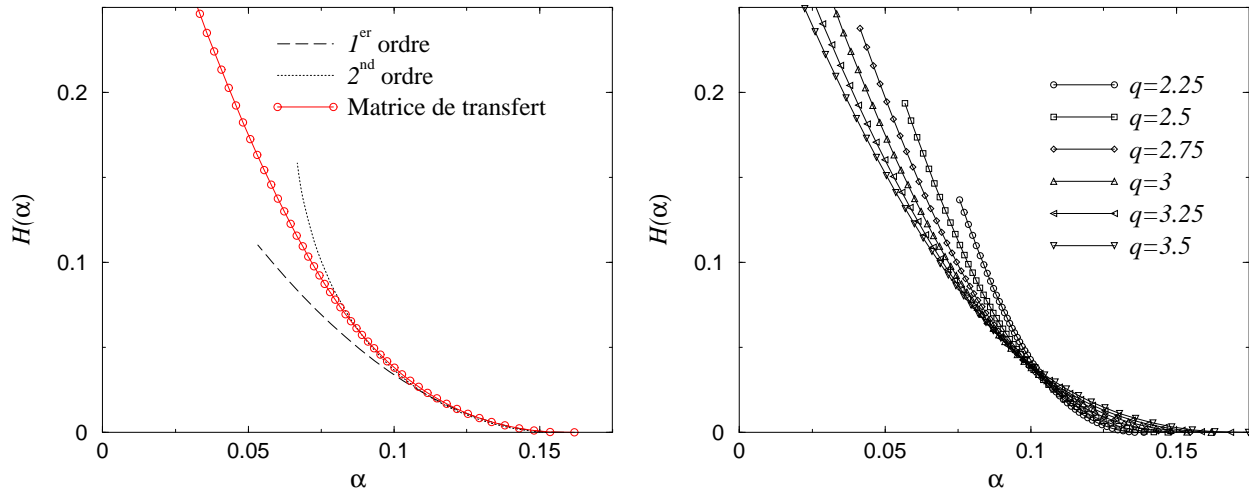


Figure 3.4.11 : Fonctions de Legendre $H(\alpha)$ des exposants $X(n) = nx_{\sigma}^b(n)$ en fonction de α comparées aux résultats perturbatifs pour $q = 3$ (à gauche) et pour toutes les valeurs du nombre d'états q considérés (à droite).

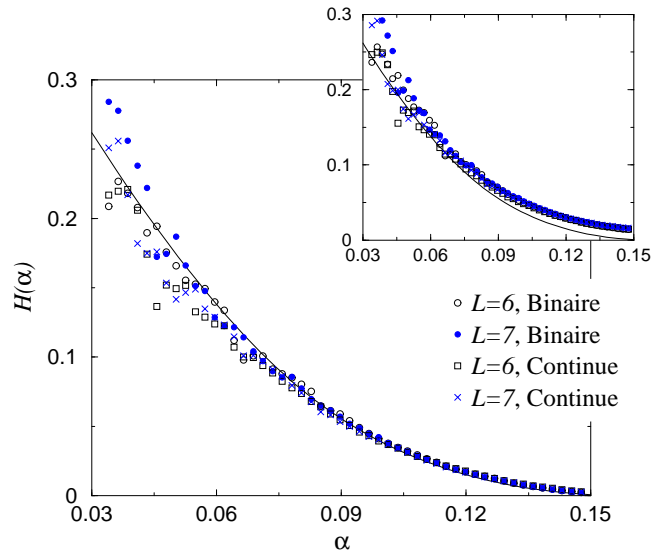


Figure 3.4.12 : Fonctions de Legendre $H(\alpha)$ calculées à partir de la distribution de probabilité des fonctions de corrélation spin-spin en fonction de α pour des distributions de désordre binaire et continue dans le cas $q = 3$. L'insert correspond à la détermination de la fonction de Legendre dans l'approximation du point de selle et les courbes continues à la fonction de Legendre obtenue en utilisant les exposants $x_{\sigma}^b(n)$.

Comme les exposants critiques (figure 3.4.7), la fonction de Legendre $H(\alpha)$ est universelle dans le sens où elle ne dépend pas de la distribution de désordre. La figure 3.4.12 présente les estimations numériques de $H(\alpha)$ obtenues en utilisant cette fois (3.4.31) et la distribution de probabilité des fonctions de corrélation spin-spin pour les distributions de désordre binaire (3.2.1) et continue (3.4.11). L'universalité se manifeste par l'accumulation du nuage de points autour de la courbe continue correspondant à

la détermination de $H(\alpha)$ à partir de (3.4.27) et des exposants $x_\sigma^b(n)$. La difficulté d'échantillonner de manière correcte les événements rares $\langle G(u) \rangle \sim \mathcal{O}(1)$ est à l'origine de la dispersion importante des points autour de la courbe continue dans la région $\alpha \ll 1$ dominée par les événements rares.

4.4. Symétrie des répliques

La possibilité d'une brisure spontanée de la symétrie des répliques dans les verres de spin a fait l'objet d'un nombre important de travaux et reste une question ouverte ^[165]. Concernant le modèle de Potts, la question a été soulevée par Dotsenko *et al* ^[68]. Ces auteurs ont calculé les premiers termes du développement en perturbation au voisinage de $q = 2$ de l'exposant critique $x_\sigma^b(2)$ associé au moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin. En supposant préservée la symétrie des répliques, ils obtiennent

$$x_\sigma^b(2) = x_\sigma^{b,\text{Pur}} - \frac{1}{16}y_H + \frac{1}{32} \left(4 \ln 2 - \frac{11}{12} \right) y_H^2 + \mathcal{O}(y_H^3) \quad (3.4.32)$$

en accord avec l'expression plus générale (3.4.15) de Lewis alors que, lorsque cette symétrie est brisée, ils parviennent à l'expression

$$x_\sigma^b(2) = x_\sigma^{b,\text{Pur}} - \frac{1}{16}y_H + \frac{1}{32} \left(4 \ln 2 - \frac{5}{12} \right) y_H^2 + \mathcal{O}(y_H^3). \quad (3.4.33)$$

Techniques	Auteurs	$x_\sigma^b(2)$
Dév. perturbatif (symétrie des répliques)	Dotsenko <i>et al.</i> ^[68]	0.1176
Dév. perturbatif (brisure de symétrie)		0.1201
Monte Carlo	Dotsenko <i>et al.</i> ^[68]	0.113(1)
Monte Carlo	Lewis ^[142]	0.1140(5)
Matrice de transfert	Palágyi <i>et al.</i> ^[179]	0.116(1)
Monte Carlo	Olson <i>et al.</i> ^[176]	0.119(2)

Tableau 3.4.5 : Comparaison des exposants critiques $x_\sigma^b(2)$ pour le moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin du modèle de Potts $q = 3$ disponibles dans la littérature.

La difficulté à tester numériquement ces expressions tient à leur différence petite : la déviation entraînée par la brisure de la symétrie des répliques est égale à seulement 27 % du terme d'ordre deux en y_H . De plus, cette déviation croît avec y_H donc avec q alors que les développements perturbatifs ne sont valables qu'au voisinage de $q = 2$. Les simulations Monte Carlo réalisées par Dotsenko *et al.* pour le modèle de Potts $q = 3$

plaident en faveur d'une absence de brisure de la symétrie des répliques. Toutefois, leur estimation numérique de l'exposant $x_\sigma^b(2)$ et celles qui la suivirent ne sont pas suffisamment précises pour que soit avancée une conclusion définitive : certains résultats ne sont compatibles avec aucun des deux scénarios et l'un d'entre eux l'est avec celui d'une brisure spontanée de la symétrie des répliques (tableau 3.4.5).

Nous présentons ici le résultat du calcul du moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin pour plusieurs valeurs du nombre d'états q du modèle de Potts en mettant à profit la liberté d'un paramètre q continu dans la formulation de Fortuin-Kasteleyn (figure 3.4.13). Les estimations numériques de l'exposant $x_\sigma^b(2)$ sont compatibles dans les barres d'erreur avec le développement perturbatif (3.4.32) associé à l'absence de brisure de symétrie des répliques et excluent celui correspondant au cas d'une brisure de cette symétrie. Seul un point, à $q = 2.25$, est incompatible avec le développement perturbatif (3.4.32). Les moments de la fonction de corrélation présentent probablement des corrections logarithmiques semblables à celles attendues pour le modèle d'Ising ($q = 2$) et dont l'amplitude s'annule dans la limite thermodynamique pour redonner (3.4.32). Une nouvelle preuve numérique de l'absence de brisure de symétrie des répliques a depuis été apportée par Jacobsen au moyen d'une étude des exposants associés à la décroissance des fonctions de corrélation énergie-énergie ^[111].

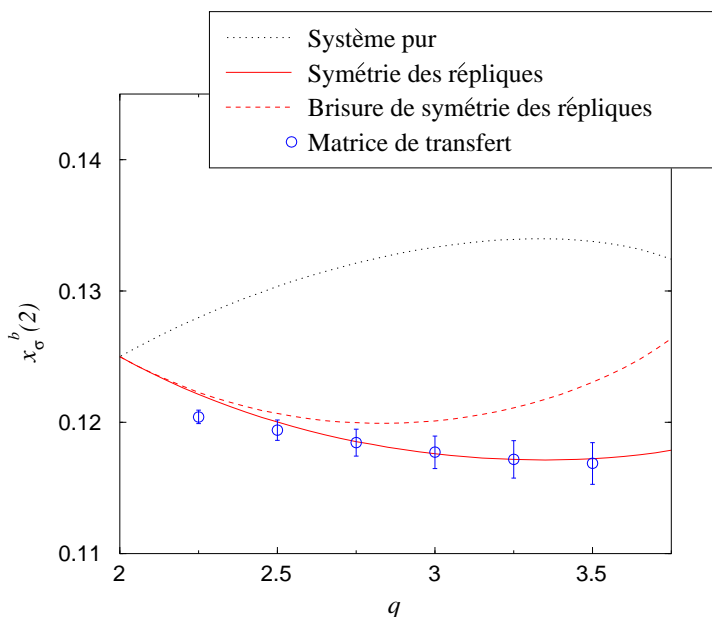


Figure 3.4.13 : Exposants critiques $x_\sigma^b(2)$ pour le moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin obtenus numériquement et comparés au système pur et aux résultats perturbatifs.

Le même type de calcul a également été mené pour le modèle de Potts $q = 3$ pour les distributions de désordre ternaire (3.4.2) et continue (3.4.11). Là encore, les estimations numériques de l'exposant $x_\sigma^b(2)$ sont compatibles avec le développement perturbatif (3.4.32) correspondant à une absence de brisure de la symétrie des répliques (tableau 3.4.6).

q	Symétrie des répliques équation (3.4.32)	Brisure de symétrie équation (3.4.33)	Matrice de transfert Distr. binaire
2.25	0.12213	0.12229	0.1204(5)
2.5	0.12002	0.12067	0.1194(8)
2.75	0.11854	0.11997	0.1185(10)
3	0.11761	0.12011	0.1177(12)
3.25	0.11718	0.12110	0.1172(14)
3.5	0.11723	0.12304	0.1169(16)
			Distr. ternaire
3	0.11761	0.12011	0.1182(12)
			Distr. continue
3	0.11761	0.12011	0.1173(14)

Tableau 3.4.6 : Exposants critiques $x_\sigma^b(2)$ associés à la décroissance du moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin obtenus par développement perturbatif avec et sans brisure spontanée de la symétrie des répliques et comparés aux estimations numériques.

4.5. Multifractalité et invariance conforme des moments des profils

Nous présentons ici une étude des moments du profil d'aimantation sur un ruban en conditions de bords respectivement fixe et libre. Les paramètres des simulations Monte Carlo auxquelles nous avons eu recours pour ce calcul ont déjà été présentés au paragraphe 3.5. Nous nous sommes limités au cas du modèle de Potts $q = 8$.

4.5.1. Invariance conforme des moments

Le moment d'ordre $n > 0$ du profil d'aimantation correspond à la quantité $\overline{\langle m_L(\ell) \rangle^n}^{1/n}$, où la racine $n^{\text{ième}}$ est introduite pour faciliter la comparaison des exposants. Le moment d'ordre $n = 0$ est défini comme la quantité $e^{\overline{\ln \langle m_L(\ell) \rangle}}$ qui dans le cas d'une distribution log-normale correspond au profil typique. La multifractalité du modèle se traduit par une variation des exposants critiques $x_\sigma^{b,1}(n)$ associés à chacun des moments en fonction de leur ordre n . La généralisation directe de l'expression conforme (3.3.19) aux moments du profil :

$$\overline{\langle m_L(\ell) \rangle^n}^{1/n} \underset{L \rightarrow +\infty}{\sim} \left[\frac{L}{\pi} \sin(\pi\ell) \right]^{-x_\sigma^b(n)} \left[\cos\left(\frac{\pi\ell}{2}\right) \right]^{x_\sigma^1(n)} \quad (3.4.34)$$

est satisfaite par les données numériques comme en témoigne la figure 3.3.16.

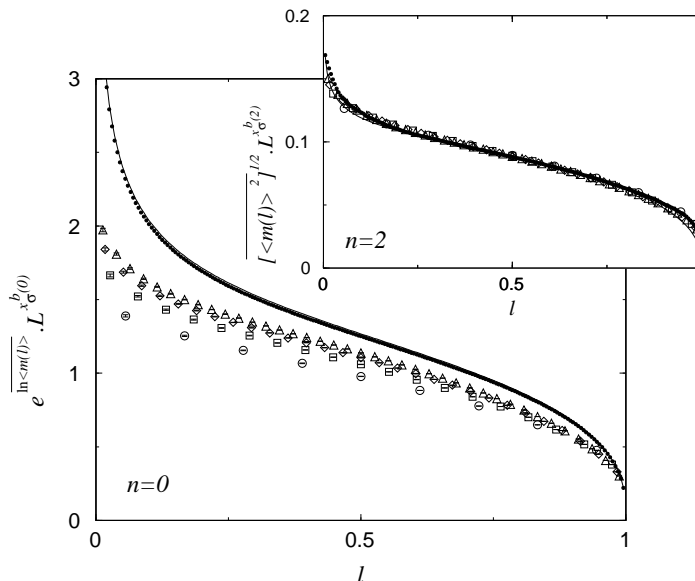


Figure 3.3.16 : Fonction d'échelle conforme des moments d'ordre zéro et deux (en insert) du profil d'aimantation pour des rubans de différentes largeurs (symboles) et calculés en utilisant les estimations des exposants de volume précédemment obtenues. La ligne continue correspond à la fonction d'échelle prédite par l'invariance conforme et les croix à une extrapolation quadratique en $1/L$ des profils issus des simulations.

4.5.2. Exposants de surface

De manière similaire à la relation (3.3.20), les exposants critiques de surface peuvent être calculés en utilisant une combinaison des moments en deux points symétriques par rapport au centre du ruban :

$$x_{\sigma}^1(n) = \frac{1}{n} \frac{\overline{\ln \langle m_L(1-\ell) \rangle^n} - \overline{\ln \langle m_L(\ell) \rangle^n}}{\ln \tan(\pi\ell/2)}, \quad (n > 0). \quad (3.4.35)$$

L'exposant associé au moment typique est obtenu par la relation :

$$x_{\sigma}^1(0) = \frac{\overline{\ln \langle m_L(1-\ell) \rangle} - \overline{\ln \langle m_L(\ell) \rangle}}{\ln \tan(\pi\ell/2)}. \quad (3.4.36)$$

L'étude du profil moyen a montré que les résultats les plus stables numériquement étaient obtenus au voisinage de $\ell = 1/4$. L'expression (3.4.34) étant asymptotique, les exposants doivent être extrapolés dans la limite $L \rightarrow +\infty$. La figure 3.4.14 met en évidence la nécessité d'utiliser une extrapolation avec un polynôme de degré 2 en $1/L$. Les résultats sont rassemblés dans le tableau 3.4.7 pour quelques valeurs de ℓ . Les fluctuations observées en faisant varier ℓ restent de l'ordre de grandeur des barres d'erreur.

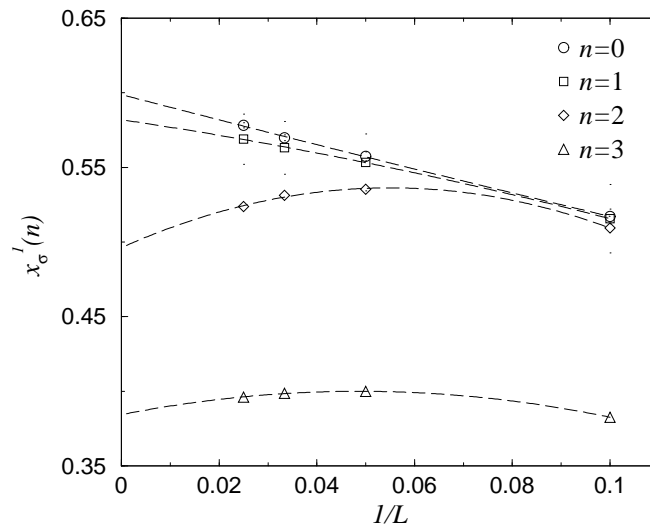


Figure 3.4.14 : Extrapolation des exposants de surface effectifs en fonction de l'inverse de la largeur L des rubans sur lesquels ils ont été calculés.

n	$\ell = 0.20$	$\ell = 0.25$	$\ell = 0.30$	$\ell = 0.35$
0	0.601(7)	0.600(7)	0.602(9)	0.599(11)
1	0.585(5)	0.582(6)	0.582(8)	0.579(11)
2	0.496(3)	0.496(4)	0.500(6)	0.498(8)
3	0.387(11)	0.384(14)	0.384(18)	0.381(25)

Tableau 3.4.7 : Exposants multifractals $x_\sigma^1(n)$ en divers endroits du ruban.

Le calcul des exposants $\beta_1(n)$ a également été réalisé hors du point critique et montre alors, conformément aux prédictions, l'existence d'auto-moyennance ^[179].

4.6. Conclusion

La validité pour le modèle de Potts désordonné de l'hypothèse conforme, qui impose l'expression des profils et des fonctions de corrélation à deux et trois points, est exploitée dans cette section pour étudier le voisinage du cas marginal $q = 2$. Les estimations numériques des exposants critiques associés à la décroissance des fonctions de corrélation spin-spin moyenne ainsi qu'à celle de ses moments sont compatibles avec les résultats perturbatifs. Nous montrons que ces exposants sont universels dans le sens où aucune variation notable n'a été observée avec des distributions de désordre différentes. De plus, nos résultats militent en faveur d'une absence de brisure de la symétrie des répliques. Enfin, nous avons montré que les moments des profils d'aimantation satisfont à l'hypothèse conforme et avons calculé le spectre multifractal des exposants magnétiques de surface dans le cas $q = 8$.

Chapitre 4

MODÈLE DE POTTS DILUÉ TRIDIMENSIONNEL

Nous présentons dans ce chapitre une étude préliminaire du modèle de Potts à $q = 4$ états en dimension $d = 3$ perturbé par une dilution de liaison. Ce travail fait l'objet d'une collaboration avec P.E. Berche (Université de Rouen) et W. Janke (Université de Leipzig, Allemagne) dans le cadre d'un programme PROCOPE. Le système pur donne lieu à une transition du premier ordre qui, d'après le théorème d'Aizenmann et Wehr ^[5], peut laisser place à une transition continue au-delà d'une concentration seuil en impuretés. Nous présentons dans une première partie la ligne critique et proposons des arguments en faveur d'une transition continue à faible concentration p en couplages d'échange. Dans une seconde partie, nous focalisons l'étude sur la dilution $p = 0.56$ et estimons les exposants critiques. Insistons sur le fait qu'il ne s'agit encore que de résultats préliminaires non publiés et qui n'ont été que très partiellement analysés. Néanmoins, les résultats détaillés ici présentent des perspectives intéressantes discutées dans la dernière partie du chapitre.

1. Introduction bibliographique

1.1. Modèle d'Ising

La question de l'influence du désordre sur les propriétés critiques du modèle d'Ising tridimensionnel a été abordée par simulation Monte Carlo et au moyen de calculs perturbatifs.

L'accroissement de la puissance de calcul n'a rendu possible que très récemment une étude numérique précise du modèle d'Ising tridimensionnel désordonné. La première simulation Monte Carlo ^[135] a conduit, en raison d'une précision insuffisante, à des résultats suggérant l'absence de modification du comportement critique sous l'influence d'une dilution de site de concentration $0.2 \leq p < 1$. Cette conclusion a par la suite été remise en cause et les simulations qui suivirent ont mis en évidence la pertinence du désordre ^[152, 53]. Toutefois, les estimations des exposants critiques proposées varient avec la dilution. Heuer conclut également à une dépendance des exposants critiques avec la dilution mais propose leur saturation aux valeurs :

$$\beta \simeq 0.335, \quad \gamma \simeq 1.49, \quad (4.1.1)$$

dans la limite d'un désordre fort ^[100]. Les algorithmes d'amas ont considérablement amélioré la précision des résultats des simulations, ce qui a permis de montrer que la dépendance des exposants avec la dilution était le fait d'effets de cross-over. Une détermination précise de l'exposant de la première correction d'échelle conduit à des exposants critiques identiques, dans les barres d'erreur, sur toute la ligne critique ^[10] :

$$\beta \simeq 0.3546(28), \quad \gamma \simeq 1.342(10), \quad \nu \simeq 0.6837(53). \quad (4.1.2)$$

Les développements perturbatifs conduisent à des estimations des exposants critiques compatibles avec les résultats numériques. Le développement en $\sqrt{\epsilon}$ des propriétés critiques au point fixe désordonné du modèle $O(n)$ en dimension d'espace $d = 4 - \epsilon$ a été étendu successivement à l'ordre à trois, quatre, puis cinq boucles [†]. Récemment, le développement a été poussé à l'ordre à six boucles conduisant aux estimations ^[183]

$$\begin{aligned} \beta &\simeq 0.349(5), & \gamma &\simeq 1.330(17), & \eta &\simeq 0.030(3), \\ \nu &\simeq 0.678(10), & \alpha &\simeq -0.034(30). \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

Le modèle a également été étudié par renormalisation d'une théorie de champ massive en dimension $d = 3$ avec des résultats compatibles ^[181].

1.2. Modèle de Potts

Le modèle de Potts $q \geq 3$ donne lieu en dimension $d = 3$ à une transition du premier ordre très faiblement marquée dans le cas homogène. Les résultats expérimentaux pour $q = 3$, concernant notamment les cristaux liquides 8CB dans un aérogel de silice ^[13], mettent en évidence l'existence d'une transition continue. Des simulations Monte Carlo ont confirmé ce résultat pour le modèle de Potts à $q = 3$ et 4 états et mis en évidence l'existence d'un point tricritique qui sépare la région de forte concentration en impuretés où la transition devient du second ordre de celle où elle reste du premier ordre ^[219]. Le comportement critique du modèle de Potts $q = 3$ en présence d'une dilution de site a récemment été étudié au moyen de simulations Monte Carlo ^[9]. Les exposants critiques mesurés

$$\nu \simeq 0.690(5), \quad \eta \simeq 0.078(4), \quad \beta \simeq 0.372(4) \quad (4.1.4)$$

sont proches de ceux du modèle d'Ising tridimensionnel dilué ($\nu \simeq 0.684(5)$, $\eta \simeq 0.037(5)$, $\beta \simeq 0.355(3)$) et indépendants de la dilution considérée. Cardy et Jacobsen ont proposé une projection du modèle de Potts dilué sur le modèle d'Ising en champ aléatoire, valide dans la limite $q \rightarrow +\infty$ ^[38, 112], et montrent l'existence d'une relation entre les exposants critiques au point tricritique du modèle de Potts dilué et ceux au point fixe à température nulle du modèle d'Ising en champ aléatoire.

[†] Le lecteur pourra trouver dans la référence [86] une bibliographie des exposants critiques obtenus expérimentalement, par développement perturbatif et par simulations Monte Carlo.

2. Diagramme de phase

Nous présentons une étude par simulation Monte Carlo du modèle de Potts $q = 4$ dilué en dimension $d = 3$. Le système pur donne lieu à une transition du premier ordre très fortement marquée. La première partie de ce chapitre sera consacrée à la présentation du détail de la modélisation du désordre et au choix des paramètres des simulations Monte Carlo. Les déterminations de la ligne critique puis de l'ordre de la transition seront discutées dans la dernière partie.

2.1. Détails des simulations

La distribution de probabilité des couplages d'échange retenue

$$\wp(K_{ij}) = p \delta(K_{ij} - K) + (1 - p) \delta(K_{ij}) \quad (4.2.1)$$

correspond à une dilution de liaison grand-canonique. Ce choix a été motivé par le fait que l'intervalle de valeurs de p à explorer pour localiser le point tricritique est borné (par le système pur $p = 1$ et le seuil de percolation $p_c \simeq 0.2488$), alors qu'il ne l'est pas pour une distribution binaire par exemple ($r = K_1/K_2$ pouvant prendre des valeurs arbitrairement grandes). De plus, la concentration en liaisons fluctuant d'une configuration de désordre à l'autre, il est possible de repondérer les grandeurs thermodynamiques obtenues pour chaque configuration de manière à recalculer des moyennes à une valeur de p différente de celle de la simulation Monte Carlo. Nous étudions dix-sept valeurs de p linéairement réparties dans l'intervalle $[0.36; 1]$. Nous avons provisoirement abandonné le voisinage immédiat du seuil de percolation qui nécessite une attention particulière à cause d'une augmentation rapide de la température de transition à mesure que p approche p_c .

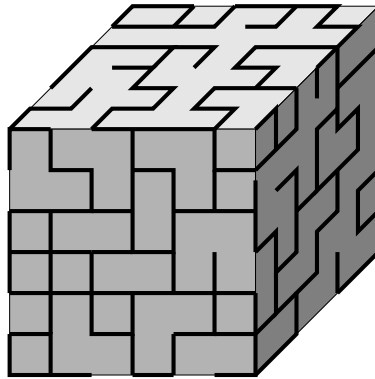


Figure 4.2.1 : Dilution de liaison d'un système de spins sur réseau cubique.

Notre objectif étant dans un premier temps de déterminer la ligne critique et l'existence d'un hypothétique régime de second ordre, nous avons opté pour l'algorithme d'amas de Swendsen-Wang. Bien que réputé moins performant en dimension $d = 3$ que l'algorithme de Wolff, cet algorithme assure une actualisation complète du réseau à chaque itération, ce qui nous a semblé un choix plus prudent dans le régime de premier ordre. Le générateur de nombres pseudo-aléatoires RANMAR ^[153, 114] a été utilisé pour les simulations Monte Carlo. La construction des configurations de couplages est réalisée,

quant à elle, avec le générateur RANLUX au troisième niveau de qualité ^[150, 115] pour lequel aucune corrélation à plusieurs points n'a pu être observée ^[212]. Nous étudions des systèmes cubiques de taille $L \times L \times L$ avec des conditions aux limites périodiques dans les trois directions (4.2.1). Un balayage des valeurs de K a été réalisé pour les dix-sept valeurs considérées de la concentration p et pour les tailles $L = 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10$ et 13 , soit un total actuellement de 3590 simulations.

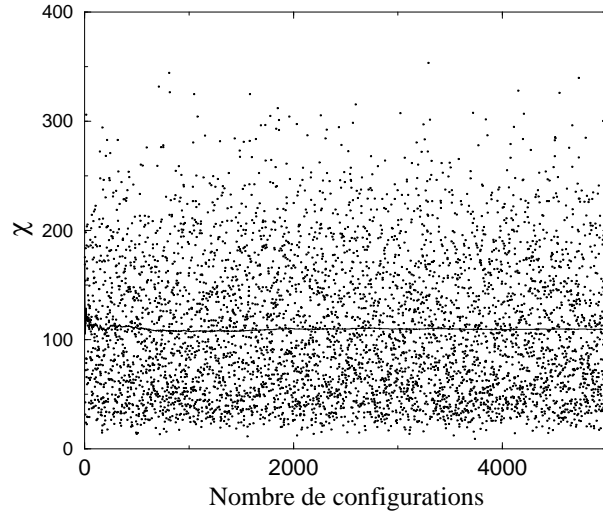


Figure 4.2.2 : Évolution de la moyenne de la susceptibilité magnétique en fonction du nombre de configurations de désordre (trait continu) pour une taille $L = 30$ à la température de transition et à une concentration de couplages $p = 0.56$. Chaque point correspond à une configuration donnée.

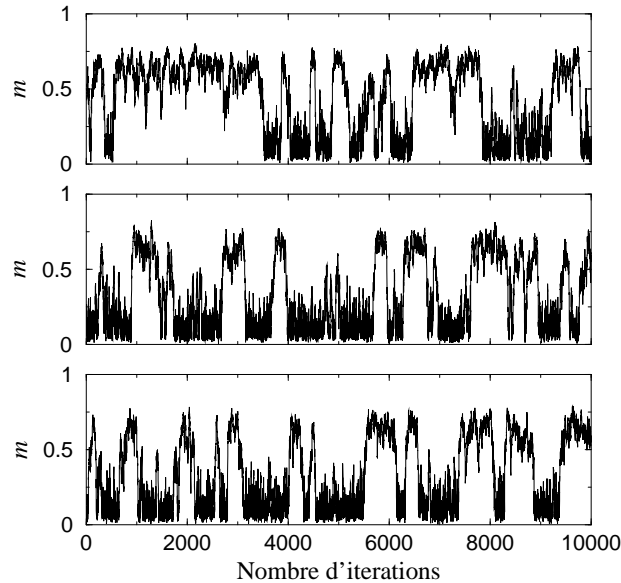


Figure 4.2.3 : Évolution de l'aimantation au cours de la simulation Monte Carlo pour trois configurations de désordre au maximum $K_c(L)$ de la susceptibilité magnétique, à la taille $L = 10$ pour le système pur ($p = 1$).

Les nombres d'itérations Monte Carlo et de configurations de désordre ont été adaptés de manière à ce que les contributions à l'erreur sur la susceptibilité magnétique respectivement thermique et due au désordre soient de même ordre de grandeur. Pour $L = 13$ par exemple, les simulations comportaient 15000 itérations Monte Carlo et 5000 configurations de désordre. Alors que la mesure du temps d'auto-corrélation permet le calcul d'une erreur correspondant précisément à l'incertitude sur la moyenne thermique, les barres d'erreur liées à la moyenne sur le désordre peuvent être dangereusement sous-estimées si les événements rares ne sont pas suffisamment échantillonnés. La figure 4.2.2 atteste de la qualité de nos moyennes sur le désordre. Le régime fortement du premier ordre ($p \simeq 1$) nécessiterait l'utilisation d'un algorithme plus adapté (algorithmes multi-canoniques, voir Annexe). Toutefois, nous nous sommes assuré que le nombre d'itérations était suffisant pour que la simulation Monte Carlo explore les phases ordonnées et désordonnée comme en témoigne la figure 4.2.3.

2.2. Ligne critique

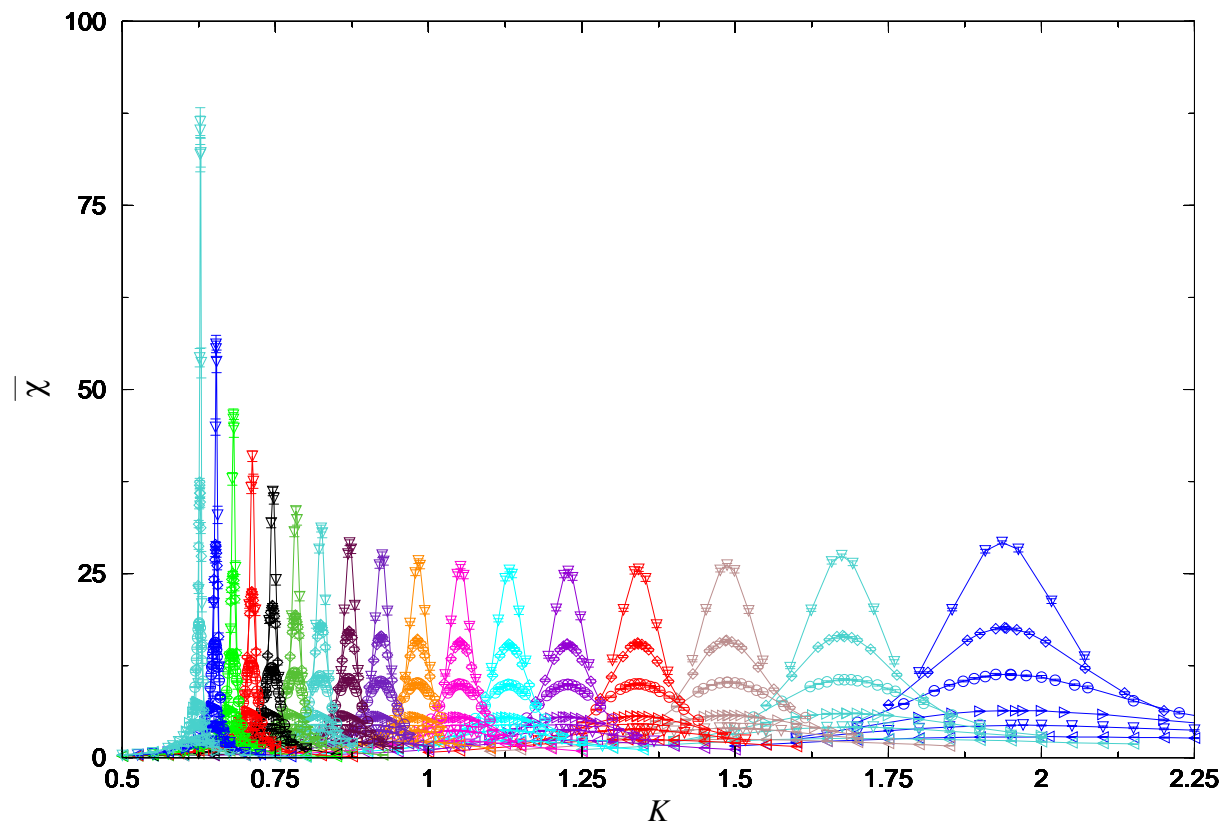


Figure 4.2.4 : Susceptibilité magnétique du modèle de Potts $q = 4$ dilué en fonction du couplage d'échange K pour des concentrations de liaisons allant de $p = 0.36$ (à droite) à $p = 1$ (système pur à gauche) pour des tailles allant de 4 à 13.

La figure 4.2.4 témoigne de l'adoucissement de la transition causé par le désordre, qui se manifeste par un élargissement des pics de susceptibilité magnétique à mesure que p diminue. Nous avons défini le "couplage de transition" $K_c(L, p)$ à une taille L

et une concentration p données comme le maximum de la susceptibilité magnétique. Les maxima de la chaleur spécifique auraient également pu remplir ce rôle mais la chaleur spécifique présente une erreur plus importante que la susceptibilité magnétique. De plus, la divergence de la chaleur spécifique est moins prononcée que celle de la susceptibilité. La technique de repondération de l'histogramme, dont la précision a été testée en comparant les extrapolations aux résultats d'autres simulations Monte Carlo (voir par exemple la figure 5.1.1 de l'annexe), a été utilisée pour affiner la détermination de la position du maximum de la susceptibilité. Pour cela, une simulation Monte Carlo est effectuée à une estimation grossière de $K_c(L)$ et la position du maximum de la susceptibilité donnée par la repondération de l'histogramme est utilisée comme nouvelle estimation de $K_c(L)$. La procédure est itérée trois ou quatre fois jusqu'à ce que la variation du maximum soit contenue dans les barres d'erreur.

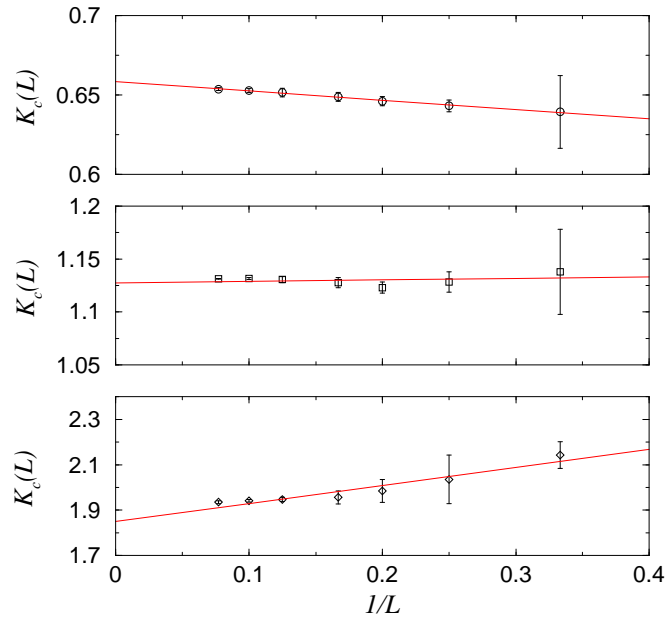


Figure 4.2.5 : Couplage de transition $K_c(L)$ défini comme le maximum de la susceptibilité magnétique moyenne $\bar{\chi}$ en fonction de $1/L$ pour les concentrations $p = 0.96, 0.56$ et 0.36 (de haut en bas). Les barres d'erreur, définies comme $\Delta K_c(L) = |K_c(L) - K_c(L')|$ où L' est la taille immédiatement inférieure pour laquelle une simulation a été réalisée, surestiment l'erreur réelle. Les droites correspondent à une interpolation linéaire.

Comme le montre la figure 4.2.5, la dépendance de la température de transition $K_c(L, p)$ avec la taille L du système est relativement faible. De surcroît, les fluctuations des données numériques sont de même ordre de grandeur que les effets de taille finie. Une interpolation non-linéaire avec la forme $K_c \sim K_c(L) + \mathcal{A} L^{-1/\nu}$ (1.2.14) est par conséquent très instable. Nous nous sommes limité pour l'heure à une interpolation linéaire en $1/L$ avec des barres d'erreur définies comme la différence $\Delta K_c(L) = |K_c(L) - K_c(L')|$ avec le couplage de transition de la taille L' précédente. Cette définition surestime l'erreur réelle. La ligne critique obtenue est très similaire à celle proposée par Landau dans le cas du modèle d'Ising tridimensionnel avec une dilution de site ^[135] (figure 4.2.6).

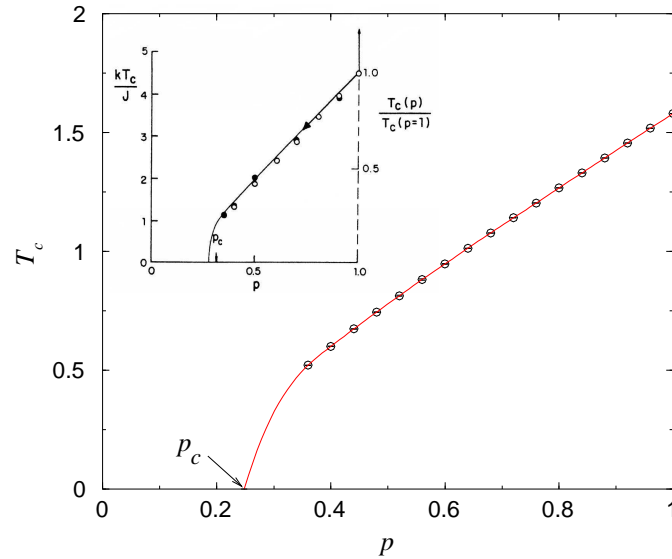


Figure 4.2.6 : Température de transition T_c en fonction de la concentration p en couplage d'échange pour le modèle de Potts $q = 4$. La ligne continue est un "spline" cubique servant de guide. En insert, le diagramme de phase obtenu par Landau pour le modèle d'Ising avec une dilution de site et extrait de la référence [135].

2.3. Ordre de la transition

Les tailles encore relativement petites ($L \leq 13$) ne nous permettent pas de déterminer de manière précise la position du point tricritique. Nous nous bornons ici à la présentation d'arguments montrant l'existence d'une transition continue à la concentration $p = 0.36$. Toutefois, on ne peut pas exclure la possibilité d'une transition faiblement du premier ordre avec une longueur de corrélation à la température de transition supérieure à la plus grande des tailles que nous avons jusqu'à maintenant étudiées.

2.3.1. Allure de la susceptibilité magnétique

La dépendance de la susceptibilité magnétique avec le couplage réduit $|K - K_c(L)|$ permet de déterminer l'ordre d'une transition de phase. En effet, pour une transition du premier ordre, la susceptibilité tend vers un pic de plus en plus prononcé à mesure que la taille L augmente et dont la largeur s'annule. Par conséquent, les courbes de susceptibilité magnétique de deux systèmes de tailles différentes doivent nécessairement se croiser ^[164]. Ce type de comportement est effectivement observé à la dilution $p = 0.96$ comme en témoigne la figure 4.2.7. Pour une transition du second ordre en revanche, la susceptibilité magnétique tend vers une enveloppe en loi de puissance de la forme $|K - K_c|^{-\gamma}$. Les résultats numériques pour la concentration $p = 0.36$ montrent un comportement de cette forme dans la gamme de tailles étudiées, ce qui accrédite l'hypothèse d'une transition continue (figure 4.2.7).

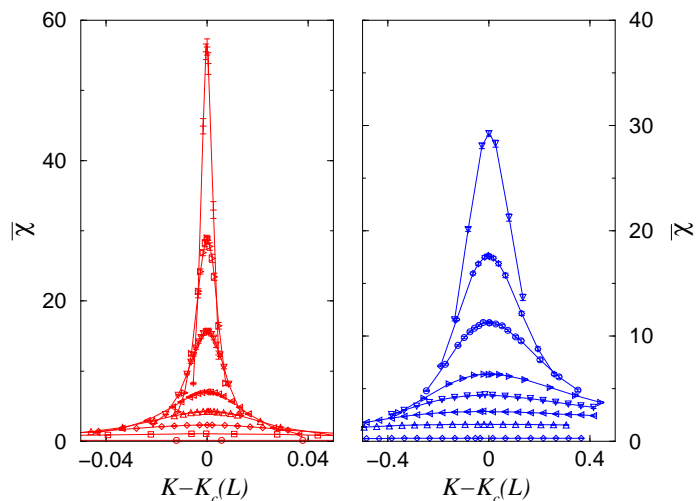


Figure 4.2.7 : Susceptibilité magnétique moyenne en fonction du couplage réduit $|K - K_c(L)|$ pour les concentrations de couplages $p = 0.96$ (à gauche) et $p = 0.36$ (à droite). Notons l'existence d'un facteur dix entre les échelles des abscisses des deux graphes.

2.3.2. Temps d'auto-corrélation

Le temps d'auto-corrélation permet également la distinction entre une transition du premier ordre et une transition continue.

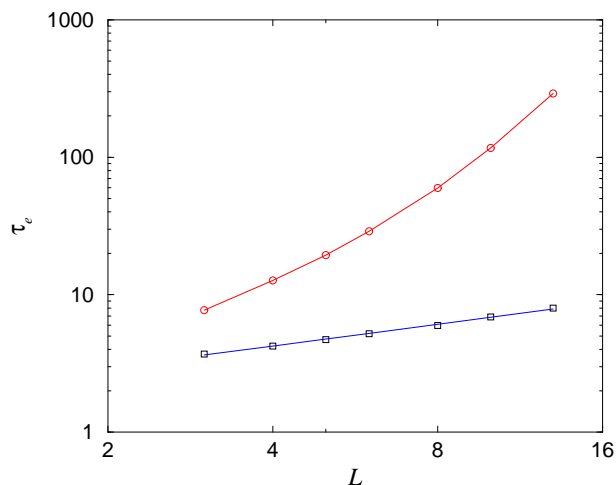


Figure 4.2.8 : Temps d'auto-corrélation de l'énergie en fonction de la taille L du système pour les concentrations de couplages $p = 0.96$ et 0.36 .

La figure 4.2.8 présente la dépendance du temps d'auto-corrélation τ_e avec la taille L du système pour les concentrations de couplage $p = 0.96$ et 0.36 . Dans le dernier cas, les données numériques présentent un comportement en loi de puissance, caractéristique d'une transition du second ordre, avec un exposant dynamique $z \simeq 0.52$. En revanche, la divergence du temps d'auto-corrélation à la concentration $p = 0.96$ est manifestement exponentielle, ce qui prouve l'existence d'une barrière d'énergie séparant les phases ordonnées et désordonnée et donc l'existence d'une transition du premier ordre.

3. Régime du second ordre

Ce paragraphe est consacré à la détermination approximative des exposants critiques dans le régime de second ordre. L'étude est restreinte à la concentration $p = 0.56$ de manière à pouvoir atteindre des tailles plus importantes. Le choix de cette dilution a été gouverné par la faible dépendance de $K_c(L)$ avec L comme en témoigne la figure 4.2.5. Nos résultats préliminaires montrent en effet, comme dans le cas du modèle d'Ising tridimensionnel dilué, l'existence de corrections d'échelle importantes, dont la détermination numérique requiert un intervalle de tailles le plus large possible. Les simulations actuellement en cours concernent la taille $L = 64$. Nous envisageons de poursuivre le calcul jusqu'à une taille au moins égale à $L = 100$.

L'allure de la susceptibilité magnétique, présentée sur la figure 4.3.1 (à gauche), semble tendre vers une même enveloppe en loi de puissance, confirmant l'hypothèse d'une transition continue. En insert sur cette figure, les extrapolations par repondération de l'histogramme à deux températures différentes témoignent de la confiance que l'on peut avoir dans la détermination du maximum de la susceptibilité. La divergence en loi de puissance du temps d'auto-corrélation avec la taille L du système en apporte une confirmation supplémentaire convaincante (figure 4.3.1 à droite). L'exposant dynamique mesuré est de l'ordre de $z \simeq 1.03$.

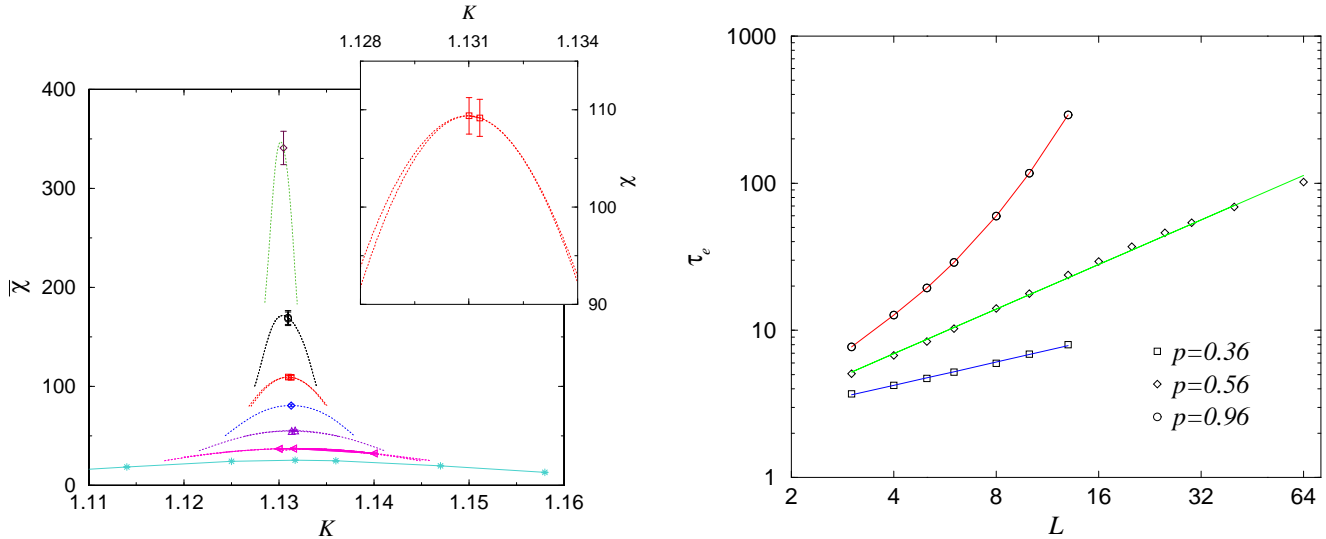


Figure 4.3.1 : Susceptibilité magnétique en fonction du couplage d'échange K pour la concentration $p = 0.56$ et pour les tailles $L = 13, 16, 20, 25, 30, 40$ et 64 (à gauche de bas en haut). Les courbes en pointillés correspondent aux extrapolations par la méthode de repondération de l'histogramme. En insert, agrandissement du voisinage du maximum de la susceptibilité pour la taille $L = 30$. A droite, temps d'auto-corrélation de l'énergie en fonction de la taille L du système.

Les courbes de l'aimantation et de la susceptibilité magnétique en fonction de la taille L , présentées dans les inserts des figures 4.3.2, montrent très clairement une courbure importante. Par conséquent, les exposants effectifs $(\beta/\nu)^{\text{eff}}$ et $(\gamma/\nu)^{\text{eff}}$, calculés par interpolation en loi de puissance dans l'intervalle de tailles $L \in [L_{\min}; 40]$, présentent une dépendance en fonction de L_{\min} (figure 4.3.2) qui semble être le fait

d'une tendance réelle plutôt que de fluctuations des interpolations. Malgré des barres d'erreur importantes lorsque l'interpolation est réalisée sur peu de points, c.à.d. lorsque L_{\min} approche 40, les exposants effectifs semblent tendre vers les valeurs $\beta/\nu \simeq 0.6$ et $\gamma/\nu \simeq 1.5$ qui ne sont encore que de très grossières estimations. L'importance des corrections d'échelle montre la nécessité de poursuivre le calcul pour des tailles plus grandes, ce qui, outre l'apport de points supplémentaires, réduira considérablement les barres d'erreur sur les points existants.

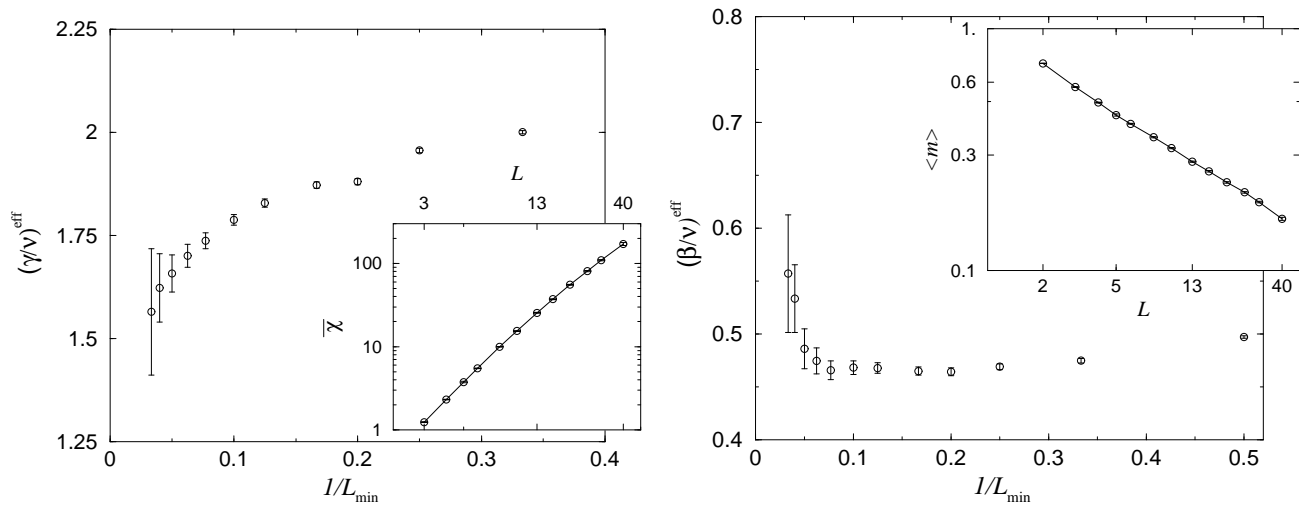


Figure 4.3.2 : Exposants effectifs γ/ν (resp. β/ν) estimés par interpolation en loi de puissance de la susceptibilité magnétique (resp. de l'aimantation) sur l'intervalle de tailles $[L_{\min}; 40]$ en fonction de $1/L_{\min}$ (respectivement à gauche et à droite). Les inserts correspondent à la susceptibilité magnétique (à gauche) et à l'aimantation (à droite) en fonction de la taille L du système.

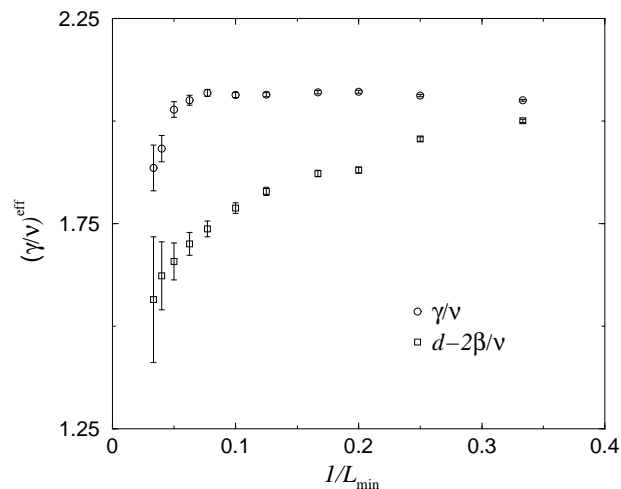


Figure 4.3.3 : Exposants effectifs γ/ν estimés par interpolation en loi de puissance de la susceptibilité magnétique et en utilisant la loi d'échelle $d-2\beta/\nu$ en fonction de l'inverse de la plus petite taille L_{\min} entrant dans l'interpolation.

Comme le montre la figure 4.3.3, la loi d'échelle $\gamma/\nu = d - 2\beta/\nu$ n'est pas satisfaite mais on peut imaginer que les courbes vont tendre vers une même valeur de l'ordre de 1.5 dans la limite $L_{\min} \rightarrow 0$, caractéristique de l'exposant au point fixe.

4. Discussion et perspectives

Nous apportons des arguments en faveur de l'existence d'une transition continue induite par la dilution pour le modèle de Potts $q = 4$ tridimensionnel. Toutefois, l'avancement des calculs ne permet pas pour l'heure de donner une estimation précise de la position du point tricritique. Les exposants effectifs calculés pour une concentration de couplages $p = 0.56$ montrent la présence de fortes corrections d'échelle. Alors que les exposants proposés pour le modèle de Potts $q = 3$ dilué sont très voisins de ceux du modèle d'Ising dilué, nos estimations, bien que très grossières, en sont très éloignées. Les paramètres de la simulation ont été prudemment vérifiés et ne peuvent être à l'origine d'une telle différence : nous utilisons 5000 configurations de désordre contre 1000 pour Ballesteros *et al.* et les nombres d'itérations de thermalisation et de moyenne sont cohérents avec le temps d'auto-corrélation.

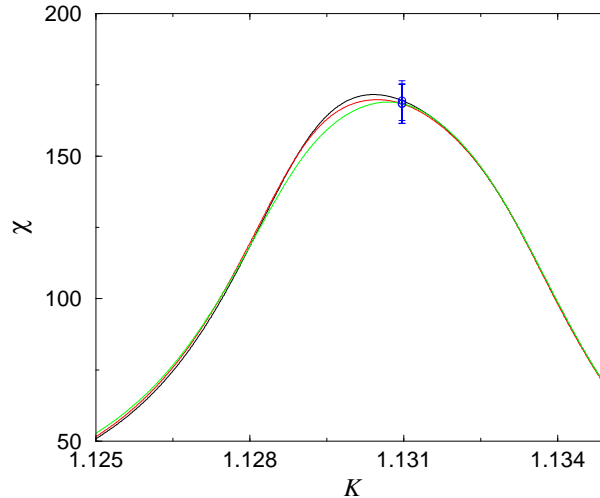


Figure 4.4.1 : Exemples d'extrapolations par repondération de l'histogramme pour trois simulations comportant 1250 configurations de désordre à une même température pour une taille $L = 40$. Les symboles correspondent aux moyennes de chaque simulation.

Les nombres de configurations et d'itérations semblent suffisants pour assurer des déviations des extrapolations par la technique de repondération de l'histogramme inférieures aux incertitudes des simulations. Le programme est également hors de cause puisqu'il est actuellement utilisé par P.E. Berche pour l'étude du modèle d'Ising tridimensionnel dilué avec des résultats parfaitement compatibles avec les estimations récentes des exposants pour ce modèle. Les corrections d'échelle méritent en revanche une analyse plus approfondie et il nous semble impératif de poursuivre le calcul pour des tailles plus importantes.

CONCLUSION

La présence d'impuretés dans un échantillon sous la forme d'éléments interstitiels ou substitutionnels ou sous la forme de défauts d'empilement par exemple est inévitable. Il est donc essentiel d'évaluer l'influence de ces impuretés sur les propriétés du système. La divergence des fluctuations dans un système critique le rend particulièrement sensible au désordre. Lorsque les fluctuations géométriques du désordre croissent plus rapidement avec la taille du système que les fluctuations thermiques, la classe d'universalité du système est modifiée. Comme l'a montré Harris, cette situation se produit lorsque l'exposant α de la chaleur spécifique du système pur est positif. Dans le cas des transitions du premier ordre, le critère d'Imry-Wortis prédit un adoucissement de la transition qui peut aller jusqu'à un effacement complet des discontinuités et donc à une transition continue.

Le modèle de Potts à q états en dimension $d = 2$ est particulièrement bien adapté à l'étude de l'influence d'un désordre couplé à la densité d'énergie. Tout d'abord, il présente dans le cas homogène une transition du second ordre lorsque $q \leq 4$ et du premier ordre lorsque $q > 4$. Il offre de ce fait la possibilité de tester les critères de Harris et d'Imry et Wortis. De plus, le régime du second ordre comporte les trois situations possibles prédites par le critère de Harris : le désordre est pertinent pour $q > 2$, marginal pour $q = 2$ et non-pertinent pour $q < 2$. En outre, la formulation de Fortuin et Kasteleyn permet de généraliser le modèle de Potts aux valeurs non-entières du paramètre q . Il est alors possible de modifier la classe d'universalité à volonté et de manière continue. La relation existant entre les modèles minimaux et le modèle de Potts pour $q \leq 4$ permet un calcul perturbatif des propriétés critiques du modèle désordonné au voisinage du cas marginal $q = 2$. Enfin, il existe des méthodes numériques particulièrement bien adaptées à l'étude du modèle de Potts, en particulier les algorithmes Monte Carlo dits d'amas et la technique de matrice de transfert reposant sur la formulation de Fortuin et Kasteleyn.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressé à un désordre corrélé dans une des deux directions de l'espace. Nous avons déterminé les profils d'aimantation sur des rubans infinis dont la statistique est générée par la méthode DMRG pour plusieurs valeurs du nombre d'états du modèle de Potts. Bien qu'on s'attende à une très forte anisotropie, les profils vérifient les expressions prédites par l'invariance conforme. Il est possible d'en extraire les exposants critiques magnétiques de volume et de surface. Nos estimations sont compatibles avec les résultats du groupe de renormalisation de Senthil et Majumdar qui montrent l'existence d'un unique point fixe indépendant de la valeur de q . Ce résultat reste valable dans le régime de premier ordre du système homogène. Le spectre multifractal des aimantations de volume et de surface est également en accord

avec les prédictions de Senthil et Majumdar.

Le désordre corrélé présente des fluctuations gaussiennes de la densité de couplages perturbés dont l'extension diverge avec un exposant $1/2$ avec la taille du système. Il est possible de construire un arrangement apériodique des couplages d'échange présentant des fluctuations dont la divergence se fait avec un exposant de divagation différent de $1/2$. Dans le cas des transitions du second ordre, le critère de Luck généralise le critère de Harris en statuant quant à la pertinence d'une perturbation d'exposant de divagation quelconque. Nous nous sommes intéressé à l'influence sur la transition du premier ordre du modèle de Potts $q = 8$ d'un arrangement des couplages d'échange corrélés dans une direction et distribués de manière apériodique dans la seconde. Les simulations Monte Carlo permettent d'observer un adoucissement de la transition sous l'influence de la modulation apériodique des couplages d'échange. La transition du premier ordre laisse place à une transition continue dans le cas des séquences présentant des fluctuations croissant suffisamment rapidement. Nous conjecturons une généralisation du critère de Luck aux transitions du premier ordre où l'exposant ν est remplacé par $1/d$ dans l'expression de l'exposant de cross-over.

Dans un deuxième temps, nous avons présenté une étude numérique des propriétés critiques du modèle de Potts bidimensionnel en présence d'un désordre homogène. En ce qui concerne le régime du premier ordre dans le cas homogène, Chen, Ferrenberg et Landau ont montré l'annulation complète de la barrière d'énergie et donc le passage à une transition du second ordre pour le modèle de Potts $q = 8$ désordonné. En utilisant des simulations Monte Carlo combinées à une analyse des effets de taille finie, nous avons montré, avec d'autres groupes et de manière indépendante, que la classe d'universalité de ce système correspond à un nouveau point fixe qui, contrairement à certaines prédictions, n'est pas celui du modèle d'Ising bidimensionnel. Nous avons également mis en évidence l'existence d'un comportement critique de surface associé à une nouvelle classe d'universalité.

Nous avons montré que les expressions conformes des profils d'aimantation et des fonctions de corrélation spin-spin dans les géométries cylindrique et carrée rendent compte de manière précise des résultats numériques, ce qui témoigne de la validité des techniques de projections conformes pour l'étude des profils de densités moyennes dans les systèmes désordonnés. Il s'agit là d'un résultat a priori surprenant au vu de l'absence d'invariance par translation et rotation pour une configuration particulière de désordre mais on conçoit que ces symétries, requises par l'invariance conforme, sont restaurées lors de la moyenne sur l'ensemble des configurations de désordre.

Comme l'a remarqué Picco, les résultats numériques sont particulièrement sensibles à l'amplitude du désordre en raison d'effets de cross-over avec les points fixes homogène et infiniment désordonné. La charge centrale présente un maximum avec l'amplitude de désordre dont il a été suggéré que la position renseigne sur le régime du point fixe désordonné. Nous avons déterminé ces maxima pour plusieurs valeurs du nombre d'états q et estimé les exposants critiques magnétiques dans le régime du point fixe désordonné correspondant en mettant à profit les expressions conformes. Les résultats obtenus confirment la variation monotone des exposants avec le nombre d'états q obtenue pour la première fois par Cardy et Jacobsen.

Nous nous sommes ensuite intéressé plus particulièrement au régime du second

ordre. Nos résultats numériques sont en bon accord avec les développements perturbatifs obtenus jusqu'à l'ordre à trois boucles au voisinage de $q = 2$ pour la décroissance des fonctions de corrélation spin-spin moyennes. Nous avons montré l'indépendance, dans les barres d'erreur, des estimations de l'exposant critique magnétique pour plusieurs distributions de désordre, prouvant l'existence de caractéristiques universelles au point fixe désordonné. Nous avons comparé la décroissance des moments de la fonction de corrélation spin-spin obtenus perturbativement avec nos résultats numériques et montré que la dépendance avec l'ordre du moment des exposants critiques associés est en bon accord avec les développements perturbatifs jusqu'à la limite de leur validité, c.à.d. $q = 4$. Nos résultats sont compatibles avec le scénario d'une absence de brisure spontanée de la symétrie des répliques. Nous avons également montré que la distribution de probabilité est bien reproduite par l'expression asymptotique proposée par Ludwig si l'on prend en compte le terme correctif d'ordre le plus bas. L'étape suivante dans la compréhension de l'influence du désordre sera probablement la détermination de la théorie conforme associée au point fixe désordonné. Des résultats dans ce sens ont déjà été obtenus par différents auteurs.

Les systèmes désordonnés tridimensionnels présentent également un intérêt de par la possibilité de faire apparaître un point tricritique dans le diagramme de phase d'un système donnant lieu à une transition du premier ordre dans le cas homogène. Une telle situation a été récemment observée par simulation Monte Carlo pour le modèle de Potts dilué à $q = 3$ états et nous avons pour notre part initié une étude du cas $q = 4$. Ce dernier semble a priori plus intéressant dans la mesure où la transition du premier ordre présentée par le système pur est fortement marquée et donc plus aisément susceptible d'être influencée par le désordre. Les résultats préliminaires obtenus dans ce contexte confirment l'existence d'une transition adoucie, mais restant toutefois du premier ordre aux faibles concentrations en impuretés non magnétiques, alors qu'elle devient manifestement du second ordre aux concentrations plus élevées. La mise en évidence claire de l'existence d'un point tricritique dans le diagramme de phase constituerait dans ce domaine un apport intéressant.

ANNEXE

1. Simulations Monte Carlo

1.1. Principes de la simulation Monte Carlo

1.1.1. Introduction

Dans le cas du modèle d'Ising, la valeur moyenne de l'aimantation à une température T donnée s'écrit pour un système de N spins sous la forme

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\sigma_1=-1}^1 \dots \sum_{\sigma_N=-1}^1 \left[\sum_{i=0}^N \sigma_i \right] e^{-\beta \sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j}. \quad (5.1.1)$$

Dans le cas d'un système de 1024 spins (réseau carré de 32×32 spins par exemple) la somme comporte $2^{1024} \sim 10^{308}$ termes. Les plus gros ordinateurs disponibles ne pourraient effectuer le calcul en un temps raisonnable (c'est-à-dire quelques mois) que pour un système carré de 7×7 spins. Pour ajouter un spin dans les deux directions, il faudrait s'armer de patience : le calcul nécessiterait alors plusieurs milliers d'années !

1.1.2. Monte Carlo dynamique

On distingue deux types de simulations Monte Carlo appelées respectivement statique et dynamique. Dans le premier cas, le calcul de la somme (5.1.1) est réalisé en ajoutant les poids statistiques d'un nombre fini (nécessairement petit par rapport au nombre total de configurations) de configurations de spins choisies de manière aléatoire. Chaque configuration est statistiquement indépendante et la simulation correspond à une marche aléatoire dans l'espace des configurations. Cette méthode (**simple sampling**) est à réserver aux sommes dont l'argument varie peu (ce qui n'est pas le cas de (5.1.1)). Elle est utilisée par exemple pour l'étude de la percolation et des systèmes de réaction-diffusion.

L'approche dynamique repose sur la propriété qu'une très faible proportion des termes de la somme à calculer contribuent de manière significative. La méthode consiste à générer des configurations de spins parmi les plus probables de la somme (5.1.1). On décide que chaque nouvelle configuration ne dépend que de la précédente. Ce processus, appelé **chaîne de Markov**, correspond à une marche dirigée dans l'espace des configurations de telle sorte que la distribution des configurations visitées suive la loi de Boltzmann $e^{-\beta \mathcal{H}}$ (**importance sampling**).

1.1.3. Chaîne de Markov

La probabilité de transition $W(X_i \rightarrow X_{i+1})$ de la configuration X_i à l'itération i vers X_{i+1} doit satisfaire, par définition, positivité et normation :

$$\begin{aligned} W(X_i \rightarrow X_{i+1}) &\geq 0, \\ \sum_{X_{i+1}} W(X_i \rightarrow X_{i+1}) &= 1. \end{aligned} \tag{5.1.2}$$

De plus, la distribution à l'équilibre, notée $\Pi(X)$, est définie par la relation de stationnarité

$$\sum_{X_i} \Pi(X_i) W(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \Pi(X_{i+1}). \tag{5.1.3}$$

Enfin, pour que tout le domaine accessible de l'espace des configurations puisse être visité (ergodicité), la matrice de transition W doit satisfaire la condition d'irréductibilité suivante :

$$\begin{aligned} \forall (X_i, Y), \exists n, \{X_{i+1}, X_{i+2} \dots X_{i+n}\} / \\ W(X_i \rightarrow X_{i+1}) W(X_{i+1} \rightarrow X_{i+2}) \dots W(X_{i+n} \rightarrow Y) > 0. \end{aligned} \tag{5.1.4}$$

1.1.4. Condition du bilan détaillé

En insérant la condition de normation (5.1.2) au second membre de (5.1.3), il vient

$$\sum_X \Pi(X) W(X \rightarrow Y) = \sum_X \Pi(Y) W(Y \rightarrow X). \tag{5.1.5}$$

Cette relation exprime l'égalité à l'équilibre des probabilités d'aller vers un état Y et d'en partir. La relation (5.1.5) est satisfaite notamment si on impose

$$\Pi(X) W(X \rightarrow Y) = \Pi(Y) W(Y \rightarrow X). \tag{5.1.6}$$

Cette condition sur W , suffisante mais pas nécessaire, est plus forte que (5.1.5) et est à la base de tous les algorithmes Monte Carlo.

1.1.5. Équation maîtresse de la dynamique

L'évolution dynamique de la distribution de probabilité $P(Y)$ est gouvernée par l'équation maîtresse ^[168, 214]

$$\frac{dP(Y)}{dt} = \sum_X [P(X)W(X \rightarrow Y) - P(Y)W(Y \rightarrow X)] \tag{5.1.7}$$

où la discrétisation du temps peut se faire en introduisant le temps de relaxation Δt d'un spin. A l'équilibre, on retrouve la relation (5.1.5)

$$\frac{dP(Y)}{dt} = 0 \Leftrightarrow \sum_X \Pi(X) W(X \rightarrow Y) = \sum_X \Pi(Y) W(Y \rightarrow X). \tag{5.1.8}$$

1.2. Grandeurs thermodynamiques

1.2.1. Moyennes thermiques

Les configurations X étant visitées lors de la marche dirigée définie par la chaîne de Markov suivant la distribution de Boltzmann, la moyenne thermodynamique d'une observable ϕ se réduit à sa moyenne sur les configurations visités :

$$\langle \phi \rangle = \sum_{\{X\}} \phi(X) \Pi(X) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(X_i). \quad (5.1.9)$$

1.2.2. Erreur statistique

Le théorème de la limite centrale s'applique à la somme (5.1.9) uniquement dans le cas de N itérations Monte Carlo statistiquement indépendantes. La distribution normale des valeurs mesurées conduit alors à l'erreur statistique

$$\Delta \phi \underset{N \rightarrow +\infty}{\simeq} \frac{1}{\sqrt{N}} [\langle \phi^2 \rangle - \langle \phi \rangle^2]^{1/2} = \sqrt{\frac{\sigma_\phi^2}{N}} \quad (5.1.10)$$

où σ_ϕ^2 est l'écart quadratique de l'observable ϕ . La définition de la chaîne de Markov implique l'existence de corrélations entre les valeurs successives de ϕ . Le carré de l'erreur statistique réelle est ^[168]

$$\begin{aligned} \Delta \phi^2 &= \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\phi(X_i) - \langle \phi \rangle) \right]^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N [\phi(X_i)\phi(X_j) - \langle \phi \rangle^2] \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (\phi(X_i)^2 - \langle \phi \rangle^2) + \frac{2}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N [\phi(X_i)\phi(X_j) - \langle \phi \rangle^2] \end{aligned} \quad (5.1.11)$$

où le premier terme correspond à l'écart quadratique et le second à la somme des fonctions d'auto-corrélation entre les instants i et j . Dans la limite $N \rightarrow +\infty$ d'un nombre d'itérations infini, la moyenne des $\phi(X_i)$ tend vers la moyenne thermodynamique $\langle \phi \rangle$ et l'erreur (5.1.11) s'annule. Les fonctions d'auto-corrélation entre les instants i et j :

$$G(i, j) = \langle \phi(X_i)\phi(X_j) \rangle - \langle \phi \rangle^2 = G(|i - j|) \quad (5.1.12)$$

ne dépendent que du nombre d'itérations séparant les deux mesures. Cette propriété permet la simplification de (5.1.11) sous la forme

$$\Delta \phi^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (\phi(X_i)^2 - \langle \phi \rangle^2) + \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{i}{N}\right) [\phi(X_0)\phi(X_i) - \langle \phi \rangle^2]. \quad (5.1.13)$$

En posant

$$\tau_\phi = \frac{1}{\sigma_\phi^2} \sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{i}{N}\right) [\langle \phi(X_0)\phi(X_i) \rangle - \langle \phi \rangle^2], \quad (5.1.14)$$

temps d'auto-corrélation intégré de l'observable ϕ , on obtient finalement

$$\Delta\phi^2 = \frac{\sigma_\phi^2}{N}(1 + 2\tau_\phi). \quad (5.1.15)$$

La simulation fournit deux configurations statistiquement indépendantes au bout d'un temps de l'ordre de $1 + 2\tau_\phi$ (écrit parfois $2\tau_\phi$, voire τ_ϕ , avec une définition du temps d'auto-corrélation intégré différente de (5.1.14)). Afin d'obtenir une erreur statistique relative acceptable, c.à.d. $\Delta\phi/\sigma_\phi \simeq 1\%$, la simulation doit comporter de l'ordre de $10^4\tau_\phi$ itérations.

1.2.3. Ralentissement critique

Le modèle d'Ising donne lieu en champ moyen à un comportement asymptotiquement exponentiel de la fonction d'auto-corrélation du paramètre d'ordre ^[168] :

$$\frac{\langle m(0)m(t) \rangle - \langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2} \underset{t \rightarrow +\infty}{\simeq} e^{-t/\chi\Delta t}. \quad (5.1.16)$$

L'argument de l'exponentielle est inversement proportionnel à la susceptibilité magnétique χ . Par conséquent, le temps de relaxation $\tau_\phi^{\text{exp}} \sim \chi\Delta t$, aussi appelé temps d'auto-corrélation exponentiel, diverge à l'approche du point critique : c'est le **ralentissement critique**. Dans le cas général, on peut supposer qu'on a aux temps longs

$$\frac{\langle \phi(0)\phi(t) \rangle - \langle \phi \rangle^2}{\sigma_\phi^2} \underset{t \rightarrow +\infty}{\simeq} e^{-t/\tau_\phi^{\text{exp}}} \quad (5.1.17)$$

où τ_ϕ^{exp} est le temps de relaxation du mode le plus lent. L'erreur statistique (5.1.13) sur l'observable ϕ s'écrit alors

$$\Delta\phi^2 \underset{N \rightarrow +\infty}{\simeq} \frac{\sigma_\phi^2}{N} \left[1 + 2 \int_0^{+\infty} \left(1 - \frac{t}{N\Delta t}\right) e^{-t/\tau_\phi^{\text{exp}}} dt \right] \simeq \frac{\sigma_\phi^2}{N} (1 + 2\tau_\phi^{\text{exp}}) \quad (5.1.18)$$

Les temps d'auto-corrélation respectivement exponentiel et intégré sont donc égaux dans la limite d'un grand nombre d'itérations. Le ralentissement critique est lié à la forme de la décroissance des fonctions d'auto-corrélation $G(t)$, non plus exponentielle mais algébrique au point critique, et donc à des temps d'auto-corrélation exponentiel et intégré infinis. Afin que le système perde toute mémoire de la configuration initiale à partir de laquelle a été initiée la simulation, un certain nombre d'itérations doivent être écartées de la statistique. On considère qu'il faut de l'ordre de $20\tau_\phi^{\text{exp}}$ itérations pour qu'un système thermalise convenablement ^[213].

1.2.4. Repondération de l'histogramme

La probabilité à une température inverse β d'observer un état d'aimantation M et d'énergie E (ou de manière générale toutes quantités thermodynamiques extensives) est de la forme

$$\wp_{\beta}(E, M) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta}} \Omega(E, M) e^{-\beta E} \quad (5.1.19)$$

où $\Omega(E, M)$ est la dégénérescence de l'état macroscopique défini par les valeurs de l'énergie et de l'aimantation E et M . Il vient

$$\Omega(E, M) = \mathcal{Z}_{\beta} \cdot \wp_{\beta}(E, M) e^{\beta E} \quad (5.1.20)$$

et donc la probabilité à une température inverse β' s'écrit

$$\wp_{\beta'}(E, M) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta'}} \Omega(E, M) e^{-\beta' E} = \left(\frac{\mathcal{Z}_{\beta}}{\mathcal{Z}_{\beta'}} \right) \wp_{\beta}(E, M) e^{-(\beta' - \beta)E}. \quad (5.1.21)$$

Le facteur $\mathcal{Z}_{\beta}/\mathcal{Z}_{\beta'}$ n'étant qu'une constante de normation, on peut écrire la moyenne à la température inverse β' de toute grandeur f s'exprimant à partir de l'énergie et de l'aimantation sous la forme

$$\langle f \rangle_{\beta'} = \frac{\sum_{E, M} f(E, M) \wp_{\beta}(E, M) e^{-(\beta' - \beta)E}}{\sum_{E, M} \wp_{\beta}(E, M) e^{-(\beta' - \beta)E}}. \quad (5.1.22)$$

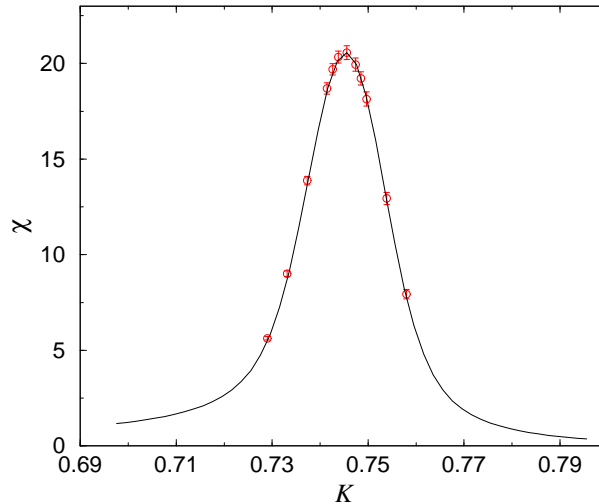


Figure 5.1.1 : Susceptibilité magnétique moyenne du modèle de Potts $q = 4$ sur un système cubique de taille $10 \times 10 \times 10$ avec une concentration de liaison $p = 0.8$ en fonction du couplage d'échange. La courbe continue correspond à une repondération de l'histogramme à partir des données d'une seule simulation au maximum de la susceptibilité et les symboles correspondent à des simulations Monte Carlo.

Par construction de la chaîne de Markov, $\wp_{\beta}(E, M)$ est la probabilité d'occurrence d'un état (E, M) au cours d'une simulation à la température inverse β . La connaissance de

la distribution \wp à une température donnée permet donc, dans l'absolu, de calculer les moyennes des grandeurs thermodynamiques à toute température ^[19, 78]. La figure (5.1.1) présente un exemple de repondération de l'histogramme. Le résultat d'une simulation étant les N mesures $\{(E_i, M_i)\}_{i=1\dots N}$, la distribution de probabilité $\wp_\beta(E, M)$ peut être approchée par

$$\wp_\beta(E, M) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(E - E_i) \delta(M - M_i). \quad (5.1.23)$$

En insérant (5.1.23) dans (5.1.22), il reste

$$\langle f \rangle_{\beta'} = \frac{\sum_i f(E_i, M_i) e^{-(\beta' - \beta)E_i}}{\sum_i e^{-(\beta' - \beta)E_i}}. \quad (5.1.24)$$

Une simulation comportant N itérations ne permet pas d'échantillonner la distribution de probabilité \wp de manière suffisante pour permettre l'utilisation de la relation (5.1.22) avec toute température inverse β' . En effet, la simulation se comporte comme une marche dirigée dans l'espace des configurations se limitant à celles les plus probables, c.à.d. limitée à une région centrée sur $\langle E \rangle_\beta = U$ et de "rayon" σ_E donné d'après le théorème fluctuation-dissipation par

$$\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle_\beta - \langle E \rangle_\beta^2 = \frac{C(\beta)}{k_B \beta^2}. \quad (5.1.25)$$

La repondération de l'histogramme n'est par conséquent valable que pour toute température $T' = 1/k_B \beta'$ telle que

$$[U(T') - U(T)]^2 < \frac{C(\beta)}{k_B \beta^2} \quad (5.1.26)$$

ce qui, en développant au premier ordre le membre de gauche, donne

$$\begin{aligned} (T' - T)^2 \left(\frac{dU}{dT} \right)_T^2 &= (T' - T)^2 C(T)^2 < k_B T^2 C(T) \\ \Leftrightarrow \left(\frac{T' - T}{T} \right)^2 &< \frac{k_B}{C(T)}. \end{aligned} \quad (5.1.27)$$

Un critère plus élaboré permet de rendre compte de l'imperfection de l'échantillonnage de la distribution de probabilité \wp due au nombre fini d'itérations ^[169].

1.2.5. Erreur statistique liée à la repondération de l'histogramme

D'après (5.1.24), la moyenne de l'observable f à une température inverse β' s'écrit

$$\langle f \rangle_{\beta'} = \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{D}} = \frac{\{f\}}{\{1\}}, \quad \{x\} = \frac{1}{N} \sum_i x(E_i, M_i) e^{-(\beta' - \beta)E_i} \quad (5.1.28)$$

et donc le carré de l'erreur statistique relative associée est

$$\frac{\Delta f^2}{\langle f \rangle^2} = \frac{\mathcal{D}^2}{\mathcal{N}^2} \left[\frac{\Delta \mathcal{N}}{\mathcal{D}} - \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{D}^2} \Delta \mathcal{D} \right]^2 = \frac{\Delta \mathcal{N}^2}{\mathcal{N}^2} + \frac{\Delta \mathcal{D}^2}{\mathcal{D}^2} - 2 \frac{\Delta \mathcal{N} \Delta \mathcal{D}}{\mathcal{N} \mathcal{D}}. \quad (5.1.29)$$

Les deux premiers termes surestiment l'erreur réelle car \mathcal{N} et \mathcal{D} sont des variables corrélées. Il est donc nécessaire de tenir compte de la covariance de \mathcal{N} et \mathcal{D} qui correspond au dernier terme de (5.1.29). En remarquant que $\{x\}$ a la forme d'une moyenne Monte Carlo (5.1.9) pour la variable

$$\phi(X_i) = x(E_i, M_i) e^{-(\beta' - \beta)E_i}, \quad (5.1.30)$$

on montre ^[76] que de la même manière qu'en (5.1.11) les corrélations entre itérations Monte Carlo conduisent à

$$\begin{cases} \Delta \mathcal{N}^2 = \sigma_{\{f,f\}}^2 (1 + 2\tau_{\{f,f\}}) / N \\ \Delta \mathcal{D}^2 = \sigma_{\{1,1\}}^2 (1 + 2\tau_{\{1,1\}}) / N \\ \Delta \mathcal{N} \Delta \mathcal{D} = \sigma_{\{f,1\}}^2 (1 + 2\tau_{\{f,1\}}) / N \end{cases} \quad (5.1.31)$$

où l'écart quadratique est

$$\begin{aligned} \sigma_{\{x,y\}}^2 &= \langle xy e^{-2(\beta' - \beta)E} \rangle - \langle x e^{-(\beta' - \beta)E} \rangle \langle y e^{-(\beta' - \beta)E} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_i x(E_i, M_i) y(E_i, M_i) e^{-2(\beta' - \beta)E_i} \\ &\quad - \frac{2}{N^2} \sum_{i,j < i} x(E_i, M_i) y(E_j, M_j) e^{-(\beta' - \beta)(E_i + E_j)} \end{aligned} \quad (5.1.32)$$

et le temps d'auto-corrélation intégré s'écrit conformément à (5.1.14)

$$\begin{aligned} \tau_{\{x,y\}} &= \frac{1}{\sigma_{\{x,y\}}^2} \sum_i \left(1 - \frac{i}{N} \right) \\ &\quad \times \left[x(E_0, M_0) y(E_i, M_i) e^{-(\beta' - \beta)(E_0 + E_i)} - \langle x e^{-(\beta' - \beta)E_0} \rangle \langle y e^{-(\beta' - \beta)E_i} \rangle \right] \end{aligned} \quad (5.1.33)$$

Il reste finalement

$$\begin{aligned} \frac{\Delta f^2}{\langle f \rangle^2} &= \frac{1}{N} \left[\left(\frac{\{f, f\}}{\{f\}^2} - 1 \right) (1 + 2\tau_{\{f,f\}}) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\{1, 1\}}{\{1\}^2} - 1 \right) (1 + 2\tau_{\{1,1\}}) - 2 \left(\frac{\{f, 1\}}{\{f\}\{1\}} - 1 \right) (1 + 2\tau_{\{f,1\}}) \right]. \end{aligned} \quad (5.1.34)$$

1.3. Algorithmes locaux

1.3.1. Algorithme de Metropolis

Un algorithme Monte Carlo est entièrement défini par la donnée d'une matrice de probabilité de transition $[W(X \rightarrow Y)]_{XY}$ satisfaisant aux conditions du paragraphe 1.1.3. Metropolis *et al.* ^[163] ont fait le choix arbitraire :

$$W(X \rightarrow Y) = W_0(X \rightarrow Y)a(X \rightarrow Y) \quad (5.1.35)$$

où $a(X \rightarrow Y) \in \{0; 1\}$ est l'acceptance de la transition $X \rightarrow Y$ et où $W_0(X \rightarrow Y)$ est une matrice symétrique. La condition du bilan détaillé (5.1.6) impose

$$\frac{a(X \rightarrow Y)}{a(Y \rightarrow X)} = \frac{\Pi(Y)}{\Pi(X)} \quad (5.1.36)$$

et donc

$$a(X \rightarrow Y) = F\left(\frac{\Pi(Y)}{\Pi(X)}\right) \quad / \quad \frac{F(z)}{F(1/z)} = z, \quad \forall z. \quad (5.1.37)$$

Metropolis *et al.* ont posé

$$F(z) = \min(z, 1) \quad (5.1.38)$$

ce qui conduit pour la distribution de Boltzmann à l'équilibre $\Pi(X) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E(X)}$ à l'algorithme suivant :

1. Proposer une transition $X_i \rightarrow X_{i+1}$. Dans le cas du modèle d'Ising, la nouvelle configuration sera obtenue en modifiant l'orientation d'un spin choisi de manière aléatoire.
2. Calculer la variation d'énergie ΔE engendrée par cette transition.
3. Si $\Delta E \leq 0$, la transition est effectuée. Dans le cas contraire, elle n'est acceptée qu'avec une probabilité $e^{-\beta \Delta E}$.

1.3.2. Ralentissement critique

Les algorithmes locaux présentent un fort ralentissement critique. En effet, l'actualisation étant locale, l'information se propage sur le réseau à la manière d'une marche au hasard. Les configurations typiques du système sont formées d'amas de diamètre de l'ordre de la longueur de corrélation ξ de sorte que l'algorithme génère deux configurations statistiquement indépendantes au bout d'un nombre d'itérations égal, par définition, au temps d'auto-corrélation intégré

$$\tau \sim \xi^z \underset{t \rightarrow 0}{\sim} L^z \quad (5.1.39)$$

où z est appelé exposant dynamique (figure 5.1.2). L'étude de la marche aléatoire sur réseau suggère un exposant dynamique $z \sim 2$. Nightingale *et al.* ^[174] ont mesuré $z \simeq 2.17$ pour le modèle d'Ising.

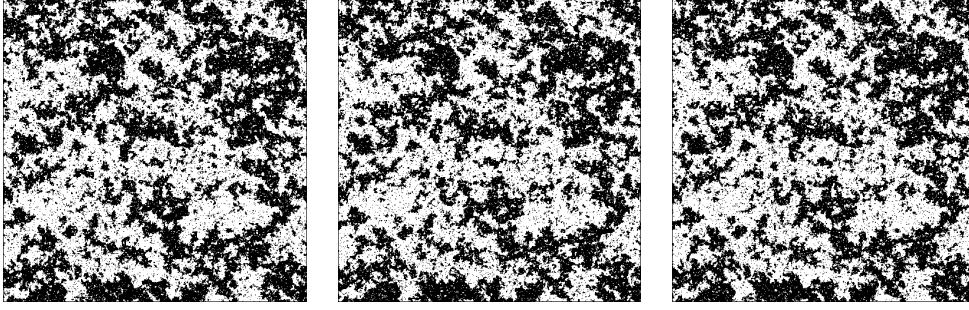


Figure 5.1.2 : Trois configurations obtenues successivement avec l'algorithme de Metropolis au point critique du modèle d'Ising bidimensionnel. Le ralentissement critique se remarque à la forte corrélation entre les trois configurations.

1.4. Algorithmes d'amas

1.4.1. Algorithme de Swendsen-Wang

1.4.1.1. Modèle de Potts en champ nul

L'algorithme de Swendsen et Wang ^[217] fut le premier permettant une réduction significative du ralentissement critique pour le modèle de Potts dans le régime de second ordre. Dans la formulation de Fortuin-Kasteleyn ^[87] (voir Chapitre 1, paragraphe 3.2) détaillée ici dans le cas général de couplages d'échange inhomogènes, la fonction de partition du modèle de Potts à q états peut s'écrire

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} e^{K_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}} = \prod_{(i,j)} e^{K_{ij}} \cdot \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} \left[(1 - e^{-K_{ij}}) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + e^{-K_{ij}} \right]. \quad (5.1.40)$$

Si on introduit des variables de liaison $\{b_{ij}\}$, il vient

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \prod_{(i,j)} e^{K_{ij}} \cdot \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} \left[\sum_{b_{ij}=0}^1 [p_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + (1 - p_{ij}) \delta_{b_{ij}, 0}] \right] \\ &= \prod_{(i,j)} e^{K_{ij}} \cdot \sum_{\{b\}} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} [p_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + (1 - p_{ij}) \delta_{b_{ij}, 0}] \end{aligned} \quad (5.1.41)$$

où $p_{ij} = 1 - e^{-K_{ij}}$ est le poids statistique associé à la liaison gelée $b_{ij} = 1$. A noter que l'absence dans le second terme d'indice de Kronecker bloquant l'état relatif des spins voisins signifie que $b_{ij} = 0$ n'impose aucune contrainte sur les spins σ_i et σ_j .

La première étape de l'algorithme exploite la double représentation du système : liaisons $\{b\}$ et spins $\{\sigma\}$ en passant alternativement de l'une à l'autre. En effectuant la sommation sur les configurations de spins dans l'équation (5.1.41), on montre que la fonction de partition s'écrit dans la représentation de Fortuin-Kasteleyn sous la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \prod_{(i,j)} e^{K_{ij}} \cdot \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} p_{ij}^{b_{ij}} (1 - p_{ij})^{1-b_{ij}} \sum_{\{\sigma\}/b_{ij}=1 \Rightarrow \sigma_i = \sigma_j} 1 \\ &= \prod_{(i,j)} e^{K_{ij}} \cdot \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} p_{ij}^{b_{ij}} (1 - p_{ij})^{1-b_{ij}} q^{C(\{b\})} \end{aligned} \quad (5.1.42)$$

où $C(\{b\})$ est le nombre d'amas de la configuration $\{b\}$. Les décorations de ces amas sont équiprobables et indépendantes les unes des autres. Cette propriété est utilisée par la seconde étape de l'algorithme qui consiste en une décoration aléatoire des amas indépendamment de l'état précédent des spins. L'algorithme de Swendsen et Wang est le suivant :

1. On gèle les liaisons ($b_{ij} = 1$) entre tous les spins voisins dans le même état avec une probabilité $p_{ij} = 1 - e^{-K_{ij}}$.
2. On groupe les spins connectés en amas et on affecte à tous les spins d'un même amas une même orientation choisie de manière aléatoire.

La largeur des amas étant de l'ordre de grandeur de la taille du système au voisinage du point critique, la réactualisation est globale à chaque itération. Il semble désormais admis que dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel, le temps d'auto-corrélation intégré suit la loi

$$\tau \sim \ln \xi \underset{t \rightarrow 0}{\sim} \ln L \quad (5.1.43)$$

ce qui correspond à un exposant dynamique $z = 0$ [96].

1.4.1.2. Modèle de Potts sous champ magnétique

En présence d'un champ magnétique, la fonction de partition du modèle de Potts s'écrit

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} e^{K_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}} \cdot \prod_i e^{H_i \delta_{\sigma_i, 0}} \\ &= \prod_{(i,j)} e^{K_{ij}} \cdot \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} [p_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + (1 - p_{ij}) \delta_{b_{ij}, 0}] \prod_i e^{H_i \delta_{\sigma_i, 0}}. \end{aligned} \quad (5.1.44)$$

La sommation sur les configurations de spins n'est plus réalisable comme en (5.1.42). Les décorations possibles d'un amas ne sont plus équiprobables mais les amas sont toujours indépendants les uns des autres [223].

Dans le cas d'un champ magnétique homogène ($H_i = H \forall i$), le système se réduit à une assemblée d'amas décorés sous champ. La distribution de probabilité de l'orientation σ d'un amas regroupant n_α spins est

$$\wp(\sigma) = \frac{1}{e^{n_\alpha H} + q - 1} [(e^{n_\alpha H} - 1) \delta_{\sigma, 0} + 1] \quad (5.1.45)$$

Il suffit donc sous champ magnétique homogène de décorer les amas suivant la distribution de probabilité (5.1.45) lors de la seconde étape de l'algorithme de Swendsen-Wang. Sous champ magnétique inhomogène, on peut introduire un spin supplémentaire appelé "spin fantôme" dont l'état $\sigma_0 = 0$ est gelé. La fonction de partition (5.1.44) peut en effet s'écrire

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \prod_{(i,j)} e^{K_{ij}} \cdot \prod_i e^{H_i} \cdot \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} [p_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + (1 - p_{ij}) \delta_{b_{ij}, 0}] \\ &\quad \times \prod_i [p_i \delta_{\sigma_i, \sigma_0} \delta_{b_{i0}, 1} + (1 - p_{i0}) \delta_{b_{i0}, 0}] \end{aligned} \quad (5.1.46)$$

où $p_{i0} = 1 - e^{-H_i}$. L'orientation du spin fantôme étant gelée, la seconde étape de l'algorithme de Swendsen-Wang doit être adaptée de telle sorte que l'amas contenant le spin fantôme ne soit pas modifié.

1.4.2. Algorithme de Wolff

L'algorithme de Swendsen-Wang n'est applicable qu'au modèle de Potts. Wolff^[231] a proposé un algorithme permettant la simulation du modèle $O(n)$ défini par l'hamiltonien

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{i,j} K_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \quad (5.1.47)$$

où les spins sont des vecteurs à n dimensions, discrets ou continus, mais pour lesquels la norme est constante ($\|\mathbf{s}\| = 1$). L'algorithme repose sur une généralisation de l'opération de renversement des spins : la réflexion par rapport à un hyperplan orthogonal à un vecteur \mathbf{r} donné

$$\mathcal{R}_{\mathbf{r}} \mathbf{s}_i = \mathbf{s}_i - 2(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}) \cdot \mathbf{r} \quad (5.1.48)$$

pour laquelle l'hamiltonien est conservé (comme lors de la décoration des amas de l'algorithme de Swendsen-Wang)

$$[\mathcal{R}_{\mathbf{r}} \mathbf{s}_i] \cdot [\mathcal{R}_{\mathbf{r}} \mathbf{s}_j] = \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j. \quad (5.1.49)$$

Après projection sur le vecteur \mathbf{r} , l'hamiltonien est celui du modèle d'Ising :

$$-\beta\mathcal{H}_{\mathbf{r}} = \sum_{i,j} K'_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad \begin{cases} \sigma_i = \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}}{\|\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}\|} \in \{-1; +1\}, \\ K'_{ij} = K_{ij} \|\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}\| \cdot \|\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}\|, \end{cases} \quad (5.1.50)$$

et la probabilité de geler une liaison (i, j) s'écrit comme

$$p(\sigma_i, \sigma_j) = 1 - e^{\min(0, K_{ij} \mathbf{s}_i \cdot [1 - \mathcal{R}_{\mathbf{r}} \mathbf{s}_j])} = 1 - e^{\min(0, 2K_{ij} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{s}_i)(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s}_j))} \quad (5.1.51)$$

où le second terme du minimum correspond au gain d'énergie après la réflexion. Wolff a également introduit une variante de l'algorithme de Swendsen-Wang reposant sur une interprétation analogue de la fonction de partition (5.1.42). Un spin est choisi de manière aléatoire et seul l'amas contenant ce spin est retourné. L'algorithme est le suivant :

1. On choisit de manière aléatoire un vecteur \mathbf{r} et un site de départ.
2. Le spin considéré est retourné selon (5.1.48). On suit ensuite de manière récursive chacune des liaisons avec la probabilité (5.1.51). L'étape 2 est répétée tant qu'une liaison peut être parcourue. A noter qu'un spin ne peut être retourné qu'une seule fois lors d'une même itération.

L'algorithme de Wolff satisfait la condition du bilan détaillé (5.1.6). Afin d'en établir la preuve, posons \mathcal{C} l'ensemble des liaisons appartenant à l'amas sur le point d'être retourné et $\delta\mathcal{C}$ l'ensemble des liaisons à sa surface. A la fin de l'itération $\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma'_i\}$,

la distribution de probabilité (5.1.51) est telle que les liaisons appartenant à \mathcal{C} ont été parcourues mais pas celles de $\delta\mathcal{C}$. On a donc

$$\frac{W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma'_i\})}{W(\{\sigma'_i\} \rightarrow \{\sigma_i\})} = \frac{\prod_{(i,j) \in \mathcal{C}} p(\sigma_i, \sigma_j) \prod_{(i,j) \in \delta\mathcal{C}} 1 - p(\sigma_i, \sigma_j)}{\prod_{(i,j) \in \mathcal{C}} p(\sigma'_i, \sigma'_j) \prod_{(i,j) \in \delta\mathcal{C}} 1 - p(\sigma'_i, \sigma'_j)}. \quad (5.1.52)$$

La distribution de probabilité (5.1.51) étant symétrique, le premier terme vaut 1. Les liaisons en bordure de l'amas sont inversées (c.à.d. $\sigma'_i = -\sigma_i$ et $\sigma'_j = \sigma_j$) et donc il vient

$$\begin{aligned} \frac{W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma'_i\})}{W(\{\sigma'_i\} \rightarrow \{\sigma_i\})} &= \frac{\prod_{(i,j) \in \delta\mathcal{C}} e^{2K_{ij}(\mathbf{s}_i, \mathbf{r})(\mathbf{s}_j, \mathbf{r})}}{\prod_{(i,j) \in \delta\mathcal{C}} e^{-2K_{ij}(\mathbf{s}'_i, \mathbf{r})(\mathbf{s}'_j, \mathbf{r})}} \\ &= e^{-2 \sum_{(i,j) \in \delta\mathcal{C}} K_{ij}(\mathbf{s}_i, \mathbf{r})(\mathbf{s}_j, \mathbf{r})} \\ &= e^{\sum_{(i,j) \in \delta\mathcal{C}} K_{ij}(\mathbf{s}'_i, \mathbf{s}'_j - \mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j)} \end{aligned} \quad (5.1.53)$$

condition du bilan détaillé (5.1.6) pour l'hamiltonien (5.1.47).

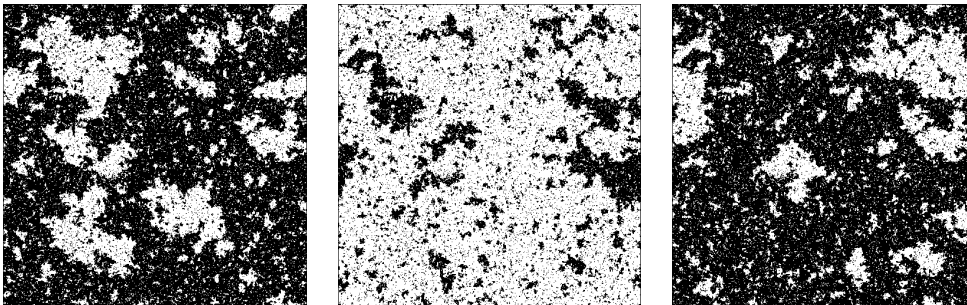


Figure 5.1.3 : Trois configurations obtenues successivement avec l'algorithme de Wolff au point critique du modèle d'Ising bidimensionnel. La comparaison avec les figures analogues pour l'algorithme de Metropolis met en évidence la diminution du ralentissement critique procurée par l'algorithme de Wolff.

L'ergodicité est garantie par le fait qu'au moins un spin est modifié à chaque itération. Là encore, le fait que la largeur des amas au point critique soit de l'ordre de grandeur de la taille du système assure un ralentissement critique réduit de l'algorithme de Wolff par rapport aux algorithmes locaux (figure 5.1.3). Il semble que l'algorithme de Wolff conduise à un exposant dynamique légèrement inférieur à celui procuré par l'algorithme de Swendsen-Wang. Cependant, l'actualisation d'un seul amas à chaque itération limite son efficacité hors du point critique. De plus, l'algorithme de Wolff peut présenter des déviations plus importantes que les algorithmes de Metropolis ou de Swendsen-Wang avec de "mauvais" générateurs de nombres aléatoires ^[77] (*R250*...).

1.4.3. Approche générale de Kandel-Domany

De nombreux algorithmes d'amas pour des problèmes divers ont été proposés dans les deux années qui ont suivi la publication de l'algorithme de Swendsen-Wang. Des généralisations trop naïves peuvent conduire à des algorithmes inefficaces. Des amas trop larges conduisent à une actualisation triviale et des interactions résiduelles entre amas

à un ralentissement critique. L'approche générale de Kandel et Domany ^[125] permet de construire un algorithme efficace pour une vaste classe d'hamiltoniens.

Soit un hamiltonien de la forme

$$\mathcal{H}(u) = \sum_l V_l(u) \quad (5.1.54)$$

où, par exemple dans le cas du modèle d'Ising, l correspond à une liaison (i, j) , V à une interaction d'échange $\sigma_i \sigma_j$ et u à l'état du système $\{\sigma\}$. La première étape de l'algorithme consiste en une généralisation du gel des liaisons de l'algorithme de Swendsen-Wang. On passe de la représentation "naturelle" du système à une nouvelle représentation définie par l'état de chacune des liaisons généralisées l . Cette nouvelle représentation $\alpha = \{V_l\}_l$ est choisie selon la distribution de probabilité $\wp(u, \alpha)$. On demande à l'algorithme de conserver le poids statistique, ce qui s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta \mathcal{H}(u, \alpha)} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \wp(u, \alpha) e^{-\beta \mathcal{H}(u)} \\ \Leftrightarrow \mathcal{H}(u, \alpha) &= \mathcal{H}(u) - \beta^{-1} \ln \wp(u, \alpha). \end{aligned} \quad (5.1.55)$$

De manière générale, on peut ajouter une constante additive à l'hamiltonien

$$\mathcal{H}(u, \alpha) = \mathcal{H}(u) - \beta^{-1} \ln \wp(u, \alpha) + C_\alpha. \quad (5.1.56)$$

Les amas de même valeur V_l forment les degrés de liberté dont la dynamique est gouvernée par l'hamiltonien $\mathcal{H}(u, \alpha)$. Il suffit désormais de simuler ce système avec un algorithme local de type Metropolis ou "Heat-Bath" qui conduit à un nouvel état u' généralisant ainsi la décoration des amas de l'algorithme de Swendsen-Wang. Un choix approprié de la distribution de probabilité $\wp(u, \alpha)$ permet de réduire, voire d'éliminer totalement les interactions entre les amas. Vérifions que la validité de la condition du bilan détaillé (5.1.6) dans la représentation α impose sa validité dans la représentation u :

$$\begin{aligned} e^{-\beta \mathcal{H}(u, \alpha)} W_\alpha(u \rightarrow u') &= e^{-\beta \mathcal{H}(u', \alpha)} W_\alpha(u' \rightarrow u) \\ \Leftrightarrow e^{-\beta \mathcal{H}(u)} \wp(u, \alpha)^{-1} W_\alpha(u \rightarrow u') &= e^{-\beta \mathcal{H}(u')} \wp(u', \alpha)^{-1} W_\alpha(u' \rightarrow u) \end{aligned} \quad (5.1.57)$$

où on a utilisé (5.1.55). Or

$$W(u \rightarrow u') = \sum_{\{\alpha\}} W_\alpha(u \rightarrow u') \wp(u', \alpha) \quad (5.1.58)$$

donc, après sommation sur $\{\alpha\}$, on retrouve la condition du bilan détaillé (5.1.6) dans la représentation u :

$$e^{-\beta \mathcal{H}(u)} W(u \rightarrow u') = e^{-\beta \mathcal{H}(u')} W(u' \rightarrow u). \quad (5.1.59)$$

Algorithme de Swendsen-Wang

L'algorithme de Swendsen-Wang tire parti du fait que l'hamiltonien de Potts s'écrit comme une somme sur les liaisons. Dans la formulation de Kandel-Domany (5.1.54), cela se traduit par le choix $-\beta V_l(u) = K_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$. La distribution de probabilité $\wp(u, \alpha)$ la plus simple est

$$\wp(\{\sigma\}, \{b/b_{ij} = 0\}) = e^{\beta \sum_l V_l(u)} = \prod_{(i,j)} e^{-K_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}} \quad (5.1.60)$$

de sorte que l'hamiltonien s'appliquant aux amas de spins liés est, avec le choix $C = 0$,

$$\mathcal{H}_{\{b\}} = 0. \quad (5.1.61)$$

Les décorations possibles de chaque amas sont donc indépendantes et équiprobables. L'entropie des amas annule exactement l'énergie de surface.

Généralisation de Nierdermayer

Afin de pouvoir contrôler la taille des amas et donc potentiellement accélérer la dynamique, Nierdermayer ^[173] a introduit une probabilité de destruction des liaisons différentes de celle de Swendsen et Wang

$$\wp(\{\sigma\}, \{b/b_{ij} = 0\}) = \prod_{(i,j)} e^{-(K_{ij} - K_0) \delta_{\sigma_i, \sigma_j}} \quad (5.1.62)$$

de sorte que l'hamiltonien s'appliquant aux amas de spins est d'après (5.1.56)

$$\mathcal{H}_{\{b\}} = \sum_{(i,j)} K_0 \delta_{\sigma_i, \sigma_j}. \quad (5.1.63)$$

Bien qu'affaiblies si $K_0 < K_{ij}$, il subsiste des interactions entre les amas.

1.5. Systèmes présentant un super-ralentissement critique

1.5.1. Super-ralentissement critique

Dans le cas d'une transition du premier ordre contrôlée par la température, la distribution de probabilité de l'énergie présente au voisinage de la température de transition deux pics séparés par une barrière d'énergie

$$\Delta F = -2\sigma_{o,d} L^{d-1} \quad (5.1.64)$$

où $\sigma_{o,d}$ est la tension de surface entre les phases ordonnée et désordonnée (figure 5.1.4). La probabilité de transition à travers cette barrière d'énergie est par conséquent

$$W_{o \rightarrow d} = \frac{\wp_{\max}}{\wp_{\min}} = e^{-\beta \Delta F} = e^{2\beta \sigma_{o,d} L^{d-1}}. \quad (5.1.65)$$

Outre le ralentissement dû à la propagation de l'information sur le réseau, le temps d'auto-corrélation intégré rend compte de la faible perméabilité de la barrière d'énergie :

$$\tau \sim L^{d/2} e^{2\beta \sigma_{o,d} L^{d-1}}. \quad (5.1.66)$$

Les verres de spin donnent également lieu à des distributions de probabilité de l'énergie présentant une succession de minima locaux dans lesquels la dynamique est piégée pendant des temps exponentiellement divergents avec la taille du système.

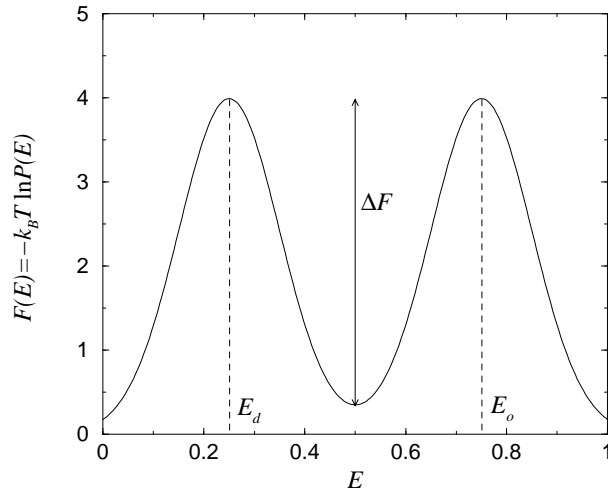


Figure 5.1.4 : Allure de la distribution de probabilité de l'énergie dans l'approximation des deux gaussiennes (voir chapitre 1) pour une transition du premier ordre conduite par la température.

1.5.2. Détermination de l'ordre et de la température de la transition

L'étude du comportement de la barrière d'énergie avec la taille du système permet de différencier l'ordre de la transition ^[138, 139]. Pour de petits réseaux, la distribution de probabilité de l'énergie présente toujours deux pics. Dans le cas d'une transition du second ordre, la distance $E_o - E_d$ entre les deux pics s'annule dans la limite thermodynamique et la hauteur de la barrière d'énergie libre ΔF reste constante (la tension superficielle décroît en L^{1-d}). En revanche, dans le cas d'une transition du premier ordre, la distance entre les deux pics reste finie et la hauteur de la barrière d'énergie libre diverge de telle manière que la limite

$$\sigma_{o,d} = \lim_{L \rightarrow +\infty} \frac{\Delta F}{2L^{d-1}} \quad (5.1.67)$$

soit définie ^[21]. Dans la théorie des effets de taille finie d'une transition du premier ordre de Borgs *et al.* appliquée au modèle de Potts ^[26, 27], la fonction de partition s'écrit

$$\mathcal{Z}(\beta) \underset{q \rightarrow +\infty}{\sim} qe^{-\beta f_o(\beta)L^d} + e^{-\beta f_d^m(\beta)L^d}. \quad (5.1.68)$$

A la température de transition β_t , on doit avoir égalité des poids statistiques des phases ordonnées et désordonnée, c.à.d. une aire égale sous la distribution de probabilité de l'énergie de part et d'autre de son minimum :

$$qe^{-\beta f_o(\beta)L^d} = e^{-\beta f_d(\beta)L^d} \\ \Leftrightarrow \int_{(E_o+E_d)/2}^{+\infty} \wp(E)dE = \int_0^{(E_o+E_d)/2} \wp(E)dE. \quad (5.1.69)$$

En utilisant la technique de repondération de l'histogramme avec les résultats d'une simulation à une température supposée proche de la température de transition, on peut déterminer β_t pour laquelle la relation (5.1.69) est satisfaite ^[116]. Contrairement à une idée répandue, les maxima $\wp(E_d)$ et $\wp(E_o)$ de la distribution de probabilité ne sont pas nécessairement égaux ^[22].

1.5.3. Ensemble multi-canonique

Afin d'éliminer les aspérités de la distribution de probabilité de l'énergie responsables du ralentissement critique, Berg et Neuhaus ^[18] ont proposé de repondérer les états microscopiques entre les pics avec un facteur inversement proportionnel à leur probabilité. Pour ce faire, on réalise une première simulation afin d'échantillonner la distribution de probabilité de l'énergie $\wp(E)$. La mesure des grandeurs physiques est réalisée lors d'une seconde simulation pour laquelle l'hamiltonien est modifié entre les deux pics

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}}{\omega(E)} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H} - \ln \omega(E)} \quad (5.1.70)$$

où $\omega(E) = \wp(E)$ entre les deux pics et est choisi égal à 1 en dehors. En aplatissant la distribution de probabilité, cette technique prévient le piégeage du système. Elle est équivalente à une modification de la température

$$\beta^{\text{eff}}(E) = \frac{\partial S}{\partial E} = \beta - \frac{\partial \ln \omega(E)}{\partial E} \quad (5.1.71)$$

ce qui permet au système de s'échapper des minima locaux. Berg et Çelik ^[17] ont proposé de définir $\omega(E)$ au moyen de plusieurs simulations multi-canoniques utilisant la distribution de probabilité obtenue avec la précédente. Chaque simulation permet d'affiner la distribution de probabilité qui, à cause du super-ralentissement critique, n'est que grossièrement échantillonnée. Après n simulations, on a

$$\wp(E) = \prod_{i=1}^{n-1} e^{\ln \omega_i(E)} \wp_n(E). \quad (5.1.72)$$

Les moyennes calculées lors de la simulation correspondent à un ensemble multi-canonique. Pour revenir aux grandeurs thermodynamiques, on doit les repondérer suivant la distribution de probabilité $\wp(E)$. La procédure s'apparente à la technique de repondération de l'histogramme (paragraphe 1.2.4) :

$$\langle \phi \rangle = \lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{i=1}^N \phi(X_i) e^{\ln \omega(E)}. \quad (5.1.73)$$

L'erreur statistique se calcule de la même manière que pour la technique de l'histogramme à la seule différence qu'on doit poser

$$\{x\} = \frac{1}{N} \sum_i x(E_i) e^{\ln \omega(E)} \quad (5.1.74)$$

de sorte que l'erreur statistique sur la moyenne $\langle \phi \rangle$ conserve la forme (5.1.34)

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \phi^2}{\langle \phi \rangle^2} = \frac{1}{N} & \left[\left(\frac{\{\phi, \phi\}}{\{\phi\}^2} - 1 \right) (1 + 2\tau_{\{\phi, \phi\}}) \right. \\ & \left. + \left(\frac{\{1, 1\}}{\{1\}^2} - 1 \right) (1 + 2\tau_{\{1, 1\}}) - 2 \left(\frac{\{\phi, 1\}}{\{\phi\}\{1\}} - 1 \right) (1 + 2\tau_{\{\phi, 1\}}) \right] \end{aligned} \quad (5.1.75)$$

où l'écart quadratique s'écrit

$$\sigma_{\{x, y\}}^2 = \frac{1}{N} \sum_i x(E_i) y(E_i) e^{2 \ln \omega(E_i)} - \frac{2}{N^2} \sum_{i, j < i} x(E_i) y(E_j) e^{\ln \omega(E_i) + \ln \omega(E_j)} \quad (5.1.76)$$

et le temps d'auto-corrélation intégré

$$\begin{aligned} \tau_{\{x, y\}} = \frac{1}{\sigma_{\{x, y\}}^2} & \sum_i \left(1 - \frac{i}{N} \right) \\ & \left[x(E_0) y(E_i) e^{\ln \omega(E_0) + \ln \omega(E_i)} - \frac{1}{N^2} \sum_i x(E_i) e^{\ln \omega(E_i)} \sum_j y(E_j) e^{\ln \omega(E_j)} \right]. \end{aligned} \quad (5.1.77)$$

L'annulation de la barrière d'énergie ramène le problème à celui de la simulation d'un système au point critique d'une transition de phase du second ordre. Le comportement exponentiel du temps d'auto-corrélation intégré laisse place à un comportement algébrique lorsqu'on utilise un algorithme multi-canonique :

$$\tau \sim e^{2\sigma_{o,d} L^{d-1}} \longrightarrow \tau \sim L^z. \quad (5.1.78)$$

1.5.4. Algorithme multi-liaisons

Les techniques multi-canoniques ne requièrent que la modification des probabilités de transition selon la nouvelle définition des poids statistiques et sont de fait simples à appliquer aux algorithmes locaux. La variation d'énergie lors du retournement d'un spin doit être remplacée pour l'algorithme de Metropolis par

$$\Delta E = E' - E \longrightarrow \Delta E + \omega(E') - \omega(E). \quad (5.1.79)$$

Pour étendre le champ d'application aux algorithmes d'amas, Janke et Kappler^[118] ont remarqué que l'énergie moyenne est proportionnelle à la densité de liaisons occupées lorsqu'on utilise l'algorithme de Swendsen-Wang ou de Wolff. En effet, ces algorithmes reposent sur l'écriture (5.1.41) de la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} [p \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + \delta_{b_{ij}, 0}], \quad (p = e^\beta - 1) \quad (5.1.80)$$

qui conduit à

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta} = -\frac{\sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} (p+1) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1}}{\sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} [p \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + \delta_{b_{ij}, 0}]} = -\frac{p+1}{p} \langle B \rangle \quad (5.1.81)$$

où $\langle B \rangle$ est le nombre moyen de liaisons gelées lors de l'algorithme de Swendsen-Wang. La distribution de probabilité $\wp(B)$ admet comme $\wp(E)$ deux pics séparés par une barrière responsable du super-ralentissement critique. Pour y remédier, on affecte à chaque configuration de liaisons un nouveau poids statistique :

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{(i,j)} [p_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{b_{ij}, 1} + (1 - p_{ij}) \delta_{b_{ij}, 0}] e^{-\ln \omega(B)} \quad (5.1.82)$$

où $\omega(B) = \wp(B)$ entre les deux pics et est choisi égal à 1 en dehors. L'algorithme de Swendsen-Wang se généralise alors en utilisant la probabilité suivante de geler une liaison b_{ij} lorsque $\sigma_i = \sigma_j$:

$$p_{MB} = \frac{p_{ij} e^{-\ln \omega(B - b_{ij} + 1)}}{e^{-\ln \omega(B - b_{ij})} + p_{ij} e^{-\ln \omega(B - b_{ij} + 1)}} \quad (5.1.83)$$

où le nombre de liaisons final est $B - b_{ij} + 1$ si la liaison est gelée et $B - b_{ij}$ dans le cas contraire. Grandeurs thermodynamiques et erreurs statistiques associées se calculent de la même manière qu'en (5.1.73) et (5.1.75).

2. Matrices de transfert

2.1. Application aux systèmes désordonnés

On considère un système classique bidimensionnel de degrés de liberté $\{\sigma_{ij}\}^\dagger$ et gouverné par un hamiltonien de la forme

$$\mathcal{H}[\{s\}] = \sum_j \left[\mathcal{H}^{(1)}(\{\sigma_{ij}\}) + \mathcal{H}^{(2)}(\{\sigma_{ij}, \sigma_{ij+1}\}) \right] \quad (5.2.1)$$

c.à.d. ne présentant des interactions qu'entre degrés de liberté appartenant à des rangées voisines j et $j + 1$. En définissant la matrice de transfert T_j comme

$$\langle j | T_j | j + 1 \rangle = e^{-\beta \left[\frac{1}{2} (\mathcal{H}^{(1)}(\{\sigma_{ij}\}) + \mathcal{H}^{(1)}(\{\sigma_{ij+1}\})) + \mathcal{H}^{(2)}(\{\sigma_{ij}, \sigma_{ij+1}\}) \right]}, \quad (5.2.2)$$

le poids statistique (à une constante de normation près) de la configuration $\{\sigma\} = \{\sigma_{ij}\}_{i,j=1\dots M}$ s'écrit pour un système avec des conditions aux limites périodiques ($\sigma_{i1} = \sigma_{iM+1}$) sous la forme

$$e^{-\beta \mathcal{H}[\{s\}]} = \prod_{j=1}^M \langle j | T_j | j + 1 \rangle \quad (5.2.3)$$

et donc la fonction de partition se réduit à la trace du produit des matrices de transfert :

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left[\prod_{j=1}^M T_j \right]. \quad (5.2.4)$$

[†] Attirons l'attention sur le fait que ij désigne ici les coordonnées d'un site et non plus un couple de sites i et j comme dans la section précédente.

Dans le cas particulier où l'hamiltonien est invariant par translation dans la direction j , la fonction de partition tend dans la limite thermodynamique $M \rightarrow +\infty$ vers la $M^{\text{ième}}$ puissance de la plus grande valeur propre λ_0 de la matrice de transfert T :

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} T^M = \sum_i \lambda_i^M \xrightarrow{M \rightarrow +\infty} \lambda_0^M. \quad (5.2.5)$$

A chaque observable locale $X(\sigma_{ij})$ peut être associé un opérateur X défini de telle sorte que la moyenne thermodynamique $\langle X \rangle$ soit égale à la moyenne de X sur l'état fondamental $|0\rangle$ du produit des matrices de transfert :

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} X T^M = \frac{\sum_i \lambda_i^M \langle i | X | i \rangle}{\sum_i \lambda_i^M} \underset{M \rightarrow +\infty}{\sim} \langle 0 | X | 0 \rangle. \quad (5.2.6)$$

Dans le cas où l'élément de matrice $\langle 0 | X | 0 \rangle$ est nul, la moyenne $\langle X \rangle$ est proportionnelle à la moyenne $\langle n | X | n \rangle$ sur le premier état excité $|n\rangle$ conduisant à un résultat non nul :

$$\langle X \rangle = \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_0} \right)^M \langle n | X | n \rangle. \quad (5.2.7)$$

Dans le cas d'un système désordonné, l'absence d'invariance par translation oblige à travailler avec un produit de matrices de transfert dont le nombre diverge dans la limite thermodynamique. Le théorème d'Oseledec ^[178] assure que, pour toute configuration de désordre et donc pour toute séquence $\{T_j\}_{j=1\dots M}$, la densité d'énergie libre existe dans la limite thermodynamique et est donnée pour un système de largeur L par

$$f = -\frac{1}{L} \lim_{M \rightarrow +\infty} \frac{1}{M} \ln \text{Tr} \left[\prod_{j=1}^M T_j \right] = -\frac{\Lambda_0}{L} \quad (5.2.8)$$

où Λ_0 est le premier **exposant de Lyapunov** ^[89]

$$\Lambda_0 = \lim_{M \rightarrow +\infty} \frac{1}{M} \ln \left\| \left\| \left[\prod_{j=1}^M T_j \right] |u_0\rangle \right\| \right\| \quad (5.2.9)$$

pour tout vecteur normé $|u_0\rangle$. Cet exposant a été introduit dans le contexte des systèmes chaotiques définis par l'équation du mouvement $\mathbf{r}_{n+1} = T_n \mathbf{r}_n$. Il fournit une mesure du taux de croissance d'un vecteur initial \mathbf{r}_0 quelconque. Des exposants de Lyapunov d'ordres suivants peuvent être définis suivant un schéma analogue à celui de la méthode projective de diagonalisation. L'exposant de Lyapunov d'ordre n est ainsi

$$\Lambda_n = \lim_{M \rightarrow +\infty} \frac{1}{M} \ln \left\| \|u_n(M)\| \right\| \quad (5.2.10)$$

où

$$|u_n(M)\rangle = \left[\prod_{j=1}^M T_j - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{|u_m(M)\rangle \langle u_m(M)|}{\| |u_m(M)\rangle \|} \right] |u_n\rangle \quad (5.2.11)$$

pour toute famille libre de vecteurs normés $\{|u_i\rangle\}_{i=0\dots n}$. Des exposants de Lyapunov généralisés à toute valeur réelle de n ont été introduits pour l'étude des propriétés multifractales des fonctions de corrélation ^[55].

2.2. Matrice de transfert de connectivité

La matrice de transfert du modèle de Potts dans l'espace des états de spins :

$$\begin{aligned} & \langle \sigma_{1j}, \dots, \sigma_{Lj} | T_j | \sigma_{1j+1}, \dots, \sigma_{Lj+1} \rangle \\ & = e^{\sum_{i=1}^L \left[\frac{K_{ij}}{2} \delta_{\sigma_{ij}, \sigma_{i+1j}} + \frac{K_{ij+1}}{2} \delta_{\sigma_{ij+1}, \sigma_{i+1j+1}} + K'_{ij} \delta_{\sigma_{ij}, \sigma_{ij+1}} + \frac{H_{ij}}{2} \delta_{\sigma_{ij}, 0} + \frac{H_{ij+1}}{2} \delta_{\sigma_{ij+1}, 0} \right]} \end{aligned} \quad (5.2.12)$$

comporte un nombre $q^L \times q^L$ d'éléments dont la dépendance est exponentielle avec la largeur L du ruban. Afin de réduire la dimension de la matrice de transfert, on utilise le fait que l'interaction d'échange entre spins premiers voisins n'est effective que s'ils sont dans la même état. Dans le cas contraire, l'hamiltonien ne dépend pas de l'état relatif des spins. On peut par conséquent réduire l'espace de Hilbert en réalisant une sommation partielle qui laisse pour seuls degrés de liberté les connectivités entre spins. La fonction de partition de modèle de Potts s'identifie alors à la fonction génératrice des polynômes de Whitney, eux-mêmes reliés au problème du coloriage d'une carte.

2.2.1. Formulation de Fortuin-Kasteleyn

Dans la formulation de Fortuin-Kasteleyn, la fonction de partition du modèle de Potts sous champ s'écrit de manière générale sous la forme ^[87] :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} & = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} e^{K_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}}} \prod_{\mathbf{r}} e^{H_{\mathbf{r}} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, 0}} \\ & = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} (u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}} + 1) \cdot \prod_{\mathbf{r}} (v_{\mathbf{r}} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, 0} + 1) \end{aligned} \quad (5.2.13)$$

où $\mathbf{r} = (i, j)$ et où on a posé

$$u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} = e^{K_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}} - 1, \quad v_{\mathbf{r}} = e^{H_{\mathbf{r}}} - 1. \quad (5.2.14)$$

Le champ magnétique apparaît sous la forme d'un couplage de tous les spins avec un spin fantôme σ_0 "gelé" dans la direction du champ magnétique. Si on introduit maintenant des variables de liaison $b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}$, la fonction de partition devient

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} & = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \left[\sum_{b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}=0}^1 \left(u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}} \delta_{b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, 1} + \delta_{b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, 0} \right) \right] \cdot \prod_{\mathbf{r}} \left[\sum_{b_{\mathbf{r}0}=0}^1 \left(v_{\mathbf{r}} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, 0} \delta_{b_{\mathbf{r}0}, 1} + \delta_{b_{\mathbf{r}0}, 0} \right) \right] \\ & = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{b\}} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \left(u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}} \delta_{b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, 1} + \delta_{b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, 0} \right) \cdot \prod_{\mathbf{r}} \left(v_{\mathbf{r}} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, 0} \delta_{b_{\mathbf{r}0}, 1} + \delta_{b_{\mathbf{r}0}, 0} \right) \end{aligned} \quad (5.2.15)$$

Définissons un graphe G sur le réseau complété d'un site fantôme comme

$$G = \{b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}\}_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \cup \{b_{\mathbf{r}0}\}_{\mathbf{r}}. \quad (5.2.16)$$

La sommation sur les états possibles de chaque liaison équivaut à une sommation sur l'ensemble des graphes G , c.à.d.

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{G\}} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}=1} u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}} \cdot \prod_{\mathbf{r}/b_{\mathbf{r}0}=1} v_{\mathbf{r}} \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, 0}. \quad (5.2.17)$$

Pour un graphe G donné, chaque liaison active bloque l'état relatif des spins qu'elle lie de sorte que la sommation sur les spins se réduit à une sommation sur les décorations des amas indépendants de spins :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{G\}} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}=1} u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \prod_{\mathbf{r}/b_{\mathbf{r}0}=1} v_{\mathbf{r}} \left[\sum_{\text{Décorations}} 1 \right] \\ &= \sum_{\{G\}} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}=1} u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \prod_{\mathbf{r}/b_{\mathbf{r}0}=1} v_{\mathbf{r}} q^{C(G)} \end{aligned} \quad (5.2.18)$$

où $C(G)$ est le nombre d'amas indépendants dans le graphe G . Chaque liaison est une contrainte qui réduit le nombre N des degrés de liberté du système. En tenant compte des contraintes définies plusieurs fois, c.à.d. des liaisons pour lesquelles il existe un chemin fermé de liaisons qui gèle déjà l'état relatif des spins, on arrive à la relation d'Euler

$$C(G) = N - b(G) + l(G) \quad (5.2.19)$$

où $b(G)$ est le nombre de liaisons du graphe G et $l(G)$ son nombre de boucles indépendantes. La fonction de partition (5.2.18) peut alors s'écrire

$$\mathcal{Z} = q^N \sum_{\{G\}} q^{l(G)} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}=1} \frac{u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}}{q} \prod_{\mathbf{r}/b_{\mathbf{r}0}=1} \frac{v_{\mathbf{r}}}{q}. \quad (5.2.20)$$

Le nombre d'états q n'entre plus dans la fonction de partition que comme un paramètre auquel on peut donner des valeurs non entières.

2.2.2. Espace de connectivité

La non-localité des interactions introduite par le terme $q^{l(G)}$ impose la construction de la matrice de transfert dans un espace où chaque état conserve la mémoire des connectivités entre spins.

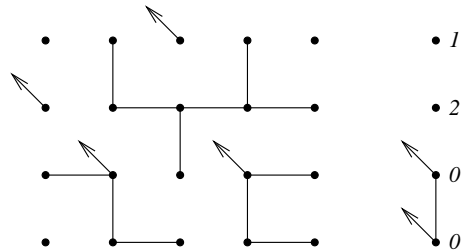


Figure 5.2.1 : Exemple de graphe (à gauche) et la codification associée à la connectivité sur la dernière colonne (à droite). Les flèches correspondent à des liaisons avec le spin fantôme.

On peut numérotter chaque connectivité α sur une colonne donnée en attribuant à chaque site i de cette colonne un index η_i défini de tel sorte que deux sites connectés par une ou plusieurs liaisons possèdent le même index ^[23]. Tout site connecté indirectement ou non au spin fantôme reçoit l'index $\eta_i = 0$ (figure 5.2.1). Le nombre de connectivités est

indépendant du nombre d'états q . Il croît asymptotiquement de manière exponentielle (tableau 5.2.1) :

$$\begin{cases} c_L = \frac{4L-2}{L+1} c_{L-1} \underset{L \gg 1}{\sim} 4^L, \\ d_L \underset{L \gg 1}{\sim} 5^L. \end{cases} \quad (5.2.21)$$

L	c_L	d_L	e_L
2	2	5	5
3	5	15	15
4	14	51	49
5	42	188	168
6	132	731	594
7	429	2950	2145
	...		
12	208.012	4.302.645	1.560.090

Tableau 5.2.1 : Nombre de connectivités pour un ruban de largeur L en l'absence de champ magnétique et donc de spin fantôme (c_L), en présence de champ magnétique (d_L) et dans la représentation utilisée pour le calcul des corrélations spin-spin lorsque $H = 0$ (e_L).

La construction des connectivités repose sur les règles suivantes :

$$\begin{cases} \eta_i \leq \eta_k + 1 \quad \forall k < i, \\ (\eta_i = \eta_j \neq 0 ; \eta_k = \eta_l \neq 0 ; i < k < j < l) \Rightarrow \eta_i \neq \eta_k. \end{cases} \quad (5.2.22)$$

La première de ces règles assure que les amas indépendants sont numérotés dans un ordre croissant. Elle est nécessaire pour que toute connectivité soit caractérisée par un unique ensemble d'index $\{\eta_1, \dots, \eta_L\}$. La seconde règle découle de l'impossibilité d'avoir croisement de chemins de liaisons actives.

2.2.3. Matrice de transfert

Soit $\mathcal{Z}(M, \alpha)$ la fonction de partition d'un ruban de longueur M et dont la connectivité est α sur sa dernière colonne. D'après (5.2.20), on a

$$\mathcal{Z}(M, \alpha) = q^N \sum_{\{G/\alpha\}} q^{l(G)} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}=1} \frac{u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}}{q} \prod_{\mathbf{r}/b_{\mathbf{r}, 0}=1} \frac{v_{\mathbf{r}}}{q} \quad (5.2.23)$$

et donc

$$\mathcal{Z}(M+1, \beta) = q^L \sum_{\alpha} \mathcal{Z}(M, \alpha) q^{\Delta l(\alpha, \beta)} \prod_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \in \mathcal{L}(M+1)/b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}=1} \frac{u_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}}{q} \prod_{\mathbf{r} \in \mathcal{L}(M+1)/b_{\mathbf{r}0}=1} \frac{v_{\mathbf{r}}}{q} \quad (5.2.24)$$

où les produits se restreignent aux sites sur la dernière colonne et où $\Delta l(\alpha, \beta)$ est la variation du nombre de boucles indépendantes en ajoutant une colonne dont la connectivité est β . La matrice de transfert T_M est définie comme

$$\mathcal{Z}(M+1) = T_M \mathcal{Z}(M) \quad (5.2.25)$$

où $\mathcal{Z}(M)$ est un vecteur dont les composantes sont les poids statistiques $\mathcal{Z}(M, \alpha)$ d'un ruban de longueur M et dont la connectivité sur la dernière colonne est α .

La matrice de transfert peut se factoriser sous la forme d'un produit de $3L$ matrices de transfert (figure 5.2.2) créant chacune une liaison horizontale (T_h), verticale (T_v) ou avec le spin fantôme (T_g) :

$$T_j = \prod_{i=1}^L T_g^{(ij)} \prod_{i=1}^L T_v^{(ij)} \prod_{i=1}^L T_h^{(ij)}. \quad (5.2.26)$$

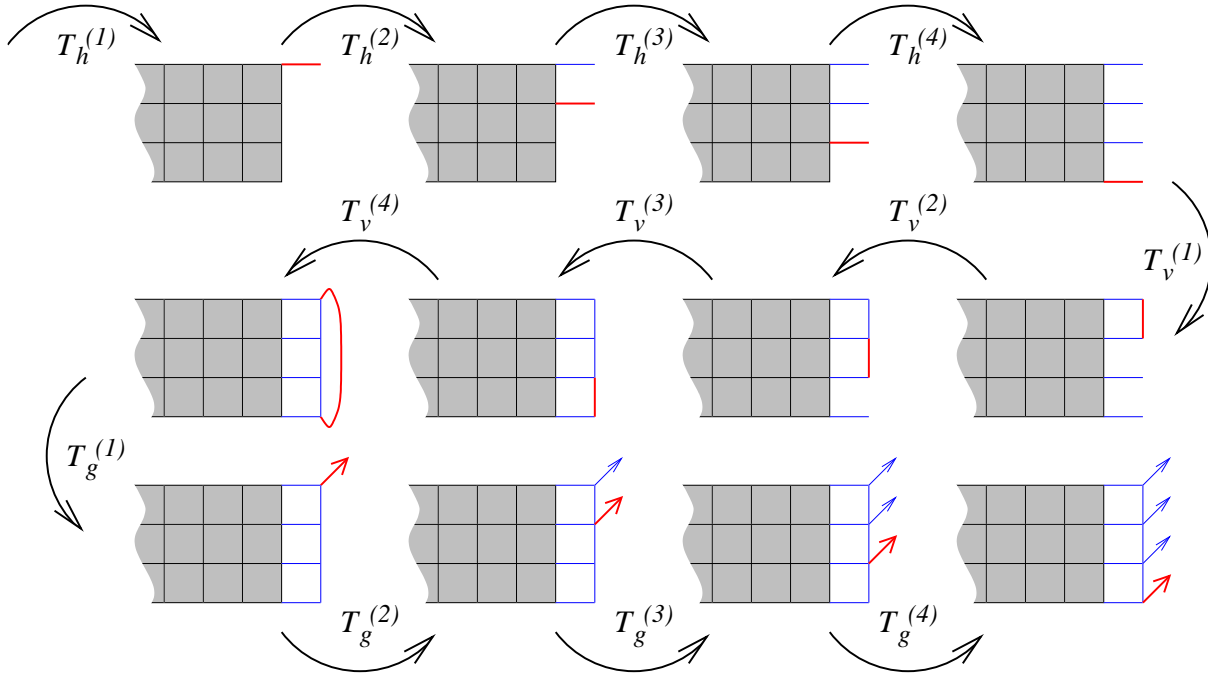


Figure 5.2.2 : Décomposition de la matrice de transfert T en $3L$ matrices créant chacune une liaison.

Chaque liaison $b_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}$ ne pouvant prendre que deux états possibles, les matrices de transfert $T_h^{(ij)}$, $T_v^{(ij)}$ et $T_g^{(ij)}$ n'ont que deux éléments non nuls par colonne. En effet, la relation (5.2.24) permet de montrer qu'on a

$$\begin{cases} T_h^{(ij)} = u_{ij, ij+1} \mathbb{1} + q^{-1/2} U_{2i}, \\ T_v^{(ij)} = \mathbb{1} + q^{-1/2} u_{ij, i+1} V_{2i-1}, \\ T_g^{(ij)} = \mathbb{1} + q^{-1/2} v_{ij} V_i, \end{cases} \quad (5.2.27)$$

où

$[U_{2i}]_{\alpha\beta} = q^{1/2}$ si on change la connectivité de α à β en déconnectant le site i ,
c.à.d. si on crée un nouvel amas en i avec par conséquent un index η_i unique,

$[U_{2i-1}]_{\alpha\beta} = q^{\delta_{\alpha,\beta}-1/2}$ si on change la connectivité de α à β en connectant le site i avec le site voisin sur la même colonne, c.à.d. si on fusionne les amas de part et d'autre de la liaison avec par conséquent même index pour tous les sites de cet amas. Si $\alpha = \beta$ alors il existait déjà une liaison implicite et le facteur q supplémentaire traduit la variation du nombre de boucles indépendantes,

$[V_i]_{\alpha\beta} = q^{\delta_{\alpha,\beta}-1/2}$ si on change la connectivité de α à β en connectant le site i avec le spin fantôme, c.à.d. si on affecte l'index $\eta = 0$ à tous les sites appartenant au même amas que le site i .

Tous les autres éléments sont nuls. Les opérateurs U_{2i} et U_{2i-1} forment une algèbre de Temperley-Lieb ^[154]. En pratique, on se contente de stocker la position des éléments non nuls des matrices U_{2i} et U_{2i-1} . On peut encore réduire la quantité d'informations à stocker en introduisant un opérateur de translation P dans l'espace des connectivités. Cet opérateur ne possède qu'un élément non nul par ligne égal à 1. En effet,

$$\forall |\alpha\rangle, \exists |\beta\rangle \text{ unique} / P|\alpha\rangle = |\beta\rangle. \quad (5.2.28)$$

Dans le cas particulier d'un système homogène, on a simplement

$$T_h^{(ij)} = P^{i-1} T_h^{(1j)} P^{1-i} \quad (5.2.29)$$

et donc

$$\prod_{i=1}^L T_h^{(ij)} = \prod_{i=1}^L P^{i-1} T_h^{(1j)} P^{1-i} = \left[P T_h^{(1j)} \right]^L. \quad (5.2.30)$$

Dans le cas plus général d'un système inhomogène, on peut écrire de la même manière

$$T_h^{(ij)} = \mathbb{1} + q^{-1/2} u_{ij,ij+1} U_{2i} = \mathbb{1} + q^{-1/2} u_{ij,ij+1} P^{i-1} U_2 P^{1-i} \quad (5.2.31)$$

ce qui conduit à

$$\prod_{i=1}^L T_h^{(ij)} = \prod_{i=1}^L \left[\mathbb{1} + q^{-1/2} u_{ij,ij+1} P^{i-1} U_2 P^{1-i} \right]. \quad (5.2.32)$$

2.2.4. Moyennes thermodynamiques

La construction de la matrice de transfert assure que la valeur propre associée à l'état fondamental est égale à la fonction de partition. On ne sait a priori rien sur ses états excités. Le calcul des exposants critiques ne peut donc pas se faire en utilisant la relation gap-exposant. Une solution est le recours à des dérivations numériques de l'énergie libre par rapport au champ magnétique pour les grandeurs magnétiques ou par rapport à la température pour les grandeurs thermiques. Connaissant l'état fondamental et donc le poids statistique de chaque connectivité, on peut également calculer les moyennes thermodynamiques des quantités locales pouvant s'exprimer en fonction de l'état relatif des spins sur une même colonne, par exemple le profil d'énergie.

2.2.4.1. Corrélations spin-spin dans la direction temporelle

La double différentiation par rapport aux champs locaux $h_{\mathbf{r}}$ et $h_{\mathbf{r}'}$ lors du calcul de la fonction de corrélation spin-spin $\langle \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}} \rangle$ nécessite l'emploi d'une représentation incluant deux spins fantômes. Pour remédier au problème que pose la dimension de l'espace de Hilbert associé à une telle représentation, on peut introduire une représentation conservant la mémoire de la connectivité des spins entre eux sur une même colonne mais aussi de leur connectivité avec le site \mathbf{r} (figure 5.2.3). En effet, la fonction de corrélation spin-spin $\langle \delta_{\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}} \rangle$ est égale à la probabilité que les spins $\sigma_{\mathbf{r}}$ et $\sigma_{\mathbf{r}'}$ soient dans le même état et donc à une constante $1/q$ près (probabilité que deux amas non connectés soient dans le même état) à la connectivité entre les deux sites \mathbf{r} et \mathbf{r}' .

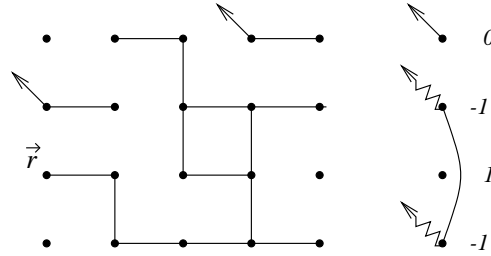


Figure 5.2.3 : Exemple de connectivité incluant à la fois la connectivité avec un site fantôme (flèche droite) et avec le site \mathbf{r} (flèche brisée).

L'encodage des connectivités est identique à celui du paragraphe 2.1.3 à ceci près que les sites connectés au site \mathbf{r} reçoivent tous un même index, $\tilde{\eta} = -1$ par exemple. Dans la représentation ainsi obtenue, le nombre de connectivités e_L croît plus lentement que celui (d_L) nécessaire à l'introduction d'un champ magnétique (tableau 5.2.1) :

$$\begin{cases} c_L = \frac{4L-2}{L+1} c_{L-1} \underset{L \gg 1}{\sim} 4^L, \\ d_L \underset{L \gg 1}{\sim} 5^L, \\ e_L = \frac{L+3}{2} c_L \underset{L \gg 1}{\sim} 4^L L. \end{cases} \quad (5.2.33)$$

Contrairement aux amas connectés à un site particulier \mathbf{r} , les amas connectés au spin fantôme ne sont pas contraints de satisfaire la règle de non-croisement (5.2.22) ce qui autorise un plus grand nombre de connectivités. La fonction de corrélation spin-spin s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_{ij}, \sigma_{kl}} \rangle &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[\prod_{m=1}^j T_m \right] L_i \left[\prod_{m=j+1}^l T'_m \right] R_k \left[\prod_{m=l+1}^N T_m \right] \\ &\underset{i, N-l \gg 1}{\sim} \langle 0 | L_i \left[\prod_{m=j+1}^l T'_m \right] R_k | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (5.2.34)$$

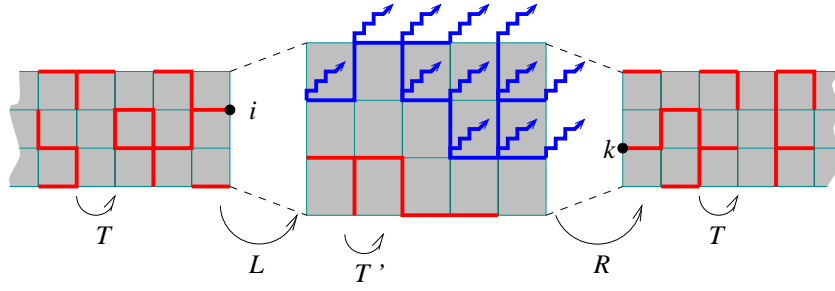


Figure 5.2.4 : Calcul de la fonction de corrélation spin-spin entre les sites (i, j) et (k, l) .

Lorsque le ruban a été construit avec la matrice de transfert “normale” T jusqu’à la colonne contenant le site (i, j) , on applique l’opérateur L faisant passer l’état du système de la représentation de connectivité $|\alpha\rangle = (\eta_1^\alpha, \dots, \eta_L^\alpha)$ à la représentation étendue $|\alpha'\rangle = (\tilde{\eta}_1^{\alpha'}, \dots, \tilde{\eta}_L^{\alpha'})$ (figure 5.2.4). Cet opérateur attribue à tous les sites appartenant au même amas connecté que le site (i, j) un index $\tilde{\eta} = -1$. Seuls les éléments de matrice $\langle \alpha | L | \alpha' \rangle$ tels que

$$\tilde{\eta}_m^{\alpha'} = \begin{cases} -1 & \text{si } \eta_m^\alpha = \eta_i^\alpha, \\ \eta_m^\alpha & \text{sinon,} \end{cases} \quad \forall m \in [1; L] \quad (5.2.35)$$

sont non nuls et égaux à un. A toute connectivité α correspond une unique connectivité étendue α' , donc la matrice L ne comporte qu’un élément non nul par ligne. L’évolution du système entre les colonnes contenant les sites (i, j) et (k, l) se fait par application de la matrice de transfert étendue T' dont l’expression générale est identique à (5.2.27). Les nouveaux amas créés lors de l’application de U_{2i-1} reçoivent comme précédemment un index $\tilde{\eta} > 0$, c’est-à-dire que les nouveaux amas créés par l’agitation thermique après la $j^{\text{ième}}$ colonne ne peuvent pas être connectés au site (i, j) . La dernière étape consiste en un retour dans l’espace de Hilbert “normal” par application d’un opérateur R . Les composantes correspondant à des états déconnectés du site (i, j) au point (k, l) , c.à.d. telles que $\tilde{\eta} \geq 0$, sont affectées d’un facteur $1/q$. Les seuls éléments non nuls de R sont ceux correspondant à des connectivités étendue $|\alpha'\rangle$ et normale $|\alpha\rangle$ compatibles, c.à.d. pour lesquelles

$$\tilde{\eta}_m^{\alpha'} \in \{-1; \eta_m^\alpha\}, \quad \forall m \in [1; L]. \quad (5.2.36)$$

Lorsque c’est le cas, on a

$$\langle \alpha' | R | \alpha \rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } \tilde{\eta}_j^{\beta'} = -1, \\ 1/q & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.2.37)$$

2.2.4.2. Corrélation énergie-énergie dans la direction temporelle

La fonction de corrélation énergie-énergie dans la direction temporelle $\langle \delta_{\sigma_{ij}, \sigma_{i+1, j}} \delta_{\sigma_{kl}, \sigma_{k+1, l}} \rangle$ correspond à une trace partielle de la matrice de transfert sur l’ensemble des

configurations de spins pour lesquelles on simultanément $\sigma_{ij} = \sigma_{i+1j}$ et $\sigma_{kl} = \sigma_{k+1l}$. Le poids statistique d'un graphe $G = \{b_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\}$ donné est par conséquent

$$\frac{q^N}{\mathcal{Z}} q^{l(G)} \prod_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \frac{u_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{q} \omega(G) \quad (5.2.38)$$

où

$$\omega(G) = \begin{cases} 1 & \text{si } b_{ij,i+1j} = 1 \text{ et } b_{kl,k+1l} = 1, \\ 1/q & \text{si } b_{ij,i+1j} = 1 \text{ ou (exclusif) } b_{kl,k+1l} = 1, \\ 1/q^2 & \text{si } b_{ij,i+1j} = 0 \text{ et } b_{kl,k+1l} = 0. \end{cases} \quad (5.2.39)$$

On doit donc conserver l'état de la liaison $b_{ij,i+1j}$ lors de la construction du système entre les colonnes j et l pour finalement la comparer à $b_{kl,k+1l}$. Pour ce faire, on introduit une connectivité étendue gardant trace des connectivités entre spins sur une même colonne et de l'état de la liaison entre les sites (i, j) et $(i + 1, j)$.

$$|\alpha'\rangle = \{ \{ \eta_m^\alpha \}_{m=1\dots L}, b_{ij,i+1j} \} \quad (5.2.40)$$

Le nombre de connectivités étendues est simplement le double du nombre des connectivités "normales". De la même manière que pour les corrélations spin-spin, on peut écrire la fonction de corrélation énergie-énergie sous la forme

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_{ij}, \sigma_{i+1j}} \delta_{\sigma_{kl}, \sigma_{k+1l}} \rangle &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[\prod_{m=1}^j T_m \right] L_i \left[\prod_{m=j+1}^l T'_m \right] R_k \left[\prod_{m=l+1}^N T_m \right] \\ &\underset{i, N-l \gg 1}{\sim} \langle 0 | L_i \left[\prod_{m=j+1}^l T'_m \right] R_k | 0 \rangle \end{aligned} \quad (5.2.41)$$

où

$$\langle \alpha | L | \alpha' \rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } |\alpha'\rangle = \left(\{ \eta_k^{\alpha'} \}_{k=1\dots L}, b_{ij,i+1j} \right) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.2.42)$$

et

$$\langle \alpha' | R | \alpha \rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } |\alpha'\rangle = (\{ \eta_m^\alpha \}_{m=1\dots L}, b_{ij,i+1j} = 1) \text{ et } \eta_k^\alpha = \eta_{k+1}^\alpha \\ 1/q & \text{si } |\alpha'\rangle = (\{ \eta_m^\alpha \}_{m=1\dots L}, b_{ij,i+1j} = 1) \text{ et } \eta_k^\alpha \neq \eta_{k+1}^\alpha \\ 1/q & \text{si } |\alpha'\rangle = (\{ \eta_m^\alpha \}_{m=1\dots L}, b_{ij,i+1j} = 0) \text{ et } \eta_k^\alpha = \eta_{k+1}^\alpha \\ 1/q^2 & \text{si } |\alpha'\rangle = (\{ \eta_m^\alpha \}_{m=1\dots L}, b_{ij,i+1j} = 0) \text{ et } \eta_k^\alpha \neq \eta_{k+1}^\alpha \end{cases} \quad (5.2.43)$$

La matrice de transfert étendue fait évoluer de manière indépendante les états correspondant aux deux secteurs $b_{ij,i+1j} = 0$ et $b_{ij,i+1j} = 1$ et est donc de la forme

$$T' = \begin{pmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix}. \quad (5.2.44)$$

2.3. Groupe de Renormalisation de la Matrice Densité (DMRG)

2.3.1. Introduction

Les méthodes de diagonalisation approchée basées sur la méthode projective (algorithme de Lanczos, méthodes d'Arnoldi ...) requièrent le stockage en mémoire d'au moins deux vecteurs simultanément. La dimension de l'espace de Hilbert associé à une chaîne quantique augmentant exponentiellement avec la taille du système, les capacités de stockage actuellement disponibles limitent ces méthodes à des chaînes relativement petites. La méthode **DMRG** (*Density Matrix Renormalization Group*) introduite par White ^[226, 227] résout de manière approchée le problème en utilisant un espace de Hilbert réduit dans lequel la dynamique d'une partie du système, appelé **environnement**, est gouvernée par un hamiltonien effectif.

2.3.2. Principe de la DMRG

La DMRG repose sur une construction itérative de l'état fondamental de l'hamiltonien H . Le système est découpé en deux blocs, droit et gauche. A chaque itération, deux sites sont insérés au centre de la chaîne et couplés aux blocs droit et gauche. Le nouvel état fondamental $|\psi\rangle$ est alors un état intriqué :

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \phi_{ij} |i\rangle |j\rangle \tag{5.2.45}$$

des états associés aux deux nouveaux sites $|i\rangle$ et à leur environnement formé des blocs droit et gauche $|j\rangle = |j^L\rangle \otimes |j^R\rangle$. L'approximation introduite par la DMRG consiste en une troncation de la base $\{|i\rangle\}$ à la sous-famille $\{|u^\alpha\rangle\}$ pour laquelle l'état fondamental approché

$$|\psi\rangle \approx |\bar{\psi}\rangle = \sum_{\alpha,j} a_{\alpha,j} |u^\alpha\rangle |j\rangle \tag{5.2.46}$$

minimise l'erreur quadratique

$$S = \|\psi\rangle - |\bar{\psi}\rangle\|^2. \tag{5.2.47}$$

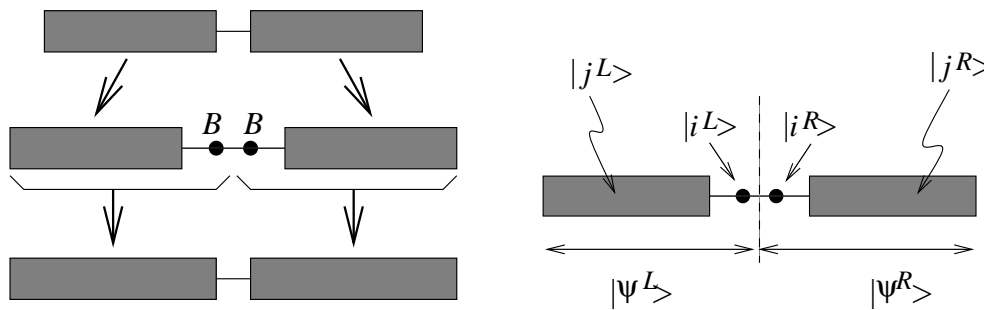


Figure 5.2.5 : Construction itérative de la chaîne par insertion de deux sites (à gauche) et décomposition de l'état fondamental (à droite).

On montre aisément que la minimisation de (5.2.47) impose que la famille $\{|u^\alpha\rangle\}_\alpha$ optimale corresponde aux états propres associés aux plus grandes valeurs propres de la matrice densité réduite

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{i'j} \quad (5.2.48)$$

des deux sites au centre de la chaîne. L'hamiltonien effectif gouvernant la dynamique dans l'espace de Hilbert réduit $\{|u^\alpha\rangle |j\rangle\}_{\alpha,j}$ s'écrit

$$H' = OHO^\dagger \quad (5.2.49)$$

où O est une matrice rectangulaire dont les colonnes correspondent aux m vecteurs propres conservés de la matrice densité. Tout opérateur destiné à être appliqué à l'état fondamental à la fin du calcul doit être "renormalisé" selon (5.2.49) après chaque itération.

2.3.3. Algorithme de taille infinie

Partant de quatre sites pour lesquels une diagonalisation exacte peut être réalisée, l'algorithme de taille infinie construit l'hamiltonien effectif d'une chaîne dont la longueur dépend linéairement du nombre d'itérations effectuées.

1. Construire puis diagonaliser l'hamiltonien de la chaîne complète formée des deux sites au centre de la chaîne et des deux blocs à ses deux extrémités. Seul l'état fondamental

$$|\psi\rangle = \sum_{i^L, j^L, i^R, j^R} \psi_{(j^L, i^L; i^R, j^R)} |j^L\rangle |i^L\rangle |i^R\rangle |j^R\rangle \quad (5.2.50)$$

est indispensable à la poursuite du calcul.

2. A partir de l'état fondamental, construire les deux matrices densité associées aux moitiés respectivement gauche et droite de la chaîne

$$\begin{cases} \rho_{(j^L, i^L; j^{L'}, i^{L'})}^L = \sum_{i^R, j^R} \psi_{(j^L, i^L; i^R, j^R)}^* \psi_{(j^{L'}, i^{L'}; i^R, j^R)} \\ \rho_{(j^R, i^R; j^{R'}, i^{R'})}^R = \sum_{i^L, j^L} \psi_{(i^L, j^L; j^R, i^R)}^* \psi_{(i^L, j^L; j^{R'}, i^{R'})} \end{cases} \quad (5.2.51)$$

3. Diagonaliser les deux matrices densité $\rho^{L/R}$. Les vecteurs propres associés aux m plus grandes valeurs propres sous-tendent l'espace de Hilbert réduit optimal des nouveaux blocs $|j^{L/R}\rangle$.
4. Écrire l'hamiltonien et tout autre opérateur nécessaire dans l'espace de Hilbert réduit en utilisant (5.2.49).
5. Insérer deux nouveaux sites entre les deux blocs formés et répéter l'algorithme autant de fois que désiré.

L'algorithme est représenté schématiquement sur la figure 5.2.6.

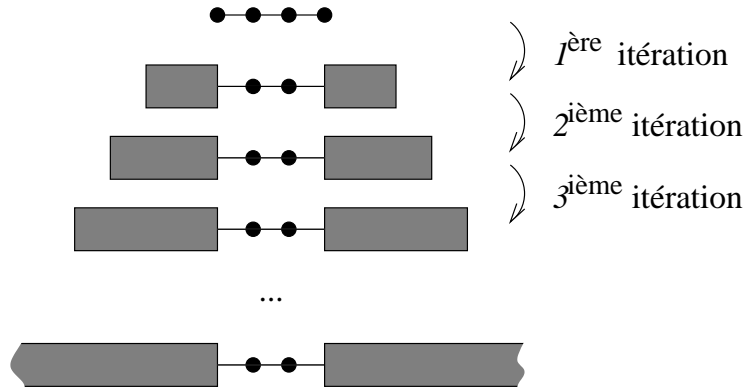


Figure 5.2.6 : Évolution schématique de l'état fondamental lors d'itérations successives de l'algorithme de taille infinie.

L'état fondamental n'est défini de manière précise que pour les deux sites au centre de la chaîne. De ce fait, la DMRG n'est véritablement efficace que pour des interactions à courtes portées, idéalement entre premiers voisins sur la chaîne. Pour la même raison, des conditions aux limites (anti-) périodiques imposent de conserver un nombre d'états m plus important lors de la 3^{ème} étape de l'algorithme. Il est parfois utile de conserver une bonne définition des premiers états excités, par exemple pour le calcul des fonctions de corrélation. Il suffit alors à chaque itération de moyenner les matrices densités $\rho_{L/R}$ construites avec les états souhaités.

La DMRG reposant sur un principe variationnel, on doit s'attendre à une déviation systématique de la densité d'énergie libre. L'**erreur de troncation** est définie comme

$$\epsilon = 1 - \sum_{i=1}^m \omega_i \quad (5.2.52)$$

où les $\{\omega_i\}_{i=1\dots m}$ sont les valeurs propres associées aux états excités de la matrice densité conservés pour la poursuite du calcul. Pour un système unidimensionnel avec des interactions à courtes portées, le temps de calcul est de l'ordre de $m^3.L$, c.à.d. croît linéairement avec la largeur L du système et à la troisième puissance du nombre m d'états conservés. L'erreur sur l'énergie du fondamental est de la forme $e^{-\Delta E.m}$ où ΔE est le gap d'énergie avec le premier état excité.

La matrice densité $\rho_{(j^L, i^L; j^{L'}, i^{L'})}^L$ (resp. $\rho_{(j^R, i^R; j^{R'}, i^{R'})}^R$) correspond à la fonction de partition d'un ruban présentant une coupure sur la moitié gauche (droite) de sa largeur avec des états fixés $|j^L, i^L\rangle$ et $|j^{L'}, i^{L'}\rangle$ ($|j^R, i^R\rangle$ et $|j^{R'}, i^{R'}\rangle$) de part et d'autre de la coupure. Un tel système peut être construit en appliquant quatre fois une matrice de transfert de coin ^[175]. Les spectres de la matrice densité et de la matrice de transfert de coin sont donc liés.

2.3.4. Algorithme de taille finie

L'algorithme de taille infinie ne donne accès de manière précise qu'aux observables n'impliquant que les deux sites au centre de la chaîne. Pour permettre la mesure en n'importe quel point de la chaîne, on stoppe l'expansion de la chaîne à une longueur

donnée puis on déplace la zone d'insertion des deux nouveaux sites le long de la chaîne en maintenant la longueur de cette dernière constante (figure 5.2.7).

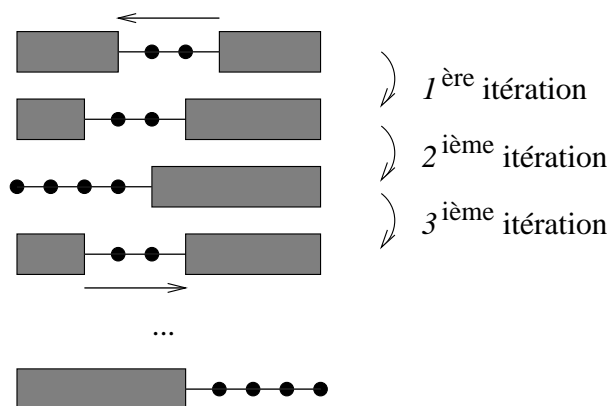


Figure 5.2.7 : Évolution schématique de l'état fondamental lors d'itérations successives de l'algorithme de taille finie après la phase initiale d'expansion.

Dans le cas d'un système désordonné, l'algorithme de taille infinie conduit à d'importantes déviations^[191]. En effet, la méthode itérative de construction de la chaîne impose de lier les deux sites au centre de la chaîne par une interaction effective, fonction des interactions restant à insérer, avant d'avoir atteint la taille voulue. Toutefois, le recours dans un deuxième temps à l'algorithme de taille finie permet de déterminer précisément l'état de chaque site dans son environnement final.

INDEX

Auto-dualité	18
Auto-moyennance faible	29
Auto-similarité	4
BST	37
Brisure de symétrie	3
Brisure spontanée de la symétrie des répliques	27
Champ d'échelle	12
Charge centrale	15
Chaîne de Markov	141
Classe d'universalité	4
Corrections d'échelle	6
Cross-over	12
Cumulant de Binder	9
Désordre canonique	73
Désordre gelé	20
Désordre recuit	20
Environnement (DMRG)	167
Erreur de troncation	170
Evénements rares	29
Evénements typiques	28
Exposant de Lyapunov	159
Exposant de divagation	46
Exposants critiques	4
Flot de renormalisation	11
Gap-exposant (relation)	15
Grandeur auto-moyennante	28
Groupe de renormalisation	10
Générateurs de nombres pseudo-aléatoires	50
Hypothèse d'homogénéité	5
Importance sampling	141
Lois d'échelle	6
Marginalisme	12
Matrice de substitution	45
Modèle de Potts	17
Modèles minimaux	19
Multi-spin coding	50

Index

Opérateurs d'échelle	12
Paramètre d'ordre	3
Pertinence	12
Phase de Griffiths	32
Point fixe	11
Ralentissement critique	144
Repondération de l'histogramme	144
Schwartz-Christoffel (transformation de)	16
Simple sampling	141
Symétrie des répliques	27
Temps d'auto-corrélation	143
Transformation conforme	14
Transition de phase	3

LISTE DES FIGURES

1.1.1	: Configurations typiques du modèle d'Ising.	3
1.1.2	: Configuration de spin du modèle d'Ising à différentes échelles de longueur.	4
1.2.1	: Mécanisme de changement d'échelle.	5
1.2.2	: Exposant effectif du modèle d'Ising en fonction de l'écart au point critique.	7
1.2.3	: Effets de taille finie de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Potts $q = 4$ tridimensionnel homogène et dilué.	8
1.2.4	: Exemple de transformation du groupe de renormalisation pour un modèle dont les degrés de liberté peuvent prendre deux états.	10
1.2.5	: Interactions susceptibles d'apparaître lors d'une itération du groupe de renormalisation.	11
1.2.6	: Exemple de cross-over.	13
1.2.7	: Transformation conforme projetant le plan complexe sur un cylindre.	15
1.2.8	: Projection conforme du demi-plan sur le carré.	16
1.3.1	: Dimension critique supérieure du modèle de Potts en fonction du nombre d'états q	19
1.4.1	: Disposition des atomes adsorbés dans les structures $p(2 \times 2)$ et $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$	21
1.4.2	: Intensité LEED diffusée et longueur de corrélation en fonction de la température réduite lors de la transition ordre-désordre de l'hydrogène adsorbé sur le nickel.	22
1.4.3	: Chaleur spécifique du cristal liquide 5CB en fonction de la température en volume et dans un aérogel.	24
1.4.4	: Courbes d'aimantation en fonction de la température pour un système désordonné présentant dans le cas pur une transition du premier ordre.	26
2.1.1	: Structure en couche d'un système de spins sur réseau.	31
2.2.1	: Exemples de profils d'aimantation pour quelques configurations de désordre.	35
2.2.2	: Comportement en loi de puissance de l'aimantation de volume avec la taille du système pour plusieurs valeurs de q et de r	36
2.2.3	: Approximants locaux $x_\sigma^b(L)$ en fonction de la largeur L du ruban pour le modèle de Potts $q = 3$ et $q = 2$	37

2.2.4 : Approximants locaux $x_\sigma^1(L)$ en fonction de la largeur L du ruban pour le modèle de Potts $q = 3$ et $q = 2$	38
2.2.5 : Profil d'aimantation à plusieurs valeurs de q et de r	39
2.2.6 : Interpolation des profils d'aimantation pour $q = 3$ et $r = 8$ et extrapolation dans la limite thermodynamique de la fonction d'échelle.	40
2.2.7 : Distribution de probabilité de l'aimantation de surface et de volume pour deux valeurs de q et r	41
2.2.8 : Approximants des exposants associés aux moments de l'aimantation de volume et de surface pour $q = 3$ et $r = 4$	42
2.2.9 : Fonctions de corrélation spin-spin dynamiques pour des rubans de diverses largeurs pour $q = 2$ et $q = 3$ avec $r = 4$	43
2.3.1 : Transformation de dualité d'un système dont la séquence aperiodique est anti-symétrique.	49
2.3.2 : Ligne critique et ligne physique correspondant à un désordre d'amplitude fixée $r = 2$.	50
2.3.3 : Aimantation locale sur la $i^{\text{ème}}$ colonne en fonction du couplage K_1 pour un système perturbé par la séquence Thue-Morse.	52
2.3.4 : Courbes d'aimantation et configurations typiques de spin pour la séquence périodique.	53
2.3.5 : Susceptibilité magnétique et cumulants de Binder en fonction du couplage K_1 pour la séquence périodique.	53
2.3.6 : Courbes d'aimantation et configurations typiques de spin pour la séquence Thue-Morse.	54
2.3.7 : Susceptibilité magnétique et cumulants de Binder en fonction du couplage K_1 pour la séquence Thue-Morse.	54
2.3.8 : Courbes d'aimantation et configurations typiques de spin pour la séquence Paper-Folding.	55
2.3.9 : Susceptibilité magnétique et cumulants de Binder en fonction du couplage K_1 pour la séquence Paper-Folding.	55
2.3.10 : Courbes d'aimantation et configurations typiques de spin pour la séquence Three-Folding.	56
2.3.11 : Susceptibilité magnétique et cumulants de Binder en fonction du couplage K_1 pour la séquence Three-Folding.	56
2.3.12 : Courbes d'aimantation et configurations typiques de spin pour la séquence Rudin-Shapiro.	57
2.3.13 : Susceptibilité magnétique et cumulants de Binder en fonction du couplage K_1 pour la séquence Rudin-Shapiro.	57
2.3.14 : Exposants effectifs associés à l'aimantation et à la susceptibilité magnétique en fonction du couplage K_1 pour les séquences Thue-Morse et Paper-Folding.	59

2.3.15	: Temps d'auto-corrélation de l'énergie en fonction de la taille du système.	60
2.3.16	: Aimantation totale et exposants effectifs pour les modèles d'Ising et de Potts $q = 8$ perturbés par la séquence Paper-Folding en fonction de la taille du système.	61
2.3.17	: Aimantation et susceptibilité magnétique en fonction de la taille pour les diverses séquences.	62
2.3.18	: Exposants effectifs $(\beta/\nu)^{\text{eff}}$ et $(\gamma/\nu)^{\text{eff}}$ en fonction de l'inverse de la taille minimale entrant dans l'interpolation.	63
2.3.19	: Aimantation au point critique en fonction de la taille du système pour la séquence Three-Folding.	63
3.1.1	: Diagrammes de phase pour un désordre modélisé par une distribution binaire de couplages d'échange et par une dilution de liaison.	68
3.2.1	: Configuration typique du modèle de Potts homogène à 8 états au voisinage de la température de transition.	74
3.2.2	: Configuration typique du modèle de Potts à 8 états désordonné au voisinage du point critique.	74
3.2.3	: Évolution de la barrière d'énergie libre avec l'inverse de la taille du système.	75
3.2.4	: Temps d'auto-corrélation intégré de l'énergie totale en fonction de la taille du système pour des conditions aux limites périodiques et libres.	76
3.2.5	: Comportement de la densité d'aimantation et de deux de ses moments en fonction de la taille du système.	77
3.2.6	: Exposants critiques effectifs associés aux moments $\overline{\langle m \rangle}$ et $\overline{\langle m^2 \rangle}$	78
3.2.7	: Comportement de la susceptibilité magnétique en fonction de la taille du système.	79
3.2.8	: Comportement de la susceptibilité magnétique en fonction du couplage d'échange K_1 pour diverses tailles et évolution avec la taille L du déplacement de la température de transition.	80
3.2.9	: Valeur maximale de la susceptibilité magnétique en fonction de la taille du système et l'exposant effectif associé.	80
3.2.10	: Dépendance de l'aimantation de surface et de ses moments avec la taille et exposants effectifs associés.	82
3.2.11	: Aimantation de volume et de surface en fonction de la température réduite pour plusieurs tailles et exposants effectifs associés.	83
3.2.12	: Manifestation du cross-over avec les points fixes pur et de type percolation sur l'aimantation moyenne du modèle de Potts $q = 8$ désordonné.	84
3.2.13	: Flot de renormalisation suivant la direction associée à l'amplitude du désordre.	84
3.3.1	: Évolution de la densité d'énergie libre moyenne en fonction de la longueur M dans le cas d'un désordre grand-canonique et canonique et convergence de la moyenne sur un nombre N de configurations de désordre.	86

3.3.2 : Différences de la densité d'énergie libre pour deux largeurs de ruban différentes en fonction du paramètre x pour plusieurs valeurs de l'amplitude du désordre r	87
3.3.3 : Charge centrale en fonction de l'amplitude du désordre pour des nombres d'états allant de 3 à 64.	88
3.3.4 : Dépendance de la charge centrale avec le nombre d'états q comparée aux prédictions dans les limites $q \rightarrow 2$ et $q \rightarrow +\infty$	89
3.3.5 : Fonctions de corrélation spin-spin moyennes en fonction du nombre N_G de configurations de désordre pour deux valeurs de u	90
3.3.6 : Distribution de probabilité de la fonction de corrélation spin-spin et développement en cumulants jusqu'à l'ordre quatre en fonction de u	91
3.3.7 : Exposants critiques x_σ^b en fonction de la largeur du ruban pour le modèle de Potts $q = 8$ et plusieurs amplitudes de désordre.	92
3.3.8 : Fonction de corrélation spin-spin moyenne entre un point à la surface et tous les autres points à l'intérieur du carré.	94
3.3.9 : Exemples de courbes $\omega = \text{cste}$	94
3.3.10 : Fonctions de corrélation spin-spin moyennes pour plusieurs valeurs de ω en fonction de la variable réduite $\kappa(\zeta)$	95
3.3.11 : Exemple de profil d'aimantation moyen obtenu pour le modèle de Potts $q = 8$	96
3.3.12 : Comportement linéaire du logarithme du profil de la densité d'aimantation sur un carré en bords fixes pour les modèles de Potts $q = 3, 8$ et 64	97
3.3.12 : Profils d'aimantation et d'énergie en fonction de la variable réduite $\kappa(\zeta)$ pour le modèle de Potts $q = 8$ à $r = 10$	98
3.3.13 : Exposant critique magnétique x_σ^b en fonction du nombre d'états q comparé au système pur.	99
3.2.11 : Profil d'aimantation dans le demi-plan et son image sur le ruban par la transformation conforme $w = \frac{L}{2\pi} \ln z$	100
3.3.14 : Profils d'aimantation pour le modèle de Potts $q = 8$ sur des rubans de largeur $L = 40$ et de longueurs M allant de 100 à 500.	101
3.3.15 : Exposants critiques x_σ^b et x_σ^1 calculés en combinant les données en $\ell, 1 - \ell$ et $1/2$ du profil d'aimantation du modèle de Potts $q = 4$ et $q = 8$	102
3.3.16 : Extrapolation dans la limite thermodynamique des exposants effectifs de surface calculés en $\ell = 1/4$	103
3.4.1 : Comparaison des exposants $x_\sigma^b(n)$ des moments de la fonction de corrélation spin-spin en fonction de l'ordre n à $q = 2.75$ avec des amplitudes de désordre $r^* = 4.70$ et $r = 4.36$	105
3.4.2 : Charge centrale du modèle de Potts désordonné en fonction de l'amplitude du désordre r pour plusieurs nombres d'états q et comparaison des exposants critiques estimés numériquement avec les prédictions analytiques.	106
3.4.3 : Charge centrale en fonction de l'amplitude du désordre pour la distribution quaternaire de couplages d'échange.	109

3.4.4 : Distribution de probabilité de couplage d'échange pour plusieurs amplitudes de désordre r et comportement de la charge centrale en fonction de l'amplitude de désordre r	110
3.4.5 : Écart quadratique réduit des fonctions de corrélation spin-spin en fonction de l'inverse du carré de la largeur du ruban et leur limite $L \rightarrow +\infty$	112
3.4.6 : Comparaison des exposants critiques $x_\sigma^b(n)$ obtenus numériquement et perturbativement.	113
3.4.7 : Exposants critiques $x_\sigma^b(n)$ associés aux moments de la fonction de corrélation spin-spin obtenus numériquement et perturbativement en fonction de l'ordre n pour les distributions binaire et continue.	115
3.4.8 : Exemple de détermination géométrique des exposants à partir de leur transformée de Legendre.	116
3.4.9 : Logarithme de la distribution de probabilité $\bar{\varphi}_u(\alpha)$ translatée de la constante $\ln \frac{2\pi u}{L}$	117
3.4.10 : Logarithme de la distribution de probabilité $\bar{\varphi}_u(\alpha)$ translatée de la constante $\frac{1}{2} \ln \frac{2\pi u}{L}$	118
3.4.11 : Fonctions de Legendre des exposants $X(n) = nx_\sigma^b(n)$ en fonction de α comparées aux résultats perturbatifs.	119
3.4.12 : Fonctions de Legendre calculées à partir de la distribution de probabilité des fonctions de corrélation spin-spin en fonction de α pour des distributions de désordre binaire et continue dans le cas $q = 3$	119
3.4.13 : Exposants critiques $x_\sigma^b(2)$ du moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin obtenus numériquement et comparés au système pur et aux résultats perturbatifs.	121
3.3.16 : Fonction d'échelle conforme des moments d'ordre zéro et deux du profil d'aimantation pour des rubans de différentes largeurs et dans la limite thermodynamique.	123
3.4.14 : Extrapolation des exposants de surface effectifs en fonction de l'inverse de la largeur du ruban.	124
4.2.1 : Dilution de liaison d'un système de spins sur réseau cubique.	127
4.2.2 : Évolution de la moyenne de la susceptibilité magnétique en fonction du nombre de configurations de désordre.	128
4.2.3 : Évolution de l'aimantation au cours de la simulation Monte Carlo pour trois configurations de désordre.	128
4.2.4 : Susceptibilité magnétique du modèle de Potts $q = 4$ dilué en fonction du couplage d'échange K	129
4.2.5 : Couplage de transition $K_c(L)$ en fonction de $1/L$ pour les concentrations $p = 0.36, 0.56$ et 0.96	130
4.2.6 : Température de transition T_c en fonction de la concentration p en couplage d'échange.	131

4.2.7 : Susceptibilité magnétique moyenne en fonction du couplage réduit $ K - K_c(L) $ pour les concentrations de couplages $p = 0.96$ et $p = 0.36$	132
4.2.8 : Temps d'auto-corrélation de l'énergie en fonction de la taille L du système pour les concentrations de couplages $p = 0.96$ et 0.36	132
4.3.1 : Susceptibilité magnétique en fonction du couplage d'échange K pour la concentration $p = 0.56$ et temps d'auto-corrélation de l'énergie en fonction de la taille L du système.	133
4.3.2 : Exposants effectifs γ/ν et β/ν estimés par interpolation en loi de puissance sur l'intervalle de tailles $[L_{\min}; 40]$	134
4.3.3 : Exposants effectifs γ/ν estimés par interpolation en loi de puissance de la susceptibilité magnétique et en utilisant la loi d'échelle $d - 2\beta/\nu$	134
4.4.1 : Exemples d'extrapolations par repondération de l'histogramme pour trois simulations à une taille $L = 40$	135
5.1.1 : Exemple de repondération de l'histogramme pour le modèle de Potts $q = 4$ sur un système cubique avec une concentration de liaison $p = 0.8$	145
5.1.2 : Trois configurations obtenues successivement avec l'algorithme de Metropolis au point critique du modèle d'Ising bidimensionnel.	149
5.1.3 : Trois configurations obtenues successivement avec l'algorithme de Wolff au point critique du modèle d'Ising bidimensionnel.	152
5.1.4 : Forme de la distribution de probabilité de l'énergie dans l'approximation des deux gaussiennes pour une transition du premier ordre conduite par la température.	155
5.2.1 : Exemple de graphe et la codification associée à la connectivité sur la dernière colonne.	161
5.2.2 : Décomposition de la matrice de transfert T en $3L$ matrices créant chacune une liaison.	163
5.2.3 : Exemple de connectivité incluant à la fois la connectivité avec un site fantôme et avec le site \mathbf{r}	165
5.2.4 : Exemple de calcul de la fonction de corrélation spin-spin.	166
5.2.5 : Construction itérative de la chaîne par insertion de deux sites et décomposition de l'état fondamental.	168
5.2.6 : Évolution schématique de l'état fondamental lors d'itérations successives de l'algorithme de taille infinie.	170
5.2.7 : Évolution schématique de l'état fondamental lors d'itérations successives de l'algorithme de taille finie après la phase initiale d'expansion.	171

LISTE DES TABLEAUX

1.1.1	: Comportement des grandeurs thermodynamiques au voisinage du point critique.	4
1.3.1	: Exposants critiques de volume et de surface du modèle de Potts homogène à q états en dimension $d = 2$.	20
1.4.1	: Comparaison des exposants critiques obtenus dans des multicouches magnétiques en présence d'un désordre de structure à ceux du modèle d'Ising bidimensionnel.	21
1.4.2	: Comparaison des exposants critiques de la transition ordre-désordre de l'hydrogène adsorbé sur nickel dans les cas pur et impur et du modèle d'Ising et de Potts à $q = 4$ états.	23
2.2.1	: Approximants de l'exposant critique magnétique x_{σ}^b pour diverses valeurs du nombre d'états q et de l'amplitude du désordre r .	36
2.2.2	: Approximants de l'exposant critique magnétique x_{σ}^1 de surface et extrapolation dans la limite thermodynamique obtenue pour diverses valeurs de q et r .	38
2.2.3	: Approximants de l'exposant x_{σ}^1 en fonction de la taille L pour diverses valeurs de q et r .	40
2.2.4	: Exposants critiques magnétiques de volume x_{σ}^b obtenus par l'analyse du comportement multifractal de la distribution de probabilité.	43
2.3.1	: Paramètres des simulations Monte Carlo utilisés pour l'étude des effets de taille finie au point critique.	60
2.3.2	: Exposants effectifs pour la séquence périodique.	64
2.3.3	: Exposants effectifs pour la séquence Thue-Morse.	64
2.3.4	: Exposants critiques pour la séquence Paper-Folding.	64
2.3.5	: Exposants critiques pour la séquence Three-Folding.	64
3.1.1	: Chronologie des exposants magnétiques du modèle de Potts à 8 états en présence d'un désordre de liaisons.	71
3.2.1	: Paramètres des simulations Monte Carlo utilisées pour le calcul des exposants critiques du modèle de Potts désordonné à 8 états.	73
3.3.1	: Maximum de la charge centrale et amplitude de désordre associée pour diverses valeurs du nombre d'états q .	88

3.3.2 : Exposants critiques magnétiques tirés de la décroissance exponentielle des fonctions de corrélation spin-spin sur ruban pour plusieurs valeurs du nombre d'états q du modèle de Potts.	92
3.3.3 : Exposants critiques magnétiques extraits du profil de la densité d'aimantation pour plusieurs valeurs du nombre d'états q .	97
3.3.4 : Estimations de l'exposant critique magnétique obtenu par diverses techniques pour le modèle de Potts $q = 8$ pour une amplitude de désordre $r^* = 10$.	99
3.3.5 : Nombre de configurations utilisées en fonction de la largeur L et de la longueur M du ruban.	101
3.3.6 : Exposants magnétiques de surface en fonction du nombre d'états du modèle de Potts q et calculés d'une part par l'étude de la dépendance de l'aimantation de surface avec la température et d'autre part en interpolant les profils d'aimantation sur ruban avec l'expression conforme.	103
3.4.1 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b donnés par le développement perturbatif et obtenus numériquement à l'amplitude de désordre r^* .	106
3.4.2 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b obtenus pour la distribution ternaire à ceux du système pur et pour une distribution binaire.	108
3.4.3 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b obtenus pour la distribution quaternaire aux deux extremums de la charge centrale à ceux du système pur et pour une distribution binaire.	109
3.4.4 : Comparaison des exposants magnétiques x_σ^b obtenus pour la distribution continue à ceux du système pur et avec d'autres distributions.	111
3.4.5 : Comparaison des exposants critiques $x_\sigma^b(2)$ pour le moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin du modèle de Potts $q = 3$ disponibles dans la littérature.	120
3.4.6 : Exposants critiques $x_\sigma^b(2)$ associés à la décroissance du moment d'ordre deux de la fonction de corrélation spin-spin obtenus numériquement et perturbativement avec et sans brisure spontanée de la symétrie des répliques.	122
3.4.7 : Exposants multifractals $x_\sigma^1(n)$ en divers endroits du ruban.	124
5.2.1 : Nombre de connectivités pour un ruban de largeur L avec et sans spin fantôme et dans la représentation utilisée pour le calcul des corrélations spin-spin.	162

BIBLIOGRAPHIE

- [1] F.D.A. Aarão Reis, S.L.A. de Queiroz et R. dos Santos (1996), *Phys. Rev. B* **54**, R9616.
- [2] F.D.A. Aarão Reis, S.L.A. de Queiroz et R.R. dos Santos (1997), *Phys. Rev. B* **56**, 6013.
- [3] M. Abramowitz et I.A. Stegun (1970) *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover, New-York).
- [4] A. Aharony, A.B. Harris et S. Wiseman (1998), *Phys. Rev. Lett.* **81**, 252.
- [5] M. Aizenman et J. Wehr (1989), *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503.
- [6] D. Andelman et A.N. Berker (1984), *Phys. Rev. B* **29**, 2630.
- [7] V.B. Andreichenko, V.I.S. Dotsenko, W. Selke et J.S. Wang (1990), *Nucl. Phys. B* **344**, 531.
- [8] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández. A. Muñoz, G. Parisi et J.J. Ruiz-Lorenzo (1997), *J. Phys. A* **30**, 8379.
- [9] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández. A. Muñoz, G. Parisi et J.J. Ruiz-Lorenzo (1999) *cond-mat/9906195* preprint.
- [10] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández. V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi et J.J. Ruiz-Lorenzo (1998), *Phys. Rev. B* **58**, 2740.
- [11] R.J. Baxter (1982) *Exactly solved models of statistical mechanics*, (Academic Press, Londres).
- [12] R.J. Baxter (1982), *J. Phys. A* **15**, 3329.
- [13] T. Bellini, N.A. Clark, C.D. Muzny, L. Wu, C.W. Garland, D.W. Schaefer et B.J. Oliver (1992), *Phys. Rev. Lett.* **69**, 788.
- [14] P.E. Berche (1996) *Contribution à l'étude des phénomènes critiques dans les systèmes apériodiques : séquences marginales de volume*, Thèse (Université H. Poincaré - Nancy I).
- [15] B. Berche et C. Chatelain (1999), *Comp. Phys. Comm.* **121-122**, 191.
- [16] P.E. Berche, C. Chatelain et B. Berche (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 297.
- [17] B. Berg et T. Çelik (1992), *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2992.
- [18] B. Berg et T. Neuhaus (1990), *Phys. Rev. Lett.* **68**, 9.
- [19] C. Bichara, J-P. Gaspard et J-C. Mathieu (1987), *Phys. Lett. A* **119**, 462.
- [20] A. Billoire, R. Lacaze et A. Morel (1992), *Nucl. Phys. B* **370**, 773.
- [21] K. Binder (1981), *Z. Phys. B* **43**, 119.

- [22] K. Binder (1997), *Rep. Prog. Phys.* **60**, 487.
- [23] H.W.J. Blöte et M.P. Nightingale (1982), *Physica A* **112**, 405.
- [24] H.W.J. Blöte, M.P. Nightingale et J.L. Cardy (1986), *Phys. Rev. Lett.* **56**, 742.
- [25] C. Borgs et J.T. Chayes (1996), *J. Stat. Phys.* **82**, 1235.
- [26] C. Borgs et J. Imbrie (1989), *Commun. Math. Phys.* **123**, 305.
- [27] C. Borgs et R. Kotecký (1990), *J. Stat. Phys.* **61**, 79.
- [28] E. Brézin, J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin (1976) In *Phase Transitions and Critical Phenomena vol. 6*, éd. C. Domb et M.S. Green (Academic Press, Londres).
- [29] R. Brout (1959), *Phys. Rev.* **115**, 824.
- [30] E. Buffenoir et S. Wallon (1993), *J. Phys. A* **26**, 3045.
- [31] J.E. Bunder et R.H. McKenzie (1999), *Phys. Rev. B* **60**, 344.
- [32] T.W. Burkhardt et T. Xue (1991), *Phys. Rev. Lett.* **66**, 895.
- [33] J.L. Cardy (1984), *J. Phys. A* **17**, L385.
- [34] J.L. Cardy (1987) In *Phase Transitions and Critical Phenomena vol. 11*, éd. C. Domb et J.L. Lebowitz (Academic Press, Londres).
- [35] J.L. Cardy (1996) *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, (Cambridge University Press, Cambridge).
- [36] J.L. Cardy (1996), *J. Phys. A* **29**, 1897.
- [37] J.L. Cardy (1999), *Physica A* **263**, 215.
- [38] J.L. Cardy et J.L. Jacobsen (1997), *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4063.
- [39] J.L. Cardy et I. Peschel (1988), *Nucl. Phys. B* **300**, 377.
- [40] E. Carlon, C. Chatelain et B. Berche (1999), *Phys. Rev. B* **60**, 12974.
- [41] M.S.S. Challa, D.P. Landau et K. Binder (1986), *Phys. Rev. B* **34**, 1841.
- [42] C. Chatelain et B. Berche (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1670.
- [43] C. Chatelain et B. Berche (1998), *Phys. Rev. E* **58**, R6899.
- [44] C. Chatelain et B. Berche (1999), *Phys. Rev. E* **60**, 3853.
- [45] C. Chatelain et B. Berche (2000), *Nucl. Phys. B* **572**, 626.
- [46] C. Chatelain, P.E. Berche et B. Berche (1999), *Comp. Phys. Comm.* **121-122**, 197.
- [47] C. Chatelain, P.E. Berche et B. Berche (1999), *Eur. Phys. J. B* **7**, 439.
- [48] J.T. Chayes, L. Chayes, D.S. Fisher et T. Spencer (1986), *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2999.
- [49] S. Chen, A.M. Ferrenberg et D.P. Landau (1992), *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1213.
- [50] S. Chen, A.M. Ferrenberg et D.P. Landau (1995), *Phys. Rev. E* **52**, 1377.
- [51] S. Chen et D.P. Landau (1997), *Phys. Rev. E* **55**, 40.
- [52] W.Y. Ching et D.L. Huber (1976), *Phys. Rev. B* **13**, 2962.
- [53] D. Chowdhury et D. Stauffer (1986), *J. Stat. Phys.* **44**, 211.
- [54] M. Creutz, L. Jacobs et C. Rebbi (1981), *Comp. Phys. Comm.* **23**, 337.

- [55] A. Crisanti, S. Nicolis, G. Paladin et A. Vulpiani (1990), *J. Phys. A* **23**, 3083.
- [56] C. Dasgupta et S.K. Ma (1980), *Phys. Rev. B* **22**, 1305.
- [57] N.G. De Bruijn (1981) *Asymptotic methods in analysis*, (Dover, New-York).
- [58] M. Dekking, M. Mendès-France, A. Van der Poorten (1983), *Math. Intelligencer* **4**, 130.
- [59] G. Delfino et J. Cardy (2000) *hep-th/0002122* preprint.
- [60] B. Derrida et E. Gardner (1984), *J. Phys. A* **17**, 3223.
- [61] B. Derrida et H. Hilhorst (1981), *J. Phys. C* **14**, L539.
- [62] V.S. Dotsenko (1985), *J. Phys. A* **18**, L241.
- [63] V.S. Dotsenko et V.I.S. Dotsenko (1981), *JETP Lett.* **33**, 37.
- [64] V.S. Dotsenko et V.I.S. Dotsenko (1982), *J. Phys. C* **15**, 495.
- [65] V.S. Dotsenko et V.I.S. Dotsenko (1982), *Sov. Phys. JETP* **56**, 406.
- [66] V.S. Dotsenko et V.I.S. Dotsenko (1983), *Adv. Phys.* **32**, 129.
- [67] V.S. Dotsenko et V.I.S. Dotsenko (1984), *J. Phys. A* **17**, L301.
- [68] V.S. Dotsenko, V.I.S. Dotsenko et M. Picco (1998), *Nucl. Phys. B* **520**, 633.
- [69] V.S. Dotsenko, V.I.S. Dotsenko, M. Picco et P. Pujol (1995), *Eur. Phys. Lett.* **32**, 425.
- [70] V.I.S. Dotsenko et V.A. Fateev (1984), *Nucl. Phys. B* **240**, 312.
- [71] V.S. Dotsenko, A.B. Harris, D. Sherrington et R.B. Stinchcombe (1995), *J. Phys. A* **28**, 3093.
- [72] V.I.S. Dotsenko, M. Picco et P. Pujol (1995), *Phys. Lett. B* **347**, 113.
- [73] V.I.S. Dotsenko, M. Picco et P. Pujol (1995), *Nucl. Phys. B* **455**, 701.
- [74] V.I.S. Dotsenko, M. Picco et P. Pujol (1995) In *Proceedings of the Trieste Conference on Recent Developments in Statistical Mechanics and Quantum Field Theory*, April 1995.
- [75] V.J. Emery (1975), *Phys. Rev. B* **11**, 239.
- [76] A.M. Ferrenberg, D.P. Landau et R.H. Swendsen (1995), *Phys. Rev. E* **51**, 5092.
- [77] A.M. Ferrenberg, D.P. Landau et Y.J. Wong (1992), *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3382.
- [78] A.M. Ferrenberg et R.H. Swendsen (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635.
- [79] M.E. Fisher (1968), *Phys. Rev.* **176**, 257.
- [80] M.E. Fisher (1974), *Rev. Mod. Phys.* **46**, 597.
- [81] D.S. Fisher (1992), *Phys. Rev. Lett.* **69**, 534.
- [82] D.S. Fisher (1995), *Phys. Rev. B* **51**, 6411.
- [83] M.E. Fisher (1998), *Rev. Mod. Phys.* **70**, 653.
- [84] M.E. Fisher et A.N. Berker (1982), *Phys. Rev. B* **26**, 2507.
- [85] M.E. Fisher et P.G. de Gennes (1978), *C.R. Acad. Sci. Paris B* **287**, 207.
- [86] R. Folk, Y. Holovatch et T. Yavors'kii (1999) *cond-mat/9909121* preprint.
- [87] C.M. Fortuin et P.W. Kasteleyn (1972), *Physica* **57**, 536.

- [88] D. Friedan, Z. Qiu et S. Shenker (1984), *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1575.
- [89] H. Furstenberg (1963), *Trans. Am. Math. Soc.* **108**, 377.
- [90] U. Glaus (1987), *J. Phys. A* **20**, L595.
- [91] R.B. Griffiths (1969), *Phys. Rev. Lett.* **23**, 17.
- [92] G. Grinstein (1974), *AIP Conf. Proc.* **24**, 313.
- [93] G. Grinstein et A. Luther (1976), *Phys. Rev. B* **13**, 1329.
- [94] A.B. Harris (1974), *J. Phys. C* **7**, 1671.
- [95] A.B. Harris et T.C. Lubensky (1974), *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1540.
- [96] D.W. Heermann et A.N. Burkitt (1990), *Physica A* **162**, 210.
- [97] M. Henkel (1998) *Conformal Invariance and Critical Phenomena*, (Springer, Heidelberg).
- [98] M. Henkel et D. Karevski (1998), *J. Phys. A* **31**, 2503.
- [99] M. Henkel et G. Schütz (1988), *J. Phys. A* **21**, 2617.
- [100] H-O. Heuer (1990), *Phys. Rev. B* **42**, 6476.
- [101] K. Hui et A.N. Berker (1989), *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2507.
- [102] G.S. Iannocchione, G.P. Crawford, S. Žumer, J.W. Doane et D. Finotello (1993), *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2595.
- [103] F. Iglói (1993), *J. Phys. A* **26**, L703.
- [104] F. Iglói, P. Lajkó, W. Selke et F. Szalma (1998), *J. Phys. A* **31**, 2801.
- [105] F. Iglói et H. Rieger (1997), *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2473.
- [106] F. Iglói et H. Rieger (1998), *Phys. Rev. B* **57**, 11404.
- [107] F. Iglói et L. Turban (1994), *Eur. Phys. Lett.* **27**, 91.
- [108] F. Iglói, L. Turban, D. Karevski et F. Szalma (1997), *Phys. Rev. B* **56**, 11031.
- [109] Y. Imry et M. Wortis (1979), *Phys. Rev. B* **19**, 3581.
- [110] J.L. Jacobsen (1999) *cond-mat/9912304* preprint.
- [111] J.L. Jacobsen (1999) *cond-mat/9910181* preprint.
- [112] J.L. Jacobsen et J.L. Cardy (1998), *Nucl. Phys. B* **515**, 701.
- [113] J.L. Jacobsen et M. Picco (1999) *cond-mat/9910071* preprint.
- [114] F. James (1990), *Comp. Phys. Comm* **60**, 329.
- [115] F. James (1994), *Comp. Phys. Comm.* **79**, 111.
- [116] W. Janke (1993), *Phys. Rev. B* **47**, 14757.
- [117] W. Janke et D.A. Johnston (1999) *hep-lat/9907026* preprint.
- [118] W. Janke et S. Kappler (1995), *Phys. Rev. Lett.* **74**, 212.
- [119] W. Janke et R. Villanova (1995), *Phys. Lett. A* **209**, 179.
- [120] W. Janke et R. Villanova (1996), *Nucl. Phys. B* **47**, 641.
- [121] C. Jayaprakash et H.J. Katz (1977), *Phys. Rev. B* **16**, 3987.
- [122] C. Jayaprakash, E.K. Riedel et M. Wortis (1978), *Phys. Rev. B* **18**, 2244.
- [123] A. Juozapavičius, S. Caprara et A. Rosengren (1997), *Phys. Rev. B* **56**, 11097.

- [124] A. Juozapavičius, L. Urba, S. Caprara et A. Rosengren (1998), *Phys. Rev. B* **60**, 14771.
- [125] D. Kandel et E. Domany (1991), *Phys. Rev. B* **43**, 8539.
- [126] M. Kardar, A. Stella, G. Sartoni et B. Derrida (1995), *Phys. Rev. E* **52**, R1269.
- [127] D. Karevski (1996) *Comportement critique local associé à des perturbations aperiodiques du modèle d'Ising à deux dimensions*, Thèse (Université H. Poincaré - Nancy I).
- [128] D.E. Khmel'nitsky (1975), *Zh. Eksp. Teor. Fis.* **68**, 1960.
- [129] J.K. Kim (1996), *Phys. Rev. B* **53**, 3388.
- [130] J.K. Kim et A. Patrascioiu (1994), *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2785.
- [131] J.K. Kim et A. Patrascioiu (1994), *Phys. Rev. B* **49**, 15764.
- [132] W. Kinzel et E. Domany (1981), *Phys. Rev. B* **23**, 3421.
- [133] J. Kogut (1979), *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659.
- [134] H.A. Kramers et G.H. Wannier (1941), *Phys. Rev.* **60**, 252.
- [135] D.P. Landau (1980), *Phys. Rev. B* **22**, 2450.
- [136] P. Le Doussal et T. Giamarchi (1995), *Phys. Rev. Lett.* **74**, 606.
- [137] D. Ledue, D.P. Landau et J. Teillet (1997) In *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics*, vol. 10, éd. K.K. Mon et H.B. Schüttler (Springer, Heidelberg).
- [138] J. Lee et J.M. Kosterlitz (1990), *Phys. Rev. Lett.* **65**, 137.
- [139] J. Lee et J.M. Kosterlitz (1991), *Phys. Rev. B* **43**, 3265.
- [140] M.A. Lewis (1998), *Eur. Phys. Lett.* **43**, 189.
- [141] M.A. Lewis (1999), *Eur. Phys. Lett.* **47**, 129.
- [142] M.A. Lewis (1999) *cond-mat/9905401* preprint.
- [143] T.C. Lubensky (1975), *Phys. Rev. B* **11**, 3573.
- [144] J.M. Luck (1993), *J. Stat. Phys.* **72**, 417.
- [145] J.M. Luck (1993), *Eur. Phys. Lett.* **5**, 359.
- [146] A.W.W. Ludwig (1987), *Nucl. Phys. B* **285**, 97.
- [147] A.W.W. Ludwig (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2388.
- [148] A.W.W. Ludwig (1990), *Nucl. Phys. B* **330**, 639.
- [149] A.W.W. Ludwig et J.L. Cardy (1987), *Nucl. Phys. B* **285**, 687.
- [150] M. Lüscher (1994), *Comp. Phys. Comm.* **79**, 100.
- [151] S.K. Ma (1973), *Rev. Mod. Phys.* **45**, 589.
- [152] J. Marro, A. Labarta et J. Tejada (1986), *Phys. Rev. B* **34**, 347.
- [153] G. Marsaglia et A. Zaman (1990), *Stat. Prob. Lett.* **8**, 35.
- [154] P.P. Martin (1986), *J. Phys. A* **19**, L1117.
- [155] D. Matthews-Morgan et D.P. Landau (1984), *Phys. Rev. Lett.* **53**, 679.
- [156] I.O. Mayer (1989), *J. Phys. A* **22**, 2815.

- [157] G. Mazzeo et R. Kühn (1999), *Phys. Rev. E* **60**, 3823.
- [158] B.M. McCoy (1969), *Phys. Rev.* **188**, 1014.
- [159] B.M. McCoy (1970), *Phys. Rev. B* **2**, 2795.
- [160] B.M. McCoy et T.T. Wu (1968), *Phys. Rev.* **176**, 631.
- [161] B.M. McCoy et T.T. Wu (1969), *Phys. Rev.* **188**, 982.
- [162] R.H. McKenzie (1996), *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4804.
- [163] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, N. Rosenbluth et A.H. Teller (1953), *J. Chem. Phys.* **21**, 1087.
- [164] H. Meyer-Ortmanns et T. Reisz (1998), *J. Math. Phys.* **39**, 5316.
- [165] M. Mézard, G. Parisi et M.A. Virasoro (1987) *Spin Glass Theory and Beyond*, (World Scientific, Singapour).
- [166] J.D. Miller et K. De'Bell (1993), *J. Phys. I* **3**, 1717.
- [167] C.V. Mohan, H. Kronmüller et M. Kelsch (1998), *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2701.
- [168] H. Müller-Krumbhaar et K. Binder (1973), *J. Stat. Phys.* **8**, 1.
- [169] M.E.J. Newman et R.G. Palmer (1999), *J. Stat. Phys.* **97**, 1011.
- [170] Th. Niemeijer, J.M. Van Leeuwen (1976) In *Phase Transitions and Critical Phenomena vol. 6*, éd. C. Domb et M.S. Green (Academic Press, Londres).
- [171] B. Nienhuis (1981), *J. Stat. Phys.* **34**, 781.
- [172] B. Nienhuis, A.N. Berker, E.K. Riedel et M. Schick (1979), *Phys. Rev. Lett.* **43**, 737.
- [173] F. Nierdermayer (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2026.
- [174] M.P. Nightingale et H.W.J. Blöte (1996), *Phys. Rev. Lett.* **24**, 4548.
- [175] T. Nishino et K. Okunishi (1996) In *Strongly Correlated Magnetic and Superconducting Systems*, Proceedings de l'École d'été El Escorial.
- [176] T. Olson et A.P. Young (1999), *Phys. Rev. B* **60**, 3428.
- [177] L. Onsager (1944), *Phys. Rev.* **65**, 117.
- [178] V.I. Oseledec (1968), *Trans. Math. Mosc. Soc.* **19**, 197.
- [179] G. Palágyi, C. Chatelain, B. Berche et F. Igloi (2000), *Eur. Phys. J. B* **13**, 357.
- [180] R. Parades et J. Valbuena (1999), *Phys. Rev. E* **59**, 6275.
- [181] G. Parisi (1980), *J. Stat. Phys.* **23**, 49.
- [182] F. Pázmándi, R.T. Scalettar et G.T. Zimányi (1997), *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5130.
- [183] A. Pelissetto et E. Vicari (2000) *cond-mat/0002402* preprint.
- [184] M. Picco (1995), *Phys. Rev. B* **54**, 14930.
- [185] M. Picco (1997), *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2998.
- [186] M. Picco (1998) *cond-mat/9802092* preprint.
- [187] V.N. Plechko (1998), *Phys. Lett. A* **239**, 289.
- [188] A.M. Polyakov (1970), *Sov. Phys. JETP. Lett.* **12**, 381.
- [189] R.B. Potts (1952), *Proc. Camb. Phil. Soc* **48**, 106.

- [190] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling et B.P. Flannery (1992) *Numerical Recipes in C/Fortran*, (Cambridge University Press, Cambridge).
- [191] N.V. Prokof'ev et B.V. Svistunov (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4355.
- [192] M. Queffélec (1987) *Substitution Dynamical Systems - Spectral Analysis*, Lectures Notes in Mathematics **1294**, éd. A. Dold et B. Eckmann (Springer, Heidelberg).
- [193] S.L.A. de Queiroz (1995), *Phys. Rev. E* **51**, 1030.
- [194] S.L.A. de Queiroz et R.B. Stinchcombe (1992), *Phys. Rev. B* **46**, R6635.
- [195] S.L.A. de Queiroz et R.B. Stinchcombe (1994), *Phys. Rev. B* **50**, 9976.
- [196] D.C. Rapaport (1972), *J. Phys. C* **5**, 1830.
- [197] H. Rieger et F. Iglói (1997), *Eur. Phys. Lett.* **39**, 135.
- [198] A. Roder, J. Adler et W. Janke (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4697.
- [199] A. Roder, J. Adler et W. Janke (1999), *Physica A* **265**, 28.
- [200] E.S. Sørensen, M.V. Jaric et M. Ronchetti (1991), *Phys. Rev. B* **44**, 9271.
- [201] D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias et J.W. Cahn (1984), *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951.
- [202] T.D. Schultz, D.C. Mattis et E.H. Lieb (1964), *Rev. Mod. Phys.* **36**, 856.
- [203] L. Schwenger, K. Buddle, C. Voges et H. Pfnür (1994), *Phys. Rev. Lett.* **73**, 296.
- [204] W. Selke, L.N. Shchur, A.L. Talapov (1994) *Annual Reviews of Computational Physics*, Vol. 1, p. 17, éd. D. Stauffer (World Scientific, Singapour).
- [205] W. Selke, F. Szalma, P. Lajkó et F. Iglói (1997), *J. Stat. Phys.* **89**, 1079.
- [206] T. Senthil et S.N. Majumdar (1996), *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3001.
- [207] B.N. Shalaev (1984), *Sov. Phys. Solid State* **26**, 1811.
- [208] B.N. Shalaev (1994), *Phys. Rep.* **237**, 129.
- [209] B.N. Shalaev, S.A. Antonenko et A.I. Sokolov (1998), *Phys. Lett. A* **230**, 105.
- [210] R. Shankar (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2390.
- [211] R. Shankar et G. Murthy (1987), *Phys. Rev. B* **36**, 536.
- [212] L.N. Shchur et P. Butera (1998), *Int. J. Mod. Phys. C* **9**, 607.
- [213] A.D. Sokal (1989) *Monte Carlo Methods In Statistical Mechanics : Foundations and New Algorithms*, Troisième cycle de la physique en Suisse Romande.
- [214] E. Stoll, K. Binder et T. Schneider (1973), *Phys. Rev. B* **8**, 3266.
- [215] E. Stoll et T. Schneider (1976), *J. Phys. A* **9**, L67.
- [216] M. Suzuki (1974), *Prog. Theor. Phys.* **51**, 1992.
- [217] R.H. Swendsen et J.S. Wang (1987), *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86.
- [218] A.L. Talapov et L.N. Shchur (1994), *J. Phys. C* **6**, 8295.
- [219] K. Uzelac, A. Hasmy et R. Jullien (1995), *Phys. Rev. Lett.* **74**, 422.

- [220] I. Vattulainen (1994) *New Tests of Random Numbers for Simulation in Physical Systems*, Thèse (Université d'Helsinki, Finlande).
- [221] C. Voges et H. Pfnür (1998), *Phys. Rev. B* **57**, 3345.
- [222] K. Vollmayr, J.D. Reger, M. Scheucher et K. Binder (1993), *Z. Phys. B* **91**, 113.
- [223] J.S. Wang (1989), *Physica A* **161**, 249.
- [224] J.S. Wang, W. Selke, V.I.S. Dotsenko et V.B. Andreichenko (1990), *Eur. Phys. Lett.* **11**, 301.
- [225] J.S. Wang, W. Selke, V.I.S. Dotsenko et V.B. Andreichenko (1990), *Physica A* **164**, 221.
- [226] S.R. White (1992), *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863.
- [227] S.R. White (1993), *Phys. Rev. B* **48**, 10345.
- [228] K.G. Wilson (1983), *Rev. Mod. Phys.* **55**, 583.
- [229] S. Wiseman et E. Domany (1995), *Phys. Rev. E* **52**, 3469.
- [230] S. Wiseman et E. Domany (1995), *Phys. Rev. E* **51**, 3074.
- [231] U. Wolff (1989), *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361.
- [232] X. Wu, W.I. Goldberg, M.X. Liu et J.Z. Xue (1992), *Phys. Rev. Lett.* **69**, 470.
- [233] F. Yaşar, Y. Gündüç et T. Çelik (1998), *Phys. Rev. E* **58**, 4210.
- [234] J.M. Yeomans et R.B. Stinchcombe (1979), *J. Phys. C* **12**, 347.
- [235] H.P. Ying et K. Harada (2000) *cond-mat/0001284* preprint.
- [236] A.P. Young et H. Rieger (1996), *Phys. Rev. B* **53**, 8486.
- [237] A.B. Zamolodchikov (1986), *JETP Lett.* **43**, 730.
- [238] A.B. Zamolodchikov (1989), *Int. J. Math. Phys. A* **4**, 4235.
- [239] D. Zobin (1978), *Phys. Rev. B* **18**, 2387.

Christophe Chatelain
Laboratoire de Physique des Matériaux
Faculté des Sciences
Tél : 03.83.91.23.49
e-mail : chatelain@lpm.u-nancy.fr

ÉTUDE DE L'INFLUENCE DU DÉSORDRE SUR LES PROPRIÉTÉS CRITIQUES DU MODÈLE DE POTTS

RÉSUMÉ

Nous présentons une étude numérique des propriétés critiques du modèle de Potts bidimensionnel à q états perturbé par un désordre couplé à la densité d'énergie. Le

système pur donne lieu à une transition du premier ordre lorsque $q > 4$ alors qu'elle est continue dans le cas contraire. Nous montrons que sous l'effet d'un désordre corrélé dans une direction de l'espace, le régime du premier ordre disparaît, laissant place à une transition continue dont la classe d'universalité est la même pour toute valeur finie de q . Nous étendons l'étude à diverses modulations aperiodiques des couplages d'échange permettant le contrôle de la divergence des fluctuations géométriques. La perturbation adoucit la transition du modèle de Potts $q = 8$ et, pour certaines séquences aperiodiques, la transition devient continue.

Dans un second temps, nous nous intéressons au cas du désordre homogène. Nous confirmons l'hypothèse d'une transition continue pour toute valeur de q et montrons que le comportement critique est décrit par un point fixe désordonné dépendant du nombre d'états q . Nous observons la compatibilité de nos estimations numériques avec les expressions des profils et des fonctions de corrélation prédites par l'invariance conforme. Nous mettons à profit cette observation pour donner des estimations précises des exposants critiques associés aux quantités moyennes et à leurs moments. Les résultats sont indépendants de la distribution de désordre et sont compatibles avec les développements perturbatifs au voisinage de $q = 2$. Ils excluent notamment la possibilité d'une brisure spontanée de la symétrie des répliques.

Enfin, nous présentons des résultats préliminaires concernant le modèle de Potts $q = 4$ dilué en dimension $d = 3$. Le système pur donne lieu à une transition du premier ordre fortement marquée. A fortes dilutions, nous présentons quelques arguments en faveur de l'existence d'un régime de second ordre et donc d'un point tricritique.

MOTS-CLÉS

Phénomènes critiques, invariance conforme, modèle de Potts, désordre, simulations Monte Carlo, matrices de transfert.