



HAL
open science

Dynamique vitreuse : de l'espace de phases à l'espace réel

Eric Bertin

► **To cite this version:**

Eric Bertin. Dynamique vitreuse : de l'espace de phases à l'espace réel. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2003. Français. NNT : . tel-00118607

HAL Id: tel-00118607

<https://theses.hal.science/tel-00118607>

Submitted on 5 Dec 2006

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.

THÈSE

pour l'obtention du Diplôme de

Docteur de l'université Paris 7 – Denis Diderot

Spécialité : Physique Théorique

par

Eric BERTIN

présentée et soutenue publiquement le 29 septembre 2003

Dynamique vitreuse : de l'espace des phases à l'espace réel

Composition du jury

<i>Présidente :</i>	N. POTTIER
<i>Directeur :</i>	M. MÉZARD
<i>Responsable CEA :</i>	J.-P. BOUCHAUD
<i>Rapporteurs :</i>	F. LEQUEUX P. SOLLICH
<i>Examineur :</i>	G. TARJUS
<i>Invitée :</i>	L. CUGLIANDOLO

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

Tu as prouvé que la thèse est agréable, mais n'oublie pas de remercier ceux qui t'ont permis d'aller au but.

Anonyme

Le présent mémoire de thèse est le fruit d'un travail de recherche effectué entre octobre 2000 et septembre 2003 au Service de Physique de l'Etat Condensé (SPEC) du CEA à Saclay, au sein du Groupe Théorie. Je remercie les chefs de service successifs, Jacques Michel Hammann et Eric Vincent, ainsi que Robert Conte, le chef du groupe théorie, de m'avoir chaleureusement accueilli dans leur équipe.

Pendant ces trois années, j'ai eu la chance de bénéficier de l'encadrement attentif et bienveillant de Jean-Philippe Bouchaud, qui a su à la fois me guider efficacement dans mon travail de recherche, et me laisser profiter d'une certaine autonomie qui m'a permis de suivre parallèlement mes propres pistes de réflexion. Le subtil équilibre qu'il est parvenu à maintenir est pour beaucoup dans le plaisir que j'ai eu à effectuer cette thèse, et je le remercie très sincèrement pour tout ce qu'il a pu m'apporter, tant sur le plan personnel que professionnel. Je tiens également à remercier Marc Mézard, qui a assumé la responsabilité de directeur de thèse, et qui a toujours su être disponible et à l'écoute.

François Lequeux et Peter Sollich ont accepté avec beaucoup de gentillesse la lourde charge de rapporteurs, qu'ils trouvent ici l'expression de ma sincère reconnaissance. Enfin, ma sympathie va également à Noelle Pottier, Gilles Tarjus et Leticia Cugliandolo qui m'ont fait l'honneur et le plaisir de participer à mon jury de thèse.

Le SPEC s'est révélé être un lieu d'échange très actif, tant sur le plan scientifique qu'au niveau de l'ambiance générale. Ces échanges fréquents m'ont ainsi conduit à diverses collaborations, notamment avec Pierre Bonville, Olivier Dautchot, Jean-Michel Drouffe, Claude Godrèche et James Hodges. Les longues et fréquentes discussions scientifiques avec Olivier sont aussi pour beaucoup dans le plaisir que j'ai eu à venir travailler au SPEC. J'ai pu bénéficier également de nombreux échanges avec d'autres chercheurs, notamment Giulio Biroli, Hugues Chaté, Bérengère Dubrulle, François Daviaud, Olivier Martin, Eric Vincent, et plus récemment François Ladieu, dont j'ai pu apprécier en particulier le goût pour la réflexion scientifique et philosophique.

Enfin, l'ambiance au sein du groupe théorie du SPEC ne serait pas vraiment ce qu'elle est sans les fameuses "bouffes" chez Marc Dubois, un rendez-vous incontournable pour les étudiants en thèse du groupe, chacun se faisant un plaisir de répondre à l'appel. J'ai pu à cette occasion apprécier les qualités de cuisinier de Marc, et découvrir quelques bons vins (il faut dire que le petit salé donne envie de Pinot). Merci également à tous ceux qui contribuent au quotidien à créer une ambiance sympathique au deuxième étage du SPEC : Roger Bidaux, Nino Boccara, Serge Bouquet, Jean-Pierre Carton, Arnaud Chiffaudel, Mohamed Daoud,

Cécile Gasquet, Nadine Génand-Riondet, Gwénaëlle Lebras, Jean-Louis Pichard, Nick Shannon et Xavier Waintal. J'ai aussi une pensée particulière pour Michel Alba, dont j'ai partagé le bureau pendant un an et demi, et qui n'a jamais manqué d'humour face à mes plaisanteries dont la légèreté n'était probablement pas la qualité principale.

A cette liste s'ajoute mes compagnons de thèse, les autres doctorants qui n'ont pas été en reste pour animer les discussions notamment en salle café : Vincent Dupuis, Houman Falakshahi, Charly Favier, Guillaume Grégoire, Didier Hérisson, Julien Kockelkoren, Julien Lamarcq, Nicolas Leprovost, Louis Marié, Guillaume Marty, Florent Ravelet, Franck Selva et Mathieu Wyart.

Bien entendu, la réussite d'une thèse doit aussi beaucoup à la bienveillance de l'entourage familial. Le soutien quotidien de Catherine, depuis de nombreuses années déjà, et le sourire de la petite Célia m'ont été précieux. Je dois également à mes parents, Annette et Jean, de m'avoir enseigné à la fois les vertus de la rigueur et de l'intuition, deux qualités nécessaires dans la recherche. Merci enfin à Josette et Georges, mes beaux-parents, pour leur gentillesse et leur disponibilité, ainsi qu'à Alain, Daniel et tous ceux qui m'ont fait l'amitié d'assister à ma soutenance de thèse.

Il n'est pas toujours simple de comprendre le sujet et les motivations d'un travail de thèse, en particulier si l'on est extérieur au monde de la recherche. Expliquer pourquoi je faisais, pour simplifier, une thèse théorique sur les verres et les plastiques (cela dit, d'autres doivent bien faire des thèses sur le bois ou le béton, et ce n'est pas forcément plus facile à raconter) n'a pas toujours été simple, mais c'était à chaque fois enrichissant et intéressant. J'exprime ainsi ma gratitude à tous ceux, amis ou membres de la famille, qui ont eu la curiosité de s'intéresser à mes travaux.

The scientist should be a man willing to listen to every suggestion, but determined to judge for himself. He should not be biased by appearances; have no favourite hypothesis; be of no school; in doctrine have no master. (...) Truth should be his primary object.

Michael Faraday, cité par H. C. Dudley, *New principles in quantum mechanics*.

Very often such a simplified model throws more light on the real workings of nature than any number of "ab initio" calculations of individual situations, which even where correct often contain so much detail as to conceal rather than reveal reality. (...) After all, the perfect computation simply reproduces Nature, does not explain her.

Philip W. Anderson, *Nobel Lecture*.

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 Vieillissement dans l'espace des phases	7
1.1 Transition entre comportement entropique et activé	8
1.1.1 Le paradigme du paysage d'énergie	8
1.1.2 Le modèle de pièges	10
1.1.3 Le modèle Barrat-Mézard	13
1.1.4 Equilibre en taille finie	20
1.1.5 Transition dans le régime de vieillissement	23
1.1.6 Conclusion	29
1.2 Vieillissement critique et ultramétrieité dynamique	30
1.2.1 Fonction de corrélation au point critique	31
1.2.2 Ultramétrieité dynamique	33
1.2.3 Analyse à temps fini	34
1.2.4 Effet d'un forçage externe	36
1.2.5 Rapport de fluctuation dissipation	37
1.2.6 Modèle de pièges à plusieurs niveaux et discussion	37
1.3 Températures effectives dans les systèmes vitreux	40
1.3.1 Un bref survol de l'état des connaissances	41
1.3.2 Modèle à deux niveaux avec forçage aléatoire	43
1.3.3 Absence de RFD linéaire dans le modèle de pièges	49
1.3.4 Une notion moins stricte de température effective	53
Chapitre 2 Diffusion et vieillissement à une dimension	59
2.1 Introduction	59
2.2 Diffusion anormale dans le modèle de pièges 1D	61

2.2.1	Définition du modèle	61
2.2.2	Sous-diffusion induite par le désordre : un argument d'échelle	62
2.2.3	Front de diffusion moyen	63
2.3	Localisation dynamique	66
2.3.1	Localisation dynamique et équilibre partiel	66
2.3.2	Au-delà de l'équilibre partiel	72
2.3.3	Décorrélacion des demi-espaces	80
2.4	Vieillessement et sous-vieillessement des corrélacions	85
2.4.1	Motivacions de l'étude	85
2.4.2	Arguments analytiques	86
2.4.3	Résultats numériques et échelles de temps multiples	89
2.5	Réponse linéaire et non linéaire à un biais	93
2.5.1	Réponse en déplacement et en courant	93
2.5.2	Arguments d'échelle et résultats numériques	94
2.5.3	Autocorrélacion et relation de fluctuation dissipation	98
Chapitre 3 Dynamique vitreuse dans l'espace réel		101
3.1	De l'espace des phases à l'espace réel	101
3.2	Deux échelles de longueur pour les systèmes désordonnés	102
3.2.1	Modèle sur réseau avec interactions aléatoires	104
3.2.2	Dynamique de vieillissement	106
3.2.3	Corrélacion spatiale à deux répliques	107
3.2.4	Etude des structures inhérentes	110
3.2.5	Extension au cas sans désordre spatial	114
3.2.6	Bilan : un scénario à deux échelles de longueur	115
3.3	Un modèle sans désordre avec contraintes cinétiques	119
3.3.1	Définition du modèle	120
3.3.2	Approche de type champ moyen	121
3.3.3	Calculs exacts en dimension quelconque	122
3.3.4	Fraction de liens mobiles et comportement vitreux	129
3.3.5	Hétérogénéités dynamiques et échelle de longueur	132
Chapitre 4 Effet Kovacs dans les modèles vitreux		137
4.1	Introduction	137

D.4 Comportement à temps long	190
Publications	193
Bibliographie	195

Introduction générale

Bien que l'on ne s'en rende pas toujours compte au premier abord, de nombreux matériaux que l'on cotoie dans la vie quotidienne se trouvent de fait hors d'équilibre : verres de vitres, matières plastiques, mousses, colloïdes, sans parler de matériaux plus complexes comme le bois. Pourtant, à l'échelle de temps à laquelle nous observons habituellement le monde qui nous entoure, il nous est difficile de percevoir le caractère hors d'équilibre de ces matériaux, qui sont pourtant omniprésents. Ceci provient du fait que les matériaux que nous venons de mentionner évoluent sur des temps extrêmement longs, bien supérieurs au temps que nous pouvons passer à les regarder. Par exemple, il est assez connu que certaines matières plastiques vieillissent en quelques décennies. Cela peut se traduire par des altérations de l'aspect général de l'objet qui deviennent visibles à l'œil nu. En revanche, d'autres matériaux comme les verres de silice possèdent des temps de relaxation qui correspondent davantage à des échelles de temps astronomiques, si tant est que l'on soit capable d'en estimer une valeur : l'exemple classique des vitraux de cathédrale qui n'ont manifestement pas changé d'aspect depuis leur fabrication il y a plusieurs siècles atteste que les temps de relaxation sont en tout cas très grands par rapport aux échelles de temps humainement accessibles.

On devine donc que la compréhension des propriétés des matériaux vitreux revêt une grande importance pour le physicien, et ce thème, bien qu'il ait suscité de très nombreux travaux, reste encore de nos jours un champ d'étude assez ouvert au sein de la physique de la matière condensée. Il peut être utile à ce stade de préciser deux notions importantes qui apparaissent dans le contexte des systèmes vitreux. La première est celle de dynamique lente : on dit qu'un système possède des propriétés de dynamique lente lorsque le temps de relaxation de la quantité que l'on mesure est grand par rapport aux temps accessibles au laboratoire (ou au moins du même ordre). Ce temps de relaxation peut ainsi varier de quelques heures à quelques semaines, voire des années ou plus. Toutefois, une telle notion de dynamique lente n'implique pas nécessairement que le système soit loin de l'équilibre, il peut simplement relaxer au voisinage de l'équilibre comme c'est le cas lorsqu'on étudie la viscosité des liquides surfondus pour des températures T légèrement supérieures à la température de transition vitreuse T_g . Dans cette situation, les propriétés du système sont invariantes par translation dans le temps : seule compte la durée entre l'instant t_w où l'on perturbe le système et l'instant t auquel on fait la mesure. Les grandeurs caractérisant la relaxation (fonctions de

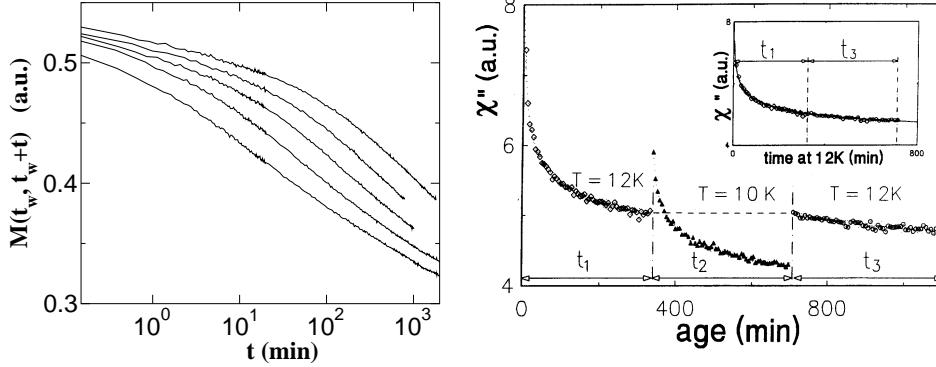


FIG. 1 – *A gauche : relaxation de l’aimantation (en unités arbitraires) dans un verre de spins, mesurée à l’instant $t_w + t$ après une trempe depuis une haute température. Un champ magnétique faible a été appliqué jusqu’à t_w et coupé ensuite ($t_w = 10s, 30s, 100s, 300s$ et $1000s$). On observe une forte dépendance du temps de relaxation par rapport à t_w . A droite : effet de rajeunissement et mémoire de la réponse hors phase χ'' d’un verre de spins (cf. texte). Données expérimentales reproduites avec l’aimable autorisation d’Eric Vincent.*

réponse ou de corrélation) ne dépendent ainsi que de $t - t_w$.

En revanche, il existe des situations où le système physique considéré reste loin de l’équilibre, ce qui entraîne ce que l’on appelle des propriétés de vieillissement. La présence de vieillissement, qui traduit l’absence d’invariance par translation dans le temps, est en principe identifiée à partir de fonctions à deux temps, comme les fonctions de réponse ou de corrélation évoquées plus haut. On constate dans ce cas que plus le temps t_w entre la trempe du système depuis une haute température et l’instant où on le perturbe est long, plus la relaxation de cette perturbation devient lente. Ce comportement est illustré sur la Fig. 1 (gauche), qui présente la relaxation de l’aimantation mesurée expérimentalement dans un verre de spins, après application d’un faible champ magnétique pendant une durée t_w suivant une trempe depuis une haute température. Dans les cas les plus simples, on trouve que les courbes de relaxation se superposent une fois tracées en fonction de t/t_w , ce qui contraste singulièrement avec le comportement en $t - t_w$ obtenu au voisinage de l’équilibre. On voit ainsi que le temps de relaxation du système est proportionnel à son âge, la “naissance” correspondant à l’instant où le système entre dans la phase vitreuse (par exemple par un abaissement brusque de la température). Dans le cas où les données se remettent à l’échelle en t/t_w , on parle souvent de “vieillissement simple”, par opposition à des comportements en t/t_w^ν avec $\nu < 1$, que l’on qualifie alors de “sous-vieillissement”.

On observe aussi expérimentalement dans les systèmes vitreux d’autres effets inattendus que l’on nomme “effets mémoire”. Ceux-ci sont en général associés à

des changements de température. Un des plus simples, que l'on étudiera d'ailleurs au chapitre 4, est observé lorsque l'on applique une brusque remontée en température après avoir laissé relaxer le système suffisamment longtemps à une première température à laquelle il devient vitreux. Dans ce cas, on obtient de manière assez générique une évolution non monotone de la grandeur mesurée (le volume par exemple). Cette effet montre que dans la phase vitreuse, l'état du système garde une trace de son histoire thermique, ce qui justifie le nom d'effet mémoire. D'autres phénomènes plus complexes, qui associent rajeunissement et mémoire, peuvent être mis en évidence plus particulièrement dans les matériaux verres de spins, comme l'illustre la Fig. 1 (droite). Le protocole thermique fait alors appel dans ce cas à plusieurs changements de température successifs. Dans un premier temps, le système est trempé depuis une haute température T_0 jusqu'à une température T_1 ($T_1 = 12K$ dans cet exemple), et on mesure la réponse hors phase du système à un champ magnétique oscillant. Cette réponse hors phase χ'' traduit la dissipation interne. Au bout d'un temps t_1 , la température est abaissée rapidement jusqu'à une valeur $T_2 < T_1$ ($T_2 = 10K$ sur la Fig. 1), et on observe une brusque remontée de χ'' , qui se met ensuite à relaxer comme si le système venait d'être trempé directement d'une haute température jusqu'à T_2 : on parle alors de rajeunissement. Ayant encore attendu un temps t_2 , on remonte ensuite la température jusqu'à T_1 , et on constate que la réponse χ'' reprend alors la valeur qu'elle avait à l'instant t_1 , juste avant le premier saut en température. Il s'agit d'un effet mémoire complet, comme on peut le vérifier sur l'encart dans lequel la partie centrale, correspondant à l'évolution à la température $T_2 = 10K$, a été supprimée. Le raccord entre les deux parties de la courbe est remarquable.

On voit ainsi que les propriétés des matériaux vitreux sont riches et complexes. Pour décrire celles-ci, plusieurs approches ont été suivies dans la littérature. Une des premières grandes idées a été de considérer l'espace des phases du système, c'est-à-dire un espace abstrait dans lequel chaque dimension correspond à un degré de liberté du système physique. L'espace des phases possède donc en général un très grand nombre de dimensions. Dans ce cadre, il a été constaté que la caractéristique des systèmes vitreux était qu'ils possédaient de très nombreux minima locaux dans l'espace des phases, et que ces minima étaient responsables du fort ralentissement de la dynamique à basse température (voir par exemple [88]). De là est né le paradigme du paysage d'énergie, duquel provient l'essentiel de la compréhension intuitive que les physiciens peuvent avoir de la transition vitreuse. Ce paradigme a de plus connu un important regain d'intérêt ces dernières années, car la puissance des ordinateurs actuels permet de tester ces idées par simulations numériques.

Au-delà du paysage d'énergie, d'autres approches plus formelles ont été développées, comme la théorie de couplage de modes pour les verres structuraux [91, 90], ou les théories dynamiques de champ moyen des verres de spins [40, 61, 63]. La première traite des systèmes sans désordre gelé, dans lesquels la structure amorphe est auto-induite par la dynamique, alors que la deuxième famille de théories concerne des systèmes possédant des énergies d'interaction aléatoires

gelées, c'est-à-dire qui n'évoluent pas au cours du temps. Malgré ces différences constitutives, il s'avère que les deux types de théories conduisent à des prédictions similaires, puisque les équations qui décrivent la dynamique des modèles de verres de spins en champ moyen (les modèles p-spins sphériques en particulier) sont quasiment identiques aux équations de la théorie schématique de couplage de modes. Ces théories prédisent ainsi l'existence d'une température critique T_c associée à la transition vitreuse, telle que le temps de relaxation τ_{eq} , ou de manière équivalente la viscosité η , diverge en loi de puissance au voisinage de ce point critique :

$$\tau_{eq} \sim \eta \sim (T - T_c)^{-\gamma} \quad (1)$$

où γ est un nombre positif. Cependant, les données expérimentales sur les verres montrent que la viscosité η ne diverge pas en loi de puissance, mais soit comme une loi d'Arrhénius $\eta \sim e^{E_a/T}$ (on parle alors de verres forts, par exemple SiO_2), soit plus rapidement encore avec un comportement bien ajusté par une loi du type Vogel-Fulcher (verres fragiles, souvent des verres organiques comme l'orthoterphényl) :

$$\eta \sim e^{\frac{A}{T-T_0}} \quad (2)$$

où T_0 peut être considérée comme une température de transition vitreuse idéale. Néanmoins, la température de transition vitreuse expérimentale T_g est déterminée par convention comme la température à laquelle la viscosité atteint une valeur de 10^{13} Poise (cette valeur peut varier quelque peu suivant les conventions), et T_g est donc sensiblement plus élevée que T_0 (mais inférieure à la température T_c prédite par la théorie de couplage de modes).

Pour mieux appréhender la problématique du vieillissement, une approche plus phénoménologique a également été employée, dans laquelle la dynamique dans l'espace des phases est décrite de manière simplifiée en supposant que tous les minima sont reliés entre eux, et que la particule représentant le système dans cet espace pouvait passer de l'un à l'autre en étant seulement limitée dans ces mouvements par les barrières d'énergie qu'elle doit franchir grâce à l'activation thermique [39, 129]. Ces modèles sont qualifiés génériquement de "modèles de pièges", puisque la particule reste piégée un temps très long dans les états les plus profonds, et font apparaître des régimes de vieillissement à basse température. Suivant la forme de la distribution des barrières d'énergie, on observe soit une transition vitreuse stricte pour une température T_g (cas de la distribution exponentielle), soit un régime de vieillissement interrompu au-delà d'une certaine échelle de temps (distribution gaussienne par exemple). Une généralisation de ce modèle incluant une structure en arbre permet aussi de rendre compte de certains effets de rajeunissement et mémoire [41, 141]. Bien que ne pouvant être reliée directement à la dynamique microscopique du système, une telle approche simplifiée a le mérite d'être intuitivement compréhensible, et de mettre en évidence un scénario possible pour la dynamique vitreuse, dont les ingrédients essentiels sont la présence de nombreux minima dans l'espace des phases, ainsi que l'existence de lois de distribution larges des temps de séjour dans ces minima à basse

température. De surcroît, ce scénario fait apparaître une dynamique fondamentalement intermittente, puisque le système n'est réellement "actif" qu'au moment des transitions entre pièges. Ce point est particulièrement intéressant car des phénomènes d'intermittence en régime de vieillissement ont récemment été observés expérimentalement dans des matériaux polymériques [55].

Dans le présent travail de thèse, nous allons explorer davantage cette dynamique de pièges, en en proposant des généralisations, et voir dans quelle mesure ce type de description en termes d'espace des phases peut rendre compte des propriétés vitreuses observées dans des modèles plus complexes et dans les verres réels. Ce sera l'objet du premier chapitre, dans lequel nous essayerons d'illustrer et de mieux comprendre certaines notions issues notamment des théories dynamiques de champ moyen des verres de spins, comme la compétition entre dynamiques "entropique" et "activée" suivant la structure du paysage d'énergie, l'apparition de températures effectives en régime de vieillissement, ou encore les propriétés d'ultramétrie dynamique de certaines fonctions de corrélation. Dans le deuxième chapitre, nous nous intéresserons au cas où l'espace des phases possède une structure en "rigole", c'est-à-dire dans le cas où les différents minima dans l'espace des phases sont reliés deux à deux de façon à former un réseau à une dimension. L'intérêt de ce type de structure de l'espace des phases a été souligné en Réf. [13]. Nous étudierons donc la généralisation unidimensionnelle du modèle de pièges, qui peut s'interpréter aussi en termes de diffusion de particules dans l'espace réel, en présence d'un environnement désordonné. Nous verrons apparaître de nombreuses propriétés intéressantes dans la phase de basse température, comme un front de diffusion non gaussien et sous-diffusif, des phénomènes de localisation dynamique, ou encore la coexistence de vieillissement simple et de sous-vieillissement. Nous aborderons également le problème de la réponse à un biais, qui peut modéliser les propriétés de transport dans un environnement fortement désordonné.

Nous tenterons ensuite de dépasser la description en termes d'espace des phases pour obtenir une vision dans l'espace réel des phénomènes de dynamique lente et de vieillissement. Nous essayerons en particulier de répondre à la question de savoir si la dynamique vitreuse est caractérisée par une (ou éventuellement plusieurs) échelle(s) de longueur, dont la valeur augmenterait en abaissant la température ou en augmentant la densité, puisque ces deux grandeurs sont les paramètres de contrôle usuels de la transition vitreuse. Nous considérerons pour cela deux modèles sur réseau différents : le premier, possédant une énergie associée à chaque configuration, est contrôlé par la température et le second, décrivant des redistributions de la densité locale dans un milieu dense, est gouverné par la densité moyenne. Ce sera l'objet du troisième chapitre, dont il faut noter qu'il n'est pas complètement abouti, car les travaux qui y sont rapportés ont été effectués à la fin de la thèse.

Enfin, dans le dernier chapitre, nous illustrerons les différentes approches proposées pour la transition vitreuse par l'étude d'un effet de type "mémoire" bien connu des expérimentateurs depuis les travaux de Kovacs dans les années 60. Cet effet montre que les systèmes hors de l'équilibre gardent une trace de leur histoire

thermique, et que mesurer une variable macroscopique comme le volume ou l'énergie ne suffit pas à décrire complètement le système, il est nécessaire pour cela de prendre en compte l'ensemble de la distribution des valeurs locales de la grandeur considérée, en raison de la présence de fortes inhomogénéités dans les systèmes vitreux. Nous comparerons les prédictions, concernant cet effet, des deux grandes approches développées dans cette thèse, à savoir une description dans l'espace des phases avec le modèle de pièges, et une vision dans l'espace réel en termes de croissance de domaines. Remarquons à ce sujet que même si les notions d'échelle de longueur croissantes introduites au troisième chapitre sont de nature assez différentes de celles qui apparaissent dans la croissance de domaine usuelle (de type ferromagnétique), nous ferons appel pour l'essentiel à cette dernière approche, qui est bien mieux comprise et établie.

Chapitre 1

Vieillessement dans l'espace des phases

De nombreux efforts, tant expérimentaux que théoriques, ont été consacrés à l'étude de la dynamique des matériaux vitreux ces dernières décennies (voir par exemple [154, 158, 40]). Une part importante de notre compréhension de la transition vitreuse provient de la théorie du couplage de modes (MCT) pour les verres structuraux [91, 90] et de la théorie dynamique de champ moyen pour les verres de spins [40, 61, 63], qui restent les théories microscopiques les plus sophistiquées dans ce domaine. Elles ont en particulier permis d'introduire de nouveaux concepts en physique des verres, comme les propriétés d'ultramétrie dynamique pour les fonctions de corrélation, ou de donner un sens précis à d'autres notions qui étaient déjà présentes à un niveau qualitatif, comme le paysage d'énergie ou la température effective. Néanmoins, si ces théories présentent un intérêt indéniable, il n'en reste pas moins que leur formalisme complexe rend difficile une compréhension plus intuitive des phénomènes physiques en jeu.

C'est pourquoi une approche complémentaire basée sur des modèles phénoménologiques a rencontré un certain succès, avec en particulier l'étude du modèle de pièges [77, 76, 39, 41, 129], ou encore du modèle Barrat-Mézard [14]. Ces modèles sont basés sur une description en termes de transitions entre les très nombreux états métastables présents dans l'espace des phases. Cette dynamique dans un espace des phases ayant une structure simple, puisque le système peut transiter directement d'un état quelconque vers n'importe quel autre état (on dira alors que tous les états sont connectés), présente une certaine cohérence avec les modèles de champ moyen, puisque dans ceux-ci tous les degrés de liberté microscopiques interagissent. Ces modèles de dynamique dans l'espace des phases, qui proposent une description à une échelle mésoscopique des phénomènes, mettent l'accent sur le caractère générique des mécanismes responsables du vieillissement dans les matériaux vitreux, à savoir l'existence de lois de distribution larges des temps de séjours dans les états métastables. Ils offrent par là même une compréhension intuitive de la transition vitreuse, avec pour évidente contrepartie de ne conduire qu'à des prédictions qualitatives pour l'essentiel.

Dans ce chapitre, nous souhaitons poursuivre cette démarche, et approfondir la compréhension de certaines notions qui sont apparues comme fondamentales dans le cadre des théories de champ moyen, à savoir la structure du paysage d'énergie (ou d'énergie libre), la notion de température effective ainsi que les propriétés d'ultramétrie dynamique, qui concernent les fonctions de corrélation hors d'équilibre. Nous les illustrerons en nous basant sur des modèles simples de dynamique dans l'espace des phases, comme le modèle de pièges, le modèle Barrat-Mézard, et en introduisant aussi certaines généralisations de ces derniers.

1.1 Transition entre comportement entropique et activé

1.1.1 Le paradigme du paysage d'énergie

Une manière d'appréhender l'étude d'un système possédant des interactions complexes entre ses degrés de liberté consiste à introduire la notion d'espace des phases, c'est-à-dire un espace abstrait ayant un très grand nombre de dimensions, chacune de ces dimensions étant associée à un degré de liberté physique. Pour un système constitué de N particules en interaction dans l'espace physique tridimensionnel (typiquement, un liquide), l'espace des phases aura donc $6N$ dimensions, puisque chaque particule possède six degrés de liberté, trois pour la position et autant pour la vitesse. Cependant, il est commode de considérer un espace des phases simplifié dans lequel sont prises en compte uniquement les coordonnées de positions. Un tel espace devrait être dénommé espace des configurations, mais nous l'appellerons également espace des phases, par abus de langage. Une telle approche revient à décrire la dynamique d'un système à N corps par celle d'une particule ponctuelle qui évolue dans un espace à $3N$ dimensions, en étant soumise à l'énergie potentielle $V(x_1, \dots, x_M)$, les (x_i) étant les coordonnées de cette particule ($M = 3N$ dans ce cas). On comprend dès lors que les propriétés géométriques de l'hypersurface définie par $z = V(x_1, \dots, x_M)$ puissent jouer un rôle important dans la dynamique. Pour caractériser géométriquement cette hypersurface, on commence par étudier les points singuliers définis par :

$$\forall i, 1 \leq i \leq M \quad \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0 \quad (1.1)$$

Pour classer ensuite ces points singuliers en minima et en points-selles, il est nécessaire d'introduire la "matrice Hessienne" H_{ij} , composée de toutes les dérivées secondes du potentiel :

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \quad 1 \leq i, j \leq M \quad (1.2)$$

Les valeurs propres λ_i ($1 \leq i \leq M$) de cette matrice Hessienne permettent de savoir si l'énergie augmente ou diminue le long des directions définies par les

vecteurs propres associés aux λ_i , sachant qu’une valeur propre positive correspond à une direction “montante” (suivant laquelle l’énergie augmente). Si toutes les valeurs propres λ_i sont positives, le point singulier est un minimum. Dans le cas contraire, il s’agit d’un point-selle, que l’on caractérise par son indice, défini comme le nombre de valeurs propres négatives, autrement dit de directions “descendantes”. Un minimum peut donc être considéré comme un point-selle d’indice nul.

Les théories de champ moyen dynamique pour les verres de spins ayant mis en évidence le rôle prépondérant joué par la structure du paysage d’énergie [61, 63, 113], ce paradigme a suscité un grand intérêt ces dernières années [152, 54, 65, 114], en raison de la puissance croissante des ordinateurs qui permet désormais de mettre en œuvre efficacement les idées proposées à l’origine par Goldstein [88], et précisées ensuite par Stillinger et Weber [153]. Ces études ont conduit à associer la température de transition vitreuse T_c prédite par le couplage de modes à une énergie seuil E_s de nature géométrique, séparant des régions de l’espace des phases dominées par des points-selles pour $E > E_s$ de régions dominées par des minima pour $E < E_s$ [7, 52, 92, 102, 8]. Dans ce cadre, la transition vitreuse qui apparaît dans les théories de champ moyen (et que l’on retrouve dans les théories de couplage de modes) s’explique par deux propriétés importantes du paysage d’énergie. D’une part, les points-selles et les minima sont nettement séparés en énergie, autrement dit à une énergie donnée, on trouvera soit des points-selles, soit des minima, mais on ne pourra trouver les deux simultanément. S’il s’agit de points-selles, ceux-ci auront essentiellement tous le même indice, déterminé par l’énergie à laquelle ils se trouvent. D’autre part par les barrières d’énergies entourant les minima divergent avec la taille du système [113], ce qui signifie qu’il n’est plus possible de les franchir pour un système à la limite thermodynamique.

On peut dès lors se demander quel deviendrait le comportement du système si l’une de ces deux conditions au moins n’était pas remplie. On sait que dans ce cas, cette transition vitreuse idéale s’estomperait, laissant place à une transition plus floue et plus étalée en température, ce qui est observé dans les verres réels [90]. En particulier, si les barrières d’énergie restent finies, on peut s’attendre non seulement à ce que le comportement du temps de relaxation avec la température soit lissé, mais aussi à ce que les fonctions de corrélation reflètent cette transition dynamique entre un régime temporel dans lequel les points-selles sont explorés principalement, et un régime à temps long où le système visite des minima en majorité. Le point clé est le suivant : visiter des minima correspond à une dynamique thermiquement activée dans laquelle le système doit franchir des barrières d’énergie, ce qui implique une forte dépendance en température, alors que visiter des points-selles est associé à une dynamique essentiellement indépendante de la température, appelée parfois dynamique “entropique” : l’évolution du système est alors principalement limitée par le manque de directions descendantes qui permettraient de s’échapper, lorsqu’il se trouve au voisinage d’un point-selle

avec très peu de valeurs propres négatives. Ce type de transition¹ entre deux comportements dynamiques différents a déjà été observé dans des simulations de liquide surfondu de type Lennard-Jones [6, 67], mais une analyse quantitative des échelles de temps associées n'a pas été effectuée pour l'instant.

Dans cette partie, nous étudions quantitativement cette transition ainsi que sa dépendance par rapport aux paramètres pertinents dans des modèles simples de dynamique vitreuse. Après avoir rappelé la définition et les principales propriétés du modèle de pièges, nous considérerons le modèle de dynamique dans l'espace des phases introduit par Barrat et Mézard [14] (que nous appellerons le modèle BM dans la suite), un modèle qui a connu récemment un regain d'intérêt dans le contexte des relations de fluctuation dissipation [139, 146]. Nous étudions le régime de vieillissement de la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ dans l'ensemble de la phase vitreuse $T < T_g$, en généralisant ainsi les résultats obtenus initialement en Réf. [14] dans la limite $T \rightarrow 0$. Nous trouvons un comportement à temps long ($t \gg t_w$) essentiellement indépendant de la température, ainsi qu'une singularité à temps court ($t \ll t_w$) qui apparaît dans le domaine de température $T_g/2 < T < T_g$, conduisant à des propriétés d'ultramétrie dynamique [62] pour $T = T_g$, comme dans le modèle de pièges (cf. section 1.2 et Réf. [31]). Nous étudions la fonction de corrélation dans le modèle BM de *taille finie*, à l'équilibre comme en régime de vieillissement, ce qui permet de mettre en évidence une transition dynamique entre des régimes entropiques et activés. Enfin, nous généralisons le modèle BM en introduisant un seuil en énergie afin d'imiter une structure de l'espace des phases composées de points-selles et de minima. Nous montrons alors que le changement de dynamique de vieillissement (d'entropique à thermiquement activée) dans ce modèle conduit à des comportements d'échelle non triviaux, et que l'échelle de temps associée à cette transition peut être beaucoup plus courte que le temps d'équilibration du système.

1.1.2 Le modèle de pièges

Etant donné que nous allons faire fréquemment appel, tout au long de cette thèse, au modèle de pièges, il est utile de commencer par en rappeler la définition ainsi que les principales propriétés. Ce modèle, introduit initialement dans le contexte de la dynamique vitreuse en Réfs. [77, 76, 39, 129], et généralisé à une structure en arbre en Réf. [41], apparaît comme l'un des modèles les plus simples présentant une transition vitreuse dynamique.

Définition et équation maîtresse

Le modèle de pièges est défini de la manière suivante : on considère une particule qui est piégée dans des états i de basse énergie, ayant une profondeur $E_i > 0$, définie comme la hauteur de la barrière d'énergie. L'énergie du fond du piège i

¹Nous utilisons ici, faute d'un terme plus approprié, le mot "transition" dans le sens du mot anglais "*crossover*".

est alors $-E_i$, l'opposée de la barrière d'énergie. Cette particule s'interprète en général comme le point représentatif d'un système vitreux dans son espace des phases. Les N énergies E_i (on suppose que N est grand devant 1) sont des variables aléatoires tirées à partir d'une distribution $\rho(E)$, et le cas le plus simple correspond au choix d'une distribution exponentielle des énergies :

$$\rho(E) = \frac{1}{T_g} e^{-E/T_g} \quad E > 0 \quad (1.3)$$

où T_g est ici une échelle d'énergie, qui s'interprétera par la suite comme la température de transition vitreuse. On définit ensuite une dynamique activée pour ce modèle : la probabilité par unité de temps w_i de quitter le site i vaut :

$$w_i = \Gamma_0 e^{-E_i/T} \quad (1.4)$$

Γ_0 étant une échelle de fréquence microscopique. Une fois sortie du piège, un nouveau piège est choisi parmi tous les autres avec une probabilité uniforme, égale à $1/N$. Le taux de transition $W(i \rightarrow j)$ vaut alors :

$$W(i \rightarrow j) = \frac{1}{N} \Gamma_0 e^{-E_i/T} \quad (1.5)$$

et vérifie la relation de bilan détaillé :

$$W(i \rightarrow j) e^{E_i/T} = W(j \rightarrow i) e^{E_j/T} \quad (1.6)$$

Le signe $+$ dans l'exponentielle vient du fait que E , la barrière d'énergie, est l'opposée de l'énergie réelle des pièges. De par le choix des w_i , on constate que la particule reste en moyenne sur chaque site un temps égal à $\tau_i = 1/w_i$, avec une distribution exponentielle autour de cette moyenne, qui traduit le fait que le processus est markovien, autrement dit sans mémoire. Ces variables τ_i sont donc elles aussi des variables aléatoires gelées puisqu'elles se déduisent de E_i par la relation $\tau_i = \Gamma_0^{-1} e^{E_i/T}$. Grâce à cette relation, qui peut s'interpréter mathématiquement comme un changement de variable, on déduit que la distribution de ces temps de piégeage gelés $\psi_{TM}(\tau)$ (TM pour "trap model") vaut :

$$\psi_{TM}(\tau) = \frac{\mu}{\tau^{1+\mu}} \quad (1.7)$$

où $\mu \equiv T/T_g$ est la température réduite, et où Γ_0^{-1} a été choisi comme unité de temps. On constate que pour $\mu \leq 1$, cette distribution n'a plus de moyenne, ce qui va engendrer des effets de vieillissement, comme nous le verrons plus bas. L'évolution de la probabilité $P_i(t)$ d'être dans l'état i au temps t est décrite par une équation maîtresse :

$$\frac{dP_i}{dt} = -w_i P_i(t) + \frac{1}{N} \sum_j w_j P_j(t) \quad (1.8)$$

Le premier terme du membre de droite traduit la probabilité de quitter le site i entre t et $t + dt$, alors que le second membre correspond à la probabilité de venir en i en partant d'un site j . Le facteur $1/N$ vient du fait que le site i est alors choisi avec une probabilité uniforme parmi tous les sites.

Dans la limite d'un très grand nombre d'états accessibles, $N \rightarrow \infty$, on peut passer à un formalisme continu en énergie, en regroupant tous les états dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$. On s'intéresse alors à la distribution de probabilité dynamique $P(E, t)$, telle que $P(E, t) dE$ soit la probabilité d'être au temps t dans un état d'énergie E à dE près. Cette distribution évolue suivant une nouvelle équation maîtresse, déduite de la précédente :

$$\frac{\partial P}{\partial t}(E, t) = e^{-E/T} P(E, t) + \rho(E) \int_0^\infty dE' e^{-E'/T} P(E', t) \quad (1.9)$$

Puisque les taux de transitions vérifient les relations de bilan détaillé, il existe donc un état d'équilibre de Gibbs (rappelons que E est en fait l'opposée de l'énergie réelle) :

$$P_{eq}(E) = \frac{1}{Z} \rho(E) e^{E/T} \quad (1.10)$$

Si l'on choisit une forme exponentielle pour $\rho(E)$, comme en Eq. (1.3), on constate que la distribution stationnaire n'est plus normalisable pour $T \leq T_g$. Autrement dit, il n'y a plus d'état d'équilibre possible et le système est contraint de vieillir indéfiniment, ce qui se traduit par une lente dérive de l'énergie moyenne $\bar{E}(t)$:

$$\bar{E}(t) = T \ln t \quad (1.11)$$

Plus précisément, on constate pour $T < T_g$ que la distribution dynamique des énergies $P(E, t)$ prend à temps long une forme d'échelle :

$$P(E, t) = \frac{1}{T} u \phi(u) \quad (1.12)$$

en ayant défini une variable d'échelle $u = e^{E/T}/\Gamma_0 t$ [129]. De la sorte, $\phi(u)$ est normalisée à 1, $\int_0^\infty du \phi(u) = 1$.

Cette dérive de l'énergie n'est cependant permanente que si le nombre d'états est infini, de sorte que le formalisme continu en énergie s'applique. Si au contraire ce nombre est fini, le régime de vieillissement sera interrompu lorsque les états les plus profonds auront été atteints. Ces états jouent le rôle d'une coupure qui régularise la distribution d'équilibre, en la rendant normalisable. Il faut d'ailleurs remarquer que le fait que la distribution $P_{eq}(E)$ ne soit plus normalisable pour $T \leq T_g$ est équivalent au fait que la distribution des temps de piégeage $\psi_{TM}(\tau)$ ait un premier moment infini. En effet, la probabilité d'être sur un site de temps de piégeage τ est à l'équilibre proportionnelle à $\tau \psi_{TM}(\tau)$, et devient donc non normalisable pour $T \leq T_g$.

Fonction de corrélation

On peut définir très simplement une fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ entre les instants t_w et $t_w + t$ en disant que la corrélation vaut q_1 si la particule n'a pas changé de piège, et $q_0 < q_1$ sinon. Sans restreindre la généralité, on peut choisir $q_1 = 1$ et $q_0 = 0$, puisque le cas général s'en déduit par une transformation affine. On obtient dès lors [129] :

$$C(t_w, t_w + t) = \int_0^\infty dE P(E, t_w) e^{-t e^{-E/T}} \quad (1.13)$$

Dans la phase haute température $T > T_g$, la distribution $P(E, t_w)$ converge vers la distribution d'équilibre $P_{eq}(E)$ pour $t_w \rightarrow \infty$, de sorte que la fonction de corrélation ne dépend plus que de la différence des temps t . Au contraire, dans la phase vitreuse, la dépendance en t_w demeure, même à temps long, et conduit à un comportement d'échelle :

$$C(t_w, t_w + t) = \mathcal{C}\left(\frac{t}{t_w}\right) \quad (1.14)$$

ainsi qu'à des singularités à temps court et à temps long de la fonction d'échelle $\mathcal{C}(v)$ [41, 129] :

$$1 - \mathcal{C}(v) \sim v^{1-\mu}, \quad v \rightarrow 0 \quad \mathcal{C}(v) \sim v^{-\mu}, \quad v \rightarrow \infty \quad (0 < \mu < 1) \quad (1.15)$$

Notons que le modèle de pièges semble rendre compte, malgré sa simplicité, d'une partie des phénomènes en jeu dans de nombreux types de matériaux, comme les verres "fragiles" [70, 67, 20], les matériaux "vitreux mous" [149, 147], les matériaux granulaires [94, 101], ou encore l'accrochage de défauts étendus tels que parois de domaines, vortex dans les supraconducteurs, etc. [9]. De plus, les transitions activées entre les différents minima décrites par le modèle de pièges correspondent à une dynamique intermittente, avec des pics d'activité associés à chaque transition, et très peu d'activité en dehors. Une telle intermittence de la dynamique a effectivement été observée récemment dans des matériaux vitreux [55], et de manière plus surprenante, en physique atomique [10, 100, 53].

1.1.3 Le modèle Barrat-Mézard

Comme cela a été rappelé au paragraphe précédent, une des premières tentatives visant à décrire la dynamique de vieillissement avec des modèles stochastiques simples de dynamique dans l'espace des phases a été le modèle de pièges, avec pour objectif de mettre en évidence un scénario générique pour la dynamique vitreuse, basé sur des effets d'activation thermique. Quelques années plus tard, Barrat et Mézard [14] ont proposé un modèle quelque peu similaire, mais dans lequel l'activation thermique était remplacée par une "activation entropique", c'est-à-dire par le fait qu'à basse température, le système tend à abaisser continuellement son énergie et que de moins en moins d'états sont alors accessibles à

mesure que l'énergie diminue. Dans une formulation continue en énergie, valable dans la limite d'un nombre d'états infini, le modèle Barrat-Mézard (BM) est défini comme un processus markovien dans lequel une "particule" (qu'il faut considérer comme le point représentatif d'un système dans son espace des phases) est autorisée à sauter d'un état d'énergie vers n'importe quel autre. Ces états d'énergie sont distribués selon une distribution *a priori* $\rho(E)$, et les taux de transition $W(E'|E)$ de l'énergie E vers l'énergie E' correspondent à la prescription de Glauber :

$$W(E'|E) = \frac{\Gamma_0 \rho(E')}{1 + e^{(E'-E)/T}} \quad (1.16)$$

où Γ_0 est une échelle de fréquence microscopique, que nous choisirons comme unité dans la suite. La dynamique du modèle BM est alors décrite par la probabilité $P(E, t)$ d'avoir l'énergie E à l'instant t , qui satisfait l'équation maîtresse suivante :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \int_{-\infty}^0 dE' [W(E|E')P(E', t) - W(E'|E)P(E, t)] \quad (1.17)$$

dans laquelle nous avons restreint $\rho(E)$ à être non nulle seulement pour $E < 0$, ceci sans perte de généralité puisque nous sommes intéressés par la dynamique de basse énergie.

Résultats à température nulle

Contrairement au modèle de pièges, et à tous les modèles pour lesquels l'activation thermique est l'ingrédient essentiel, la dynamique n'est pas complètement gelée dans la limite de température nulle, ce qui conduit à une évolution quelque peu similaire à une dynamique relaxationnelle de descente de gradient dans un espace de haute dimension. Une propriété importante de ce modèle à température nulle est que la dynamique, une fois exprimée en termes de temps de séjour plutôt qu'en énergies, devient totalement indépendante de la forme fonctionnelle de la distribution *a priori* des énergies $\rho(E)$; en particulier, $\rho(E)$ peut être bornée ou non. En définissant le temps de séjour moyen $\tau(E)$ à l'énergie E par la relation :

$$\frac{1}{\tau(E)} \equiv \int_{-\infty}^0 dE' W(E'|E) \quad (1.18)$$

qui se réduit pour $T = 0$ à $\tau(E)^{-1} = \int_{-\infty}^E dE' \rho(E')$, on trouve que la distribution *a priori* des temps de séjour $\psi_0(\tau)$ déduite de $\rho(E)$ est donnée par $\psi_0(\tau) = \tau^{-2} \theta(\tau - 1)$, indépendamment de la forme de $\rho(E)$. Par conséquent, la distribution dynamique $p(\tau, t)$, qui a été calculée en Réf. [14], ne dépend pas non plus de $\rho(E)$. Cette distribution $p(\tau, t)$ n'atteint jamais d'état stationnaire, mais présente à temps long une forme d'échelle $p(\tau, t) = t^{-1} \phi_0(\tau/t)$, typique du vieillissement, $\phi_0(u)$ étant donnée par :

$$\phi_0(u) = \frac{1}{u^2} e^{-1/u} \quad (1.19)$$

En définissant la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ comme la probabilité de ne pas avoir changé d'état entre t_w et $t_w + t$, qui peut s'écrire :

$$C(t_w, t_w + t) \equiv \int_{-\infty}^0 dE P(E, t_w) e^{-t/\tau(E)} \quad (1.20)$$

on trouve pour $T = 0$ et pour $t_w \gg 1$:

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{t_w}{t_w + t} \quad (1.21)$$

Notons que dans le régime de temps court $1 \ll t \ll t_w$, la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ se comporte linéairement, au sens où $1 - C \sim t/t_w$. Ce point va se révéler important dans la discussion des résultats à température finie.

Vieillessement à température finie

Nous présentons maintenant les résultats que nous avons obtenus en régime de vieillissement dans le cas de la température finie, avec une densité d'états exponentielle :

$$\rho(E) = \beta_g \exp(\beta_g E) \theta(-E) \quad (1.22)$$

comme on le fait habituellement dans le modèle de pièges. Dans ce cas, la distribution d'équilibre de Boltzmann devient non normalisable pour $T \leq T_g \equiv 1/\beta_g$, et la distribution dynamique dérive indéfiniment vers les énergies les plus basses, ce qui conduit au phénomène de vieillissement, qui peut être mis en évidence par exemple grâce au comportement des fonctions de corrélation.

Comme cela a été fait pour le modèle de pièges en Réf. [129], on peut chercher une forme d'échelle pour la distribution dynamique des énergies. Une variable d'échelle naturelle serait le rapport entre le temps typique $\tau(E)$ que le système passe dans un état d'énergie E , défini en Eq. (1.18), et le temps t écoulé depuis la trempe. Le calcul de $\tau(E)$ pour $0 < \mu < 1$ (avec $\mu \equiv T/T_g$) donne, en supposant $|E| \gg T_g$ (la convergence est cependant exponentielle) :

$$\tau(E) = \frac{\sin \pi \mu}{\pi \mu} e^{-E/T_g} \quad (1.23)$$

Nous choisissons en fait une variable d'échelle u proportionnelle à $\tau(E)/t$, en la définissant par $u^{-1} = t e^{E/T_g}$. Cela conduit à une distribution $P(E, t) = \beta_g u \phi(u)$, où $\phi(u)$ est normalisée par $\int_0^\infty du \phi(u) = 1$. Une fois que ces substitutions sont faites dans l'Eq. (1.17), on obtient l'équation différentielle suivante pour $\phi(u)$:

$$u^2 \phi'(u) + (u - J) \phi(u) = -\frac{1}{u} \int_0^\infty dv \frac{\phi(v)}{1 + (v/u)^{1/\mu}} \quad (1.24)$$

avec $J \equiv \pi \mu / \sin \pi \mu$. Le comportement asymptotique de la distribution $P(E, t)$ peut être extrait de manière assez simple de cette dernière équation. Analysons

par exemple le comportement à grand u de $\phi_0(u)$, qui correspond au comportement à grand $|E|$ de $P(E, t)$. Dans ce cas, l'intégrale qui apparaît dans le membre de droite de l'Eq. (1.24) se réduit à :

$$\int_0^\infty dv \frac{\phi(v)}{1 + (v/u)^{1/\mu}} \simeq \int_0^\infty dv \phi(v) = 1 \quad u \gg 1 \quad (1.25)$$

de sorte que l'Eq. (1.24) s'écrit, en négligeant aussi J par rapport à u et en appelant $\phi_l(u)$ l'expression asymptotique (pour $u \gg 1$) de $\phi(u)$:

$$u^2 \phi_l'(u) + u \phi_l(u) = -\frac{1}{u} \quad (1.26)$$

La solution générale de cette équation est la suivante :

$$\phi_l(u) = \frac{A}{u} + \frac{1}{u^2} \quad (1.27)$$

La contrainte suivant laquelle $\phi(u)$ doit être normalisable impose $A = 0$, de sorte que $\phi_l(u) = u^{-2}$. Il est intéressant de constater que nous trouvons ici l'expression asymptotique *exacte* de $\phi(u)$, y compris le préfacteur (qui se trouve être égal à 1), bien que nous n'ayons effectué que l'analyse asymptotique d'une équation linéaire. Ce résultat est d'ailleurs en accord avec ceux obtenus à température nulle – cf. Eq. (1.19). Notons également que si l'on tient compte de la première correction à l'approximation faite dans l'Eq. (1.25), on obtient $\phi_l(u) - u^{-2} \sim u^{-3}$. En négligeant ces corrections, on trouve donc que $P(E, t)$ est égal à $\beta_g t e^{E/T_g}$, c'est-à-dire proportionnel à $\rho(E)$, pour $e^{|E|/T_g} \gg t$.

Dans le cas opposé $u \ll 1$, l'équation qui gouverne l'expression asymptotique $\phi_s(u)$ de $\phi(u)$ s'écrit :

$$u^2 \phi_s'(u) - J \phi_s(u) = - \int_0^\infty dz \frac{\phi_s(uz)}{1 + z^{1/\mu}} \quad (1.28)$$

En cherchant une solution en loi de puissance $\phi_s(u) = a u^\alpha$, l'équation précédente est satisfaite à condition que :

$$J = \int_0^\infty dz \frac{z^\alpha}{1 + z^{1/\mu}} \quad (1.29)$$

étant donné que le terme $u^2 \phi_s'(u)$ peut être négligé dans ce cas. En remplaçant chaque membre de l'équation par sa valeur respective, on trouve :

$$\frac{\pi \mu}{\sin \pi \mu} = \frac{\pi \mu}{\sin(1 + \alpha) \pi \mu} \quad (1.30)$$

La convergence de l'intégrale apparaissant dans l'Eq. (1.29) impose $0 < (1 + \alpha)\mu < 1$. Dans cet intervalle, l'Eq. (1.30) admet deux solutions : $\alpha = 0$ et $\alpha = 1/\mu - 2$. Comme la limite de température nulle du modèle BM est régulière [14], la solution

de température finie doit converger vers la solution de température nulle donnée par l'Eq. (1.19), qui décroît plus vite que toute loi de puissance pour $u \rightarrow 0$, de sorte que l'on s'attend à ce que $\alpha \rightarrow \infty$ pour $\mu \rightarrow 0$. La solution correcte pour $\phi(u)$ est donc :

$$\phi(u) \sim u^{1/\mu-2} \quad u \ll 1 \quad (1.31)$$

Ainsi, la distribution des énergies se comporte à petit $|E|$, c'est-à-dire pour $e^{|E|/T_g} \ll t$, comme :

$$P(E, t) \sim t^{1-1/\mu} e^{(1-1/\mu)E/T_g} \sim t^{1-1/\mu} \rho(E) e^{-E/T} \quad (1.32)$$

ce qui signifie que les “petites” énergies (les moins “profondes”) sont essentiellement équilibrées. En considérant maintenant la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ définie plus haut, l'Eq. (1.20) peut se réécrire à l'aide de la fonction d'échelle $\phi(u)$, en utilisant aussi l'Eq. (1.23) :

$$C(t_w, t_w + t) = \int_0^\infty du \phi(u) e^{-Jt/ut_w} \quad (1.33)$$

ce qui montre que la fonction de corrélation présente un comportement d'échelle de type vieillissement simple :

$$C(t_w, t_w + t) = \mathcal{C}_{ag}(t/t_w) \quad (1.34)$$

En utilisant les résultats asymptotiques présentés ci-dessus pour $\phi(u)$, on trouve les comportements à temps court et à temps long de la fonction de corrélation. En particulier, pour des temps $t \gg t_w$, $C(t_w, t_w + t)$ est donnée par :

$$C(t_w, t_w + t) \simeq \frac{\sin \pi \mu}{\pi \mu} \frac{t_w}{t} \quad t \gg t_w \quad (1.35)$$

pour toute valeur de $\mu < 1$, de sorte que la “queue” de la fonction de corrélation se trouve être une loi de puissance indépendante de la température, mis à part le préfacteur. Ce point sera également important dans la suite pour identifier les comportements entropiques ou activés.

Le comportement à temps court de la fonction de corrélation se calcule à partir de la relation :

$$1 - C(t_w, t_w + t) = \int_0^\infty dv \phi(v) (1 - e^{-Jt/vt_w}) \quad (1.36)$$

Pour $t \ll t_w$, on peut essayer de linéariser l'exponentielle dans le dernier facteur. En utilisant l'Eq. (1.31), on voit que l'intégrale obtenue ne converge à sa borne inférieure que si $\mu < \frac{1}{2}$; dans ce cas, la fonction d'échelle $\mathcal{C}_{ag}(u)$ est alors régulière pour $u \rightarrow 0$ (c'est-à-dire $1 - \mathcal{C}_{ag}(u) \sim u$), comme dans la limite de température nulle. Au contraire, pour $\frac{1}{2} < \mu < 1$, une singularité apparaît, et on trouve :

$$1 - \mathcal{C}_{ag} \left(\frac{t}{t_w} \right) \sim \left(\frac{t}{t_w} \right)^{\frac{1-\mu}{\mu}} \quad t \ll t_w \quad (1.37)$$

Cette propriété peut s'interpréter de la manière suivante : l'énergie moyenne $\langle E' \rangle_E$ atteinte dans une transition de E vers E' vaut :

$$\langle E' \rangle_E \equiv \tau(E) \int_{-\infty}^0 dE' E' W(E'|E) = E - \frac{\pi\mu}{\tan \pi\mu} T_g \quad (1.38)$$

Pour $\mu < \frac{1}{2}$, $\langle E' \rangle_E$ est inférieure à E de telle sorte que la dynamique est assez similaire à la dynamique de température nulle : à chaque transition, l'énergie est abaissée en moyenne. À l'inverse, pour $\mu > \frac{1}{2}$, $\langle E' \rangle_E$ est supérieure à E et l'énergie *augmente* en moyenne à chaque transition. La lente décroissance de l'énergie moyenne $\overline{E}(t)$ en fonction du temps résulte dans ce cas d'un effet purement cinétique : la particule reste plus longtemps sur les états de basse énergie. En fait, la particule saute typiquement un grand nombre de fois parmi les états de haute énergie avant d'atteindre un état profond, puis saute de nouveau vers les hautes énergies et ainsi de suite. Ce scénario, vraisemblablement responsable de l'apparition de la singularité à temps court, est réminiscent du comportement du modèle de pièges, pour lequel $\langle E' \rangle_E = T_g$ indépendamment de l'énergie de départ E . Notons cependant que dans le modèle BM, les dynamiques entropique et activée entrent toutes deux en jeu pour $\mu < 1$ (cette dernière ayant finalement peu d'influence pour $\mu < 1/2$), mais l'activation thermique reste en régime de vieillissement un mécanisme auxiliaire, le principal étant le "canal" entropique. On peut vérifier ceci à partir du temps de séjour $\tau(E)$ – cf. Eq. (1.23) – qui est toujours proportionnel à e^{-E/T_g} , et non pas à $e^{-E/T}$ comme ce serait le cas pour une dynamique purement activée. Ainsi le présent scénario est quelque peu différent de l'image habituelle du paysage d'énergie, puisque le canal entropique reste présent à toutes les énergies (et donc toutes températures). Nous allons voir dans la suite comment généraliser ce modèle afin de rendre compte de la disparition complète des directions descendantes, et du rôle prépondérant alors joué par les phénomènes activés.

Nous présentons maintenant des résultats numériques en vue de confirmer l'analyse précédente. Pour des raisons de programmation, les simulations ont été effectuées avec une version légèrement différente du modèle, dans laquelle les taux de transition sont donnés par :

$$\tilde{W}(E'|E) = \Gamma_0 \rho(E') \quad E' \leq E \quad (1.39)$$

$$\tilde{W}(E'|E) = \Gamma_0 \rho(E') e^{-(E'-E)/T} \quad E' > E \quad (1.40)$$

En effet, pour simuler la dynamique du modèle BM dans le formalisme continu en énergie (correspondant à un nombre infini d'états), la nouvelle énergie E' est tirée aléatoirement à chaque transition, avec une probabilité proportionnelle au taux de transition $\tilde{W}(E'|E)$. Ce tirage requiert de calculer l'intégrale :

$$I(E') = \tau(E) \int_{-\infty}^{E'} dE'' \tilde{W}(E''|E) \quad (1.41)$$

La valeur de E' est alors déterminée en tirant une variable aléatoire uniforme $u \in [0, 1]$, et en inversant la relation $u = I(E')$ pour obtenir E' en fonction de u .

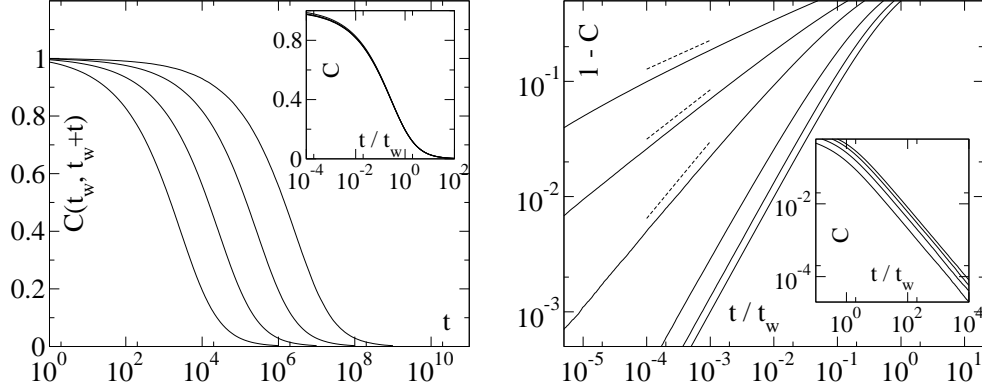


FIG. 1.1 – *A gauche* : fonction de corrélation en régime de vieillissement $C(t_w, t_w + t)$ du modèle BM, pour $t_w = 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 (de gauche à droite), et $\mu = 0.7$ (simulations numériques). Encart : corrélation tracée en fonction de t/t_w , montrant une très bonne superposition des courbes, à part de très légères déviations pour $t \ll t_w$. *A droite* : $1 - C$ en fonction de t/t_w pour $\mu = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.7$ et 0.8 (de droite à gauche), montrant l'apparition de la singularité à temps court pour $\frac{1}{2} < \mu < 1$, avec un exposant $(1 - \mu)/\mu$ (pointillés). Pour $\mu < \frac{1}{2}$, $1 - C$ est linéaire en t pour $t \ll t_w$. Encart : décroissance à temps long en loi de puissance $C \sim (t/t_w)^{-1}$, pour $\mu = 0.2, 0.4, 0.6$ et 0.8 (de droite à gauche).

L'intérêt des taux de transition $\tilde{W}(E'|E)$ est qu'ils permettent un calcul analytique de $I(E')$, ainsi que de l'inversion $E' = I^{-1}(u)$, ce qui n'est pas possible avec $W(E'|E)$. De plus, les taux de transition $\tilde{W}(E'|E)$ se comportent qualitativement comme les taux de Glauber habituels, si bien que l'on s'attend à ce que cette légère différence n'affecte pas les lois d'échelle et les exposants trouvés plus haut, mais induise seulement des corrections dans les préfacteurs numériques. Il faut tout d'abord tester la forme vieillissante de la fonction de corrélation donnée par l'Eq. (1.34). Les résultats sont présentés sur la Fig. 1.1 (gauche), qui montre la corrélation $C(t_w, t_w + t)$ pour $\mu = 0.7$ et plusieurs temps d'attente, $t_w = 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 . La remise à l'échelle, présentée en encart, se révèle très bonne, avec seulement quelques petites déviations à temps court ($t \ll t_w$), lorsque t_w n'est pas suffisamment grand. Nous testons aussi les exposants prédits pour les régimes de temps court et de temps long de la corrélation, comme montré sur la Fig. 1.1 (droite). On voit clairement le comportement linéaire de $1 - C$ pour $\mu < \frac{1}{2}$, ainsi que la singularité prédite avec un exposant $(1 - \mu)/\mu$ pour $\frac{1}{2} < \mu < 1$. Il s'avère cependant difficile de trouver une véritable ligne droite pour cette singularité à temps court car t doit satisfaire $1 \ll t \ll t_w$, et une telle séparation d'échelle est difficile à obtenir numériquement (notons que t_w vaut déjà 10^7). Le régime de temps long est plus facile à mettre en évidence quantitativement, puisque la seule condition de séparation d'échelle est $t \gg t_w$. Le comportement en loi de puissance proportionnelle à $(t/t_w)^{-1}$, avec un exposant indépendant de la tempé-

rature, est clairement mis en évidence sur l'encart de la Fig. 1.1 (droite). Comme nous l'avons précisé plus haut, il n'est pas possible de tester quantitativement le préfacteur prédit par l'Eq. (1.35) car les simulations utilisent une version légèrement différente du modèle, mais on peut néanmoins constater que le préfacteur trouvé numériquement décroît avec la température, en accord qualitatif avec la prédiction théorique.

1.1.4 Equilibre en taille finie

Dans les modèles réalistes de verres, on s'attend à ce que la structure de l'espace des phases global soit hautement non triviale, puisqu'elle doit rendre compte du fait que l'espace physique est de dimension finie. Il apparaît alors tentant, au moins en première approximation, d'imaginer un système macroscopique comme une collection de petits sous-systèmes indépendants, dont la taille serait de l'ordre de la longueur de cohérence [37, 155] (voir également [158] pour une approche expérimentale de cette question). Ce scénario est confirmé par de récentes simulations [71] de liquides Lennard-Jones à basse température, montrant que le comportement dynamique d'un système de 130 particules est à une bonne approximation celui de deux systèmes indépendants composés de 65 particules chacun.²

Dans ce contexte, les versions de taille finie des modèles usuels de dynamique dans l'espace des phases (pièges ou BM) apparaissent comme étant particulièrement pertinents, et le cas le plus simple à étudier est la situation d'équilibre. Afin de faire le lien avec des modèles plus réalistes, rappelons que les "états" dans le cas présent peuvent être associés à des points singuliers dans l'espace des phases, à savoir des points-selles ou des minima, de sorte que l'on s'attend à ce que leur nombre M croisse exponentiellement avec le nombre N de degrés de liberté physiques :

$$M \sim M_0 e^{\alpha N} \quad (1.42)$$

où α est une constante numérique. De nombreux travaux ont étudié la dépendance de α avec la température dans différents modèles (en considérant plus précisément les états TAP, c'est-à-dire les points-selles de l'énergie libre) et ont trouvé $\alpha \ll 1$ [50, 51, 137, 54]. Il faut noter par ailleurs, en gardant à l'esprit l'image physique proposée ci-dessus, que pour une cellule élémentaire, N est proportionnel à $\xi(T)^d$ et dépend donc lui-même de la température.

En considérant M états d'énergie tirés aléatoirement d'après une distribution exponentielle $\rho(E)$, la distribution d'équilibre se concentre sur les états d'énergie les plus profonds, de sorte que la fonction de corrélation décroît sur une échelle de temps de l'ordre du temps de séjour le plus long τ_{\max} rencontré dans le système : $C_{eq}(t, M) = \mathcal{C}(t/\tau_{\max})$. La valeur de τ_{\max} peut être estimée en utilisant

²Cette décomposition en un grand nombre de cellules élémentaires décorréelées ne doit pas être confondue avec la procédure invoquée habituellement pour justifier des propriétés d'auto-moyennage dans les systèmes désordonnés, car dans ce dernier cas, chaque cellule est déjà censée être très grande.

un argument d'échelle : dans un modèle de taille finie, on peut imaginer que les temps de séjour τ sont tirés aléatoirement selon la distribution de probabilité $\psi(\tau)$ associée au modèle de taille *infinie*. Dans le cas du modèle de pièges, pour lequel $\psi_{\text{TM}}(\tau) = \mu/\tau^{1+\mu}$, cette image se révèle en fait exacte, puisque la relation $\tau = e^{|E|/T}$ est valable localement, au niveau de chaque piège : on a ainsi $\tau_{\text{max}} \sim M^{1/\mu}$. A l'inverse, dans le modèle BM, la relation donnée en Eq. (1.23) n'est valable que dans la limite de taille infinie, et devrait être seulement une approximation dans la cas où M est fini. Néanmoins, on peut s'attendre à ce que cette approximation soit capable de donner la bonne loi d'échelle avec M : $\psi(\tau) \sim 1/\tau^2$ conduit ainsi à $\tau_{\text{max}} \sim M$.

Une question intéressante apparaît naturellement à propos de la dynamique d'équilibre en taille finie dans la phase de basse température. Etant donné que pour $T \leq T_g$, la distribution d'équilibre (dans le formalisme continu en énergie) $P_{eq}(E) \propto \rho(E) e^{-E/T}$ devient non normalisable, une échelle de coupure doit nécessairement apparaître afin de régulariser la distribution $P_{eq}(E)$. Une façon d'introduire une telle coupure est précisément de considérer un nombre fini d'états. Sinon, la coupure est générée spontanément par la dynamique elle-même, puisqu'elle est donnée par le temps t_w écoulé depuis la trempe. On peut alors se demander si la dynamique est qualitativement la même quelle que soit l'origine de la coupure. Nous verrons que la réponse dépend du modèle considéré.

Dans le modèle de pièges avec distribution exponentielle des énergies, dans la phase basse température $\mu < 1$ et avec un nombre fini de pièges M , la fonction de corrélation d'équilibre $C_{eq}^{\text{TM}}(t, M)$ se met sous une forme d'échelle $\mathcal{C}_{\text{TM}}(t/M^{1/\mu})$, et la fonction d'échelle \mathcal{C}_{TM} peut être calculée dans les régimes asymptotiques $t \ll M^{1/\mu}$ et $t \gg M^{1/\mu}$. Il en résulte que les comportements asymptotiques sont similaires à ceux trouvés dans le régime de vieillissement, en remplaçant la coupure temporelle t_w par $M^{1/\mu}$. Toutefois, les préfacteurs sont différents de ceux trouvés dans le régime de vieillissement [41]. Plus précisément, on obtient :

$$1 - C_{eq}^{\text{TM}}(t, M) \simeq \kappa_s \left(\frac{t}{M^{1/\mu}} \right)^{1-\mu} \quad t \ll M^{1/\mu} \quad (1.43)$$

$$C_{eq}^{\text{TM}}(t, M) \simeq \kappa_l \left(\frac{t}{M^{1/\mu}} \right)^{-\mu} \quad t \gg M^{1/\mu} \quad (1.44)$$

où les préfacteurs κ_s et κ_l sont donnés par :

$$\kappa_s = \frac{1}{1-\mu} \Gamma(\mu) \Gamma(1/\mu) \Gamma(1-\mu)^{-1/\mu} \quad (1.45)$$

$$\kappa_l = \sqrt{2}^{1-2\mu} \mu \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{2} + \mu\right) \quad (1.46)$$

Cela montre que dans le modèle de pièges, les comportements asymptotiques de la fonction de corrélation (une fois convenablement remise à l'échelle) pour $\mu < 1$ sont les mêmes quelle que soit l'origine de cette coupure, à savoir statique

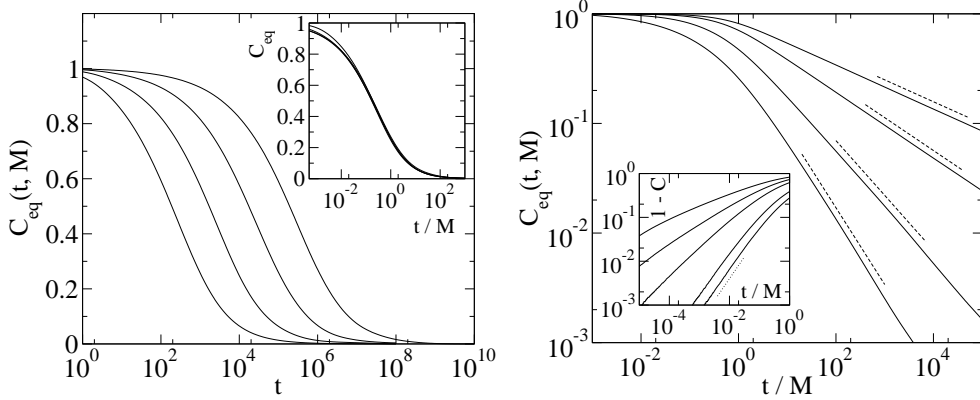


FIG. 1.2 – *A gauche : corrélation d'équilibre dans le modèle BM en taille finie $C_{eq}(t, M)$, pour $M = 10^3, 10^4, 10^5$ et 10^6 , et $\mu = 0.7$. Encart : mêmes données en fonction de t/M , montrant une très bonne remise à l'échelle, à part quelques déviations à temps court. A droite : comportement à temps long ($t \gg M$) de la corrélation $C_{eq}(t, M) \sim (t/M)^{-\mu}$ (pointillés) typique des phénomènes activés ($M = 10^3$ et $\mu = 0.2, 0.3, 0.5$ et 0.7 de haut en bas). Encart : singularité à temps court ($t \ll M$), identique au cas vieillissant ($M = 10^6$, $\mu = 0.3, 0.4, 0.6, 0.7$ et 0.8 de bas en haut; pointillés : pente -1).*

(nombre d'états) ou dynamique (temps d'attente). Il serait intéressant de voir si cette propriété reste valable pour le modèle BM.

Dans ce but, nous testons d'abord numériquement la loi d'échelle proposée en t/M pour le modèle BM en taille finie, en utilisant cette fois dans les simulations la version "naturelle" du modèle, avec des taux de transition de Glauber (en effet, les problèmes d'intégration et d'inversion rencontrés avec le formalisme continu ne se posent plus ici, et les différents choix possibles des taux de transition conduisent au même niveau de difficulté sur le plan numérique). La Fig. 1.2 (gauche) présente $C_{eq}(t, M)$ pour différentes valeurs de M , à savoir $M = 10^3, 10^4, 10^5$ et 10^6 . L'encart montre que les courbes se superposent bien une fois tracées en fonction de t/M , avec cette fois encore de petites déviations dans le régime de temps court, qui requiert des systèmes de très grandes tailles pour atteindre la forme d'échelle asymptotique.

En ce qui concerne maintenant les comportements asymptotiques, on voit sur la Fig. 1.2 (droite) qu'à temps long ($t \gg M$), la fonction de corrélation n'est plus indépendante de la température, comme dans le régime de vieillissement, mais dépend au contraire fortement de cette dernière, et l'exposant de la loi de puissance correspondante est égal à $-\mu$, à la précision numérique. Ceci met clairement en évidence le rôle prépondérant joué par la dynamique activée à temps long, ce qui correspond au fait que la particule ne peut s'échapper des états de plus basse énergie que par activation thermique. A l'inverse, la singularité à temps

court ($t \ll M$) n'est pas modifiée par rapport au régime de vieillissement (si ce n'est sans doute au niveau des préfacteurs), comme on peut le voir sur l'encart de la Fig. 1.2 (droite). Ce résultat était attendu, car la dynamique à temps court est dominée par les états d'énergie "intermédiaire" (c'est-à-dire les états d'énergie élevée parmi les états profonds sur lesquels la mesure d'équilibre se concentre) à partir desquels il reste possible de s'échapper vers le bas.

En conséquence, une transition apparaît dans la fonction de corrélation d'équilibre de *taille finie* entre un comportement entropique à temps court et une dynamique thermiquement activée à temps long. Une question naturelle à ce stade serait alors de savoir si cette transition dynamique est une spécificité de l'équilibre, ou si elle existe aussi en régime de vieillissement.

1.1.5 Transition dans le régime de vieillissement

Il est admis que les phénomènes activés jouent un rôle important en physique des verres, et de nombreuses études expérimentales se sont concentrées sur l'effet de la température dans les matériaux vitreux (voir par exemple [79] pour les verres structuraux et [43] pour les verres de spins). Certains travaux théoriques confirment également ce point de vue, puisqu'il a été montré que la transition vitreuse idéale prédite par la théorie de couplage de modes était en fait "gommée" dans les verres réels par les processus activés [91, 90]. Cependant, dans les verres structuraux, on suppose habituellement que ces processus activés ne sont pertinents que sur des échelles de temps proches du temps d'équilibration $\tau(T)$ (qui devient extrêmement grand au dessous de la température expérimentale de transition vitreuse), et non pas dans le régime de vieillissement qui correspond à des échelles de temps plus courtes. D'ailleurs, de récentes simulations sur des liquides de Lennard-Jones semblent valider un scénario de type champ moyen, avec une température effective bien définie [22, 21], à l'opposé du comportement des modèles thermiquement activés comme le modèle de pièges, pour lesquels les graphes de fluctuation dissipation ne conduisent pas à des droites en général [80, 148], mis à part dans certains cas très particuliers [139].

On peut dès lors penser que la transition de la dynamique entropique à la dynamique activée observée dans les simulations numériques [6, 67] pourrait être seulement due à la petite taille des systèmes considérés, et que l'échelle de temps correspondante devrait être très grande dans les systèmes macroscopiques, comme le montre d'ailleurs l'analyse mathématique rigoureuse de la dynamique du modèle à énergies aléatoires [18, 68]. Néanmoins, les arguments présentés plus haut suggèrent qu'en dimension finie, cette échelle de temps devrait être gouvernée par la longueur de cohérence plutôt que par la taille globale du système. On peut aussi se demander si cette échelle de temps associée à la transition peut être dans certains cas nettement plus petite que le temps d'équilibration, ce qui la rendrait plus facilement observable.

Dans cette partie, nous étudions l'apparition de cette transition dynamique entre un comportement entropique et activé dans le régime de vieillissement de la

fonction de corrélation. A cet effet, nous considérons le modèle BM de taille finie ainsi qu'une généralisation qui inclut une énergie seuil en-dessous de laquelle tous les états sont des minima isolés, et nous montrons que l'échelle de temps associée à la transition dynamique n'est égale au temps d'équilibration que pour le modèle totalement connecté, et devient beaucoup plus faible dès qu'une structure (une connectivité) non triviale est prise en compte.

Vieillissement dans un système de taille finie

Une généralisation naturelle de l'analyse effectuée au paragraphe précédent est d'étudier le régime de vieillissement du modèle BM en taille finie, correspondant à des temps d'attente t_w tels que $1 \ll t_w \ll M$, dans le but de mettre en évidence une transition dans le comportement dynamique de la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t, M)$ entre le vieillissement entropique usuel dans le modèle BM pour $t \ll M$, et un comportement activé pour $t \gg M$. Ainsi, la fonction de corrélation est maintenant caractérisée par deux échelles de temps, t_w et M , au lieu d'une seule des deux.

Les résultats numériques pour la corrélation $C(t_w, t_w + t, M)$ sont présentés sur la Fig. 1.3 (gauche) pour $M = 10^3$, $t_w = 10^2$ et plusieurs températures ($\mu = 0.2, 0.3, 0.5$ et 0.7). Mis à part un décalage global, les parties initiales de chaque courbe (pour des temps t tels que $t_w \lesssim t \lesssim M$) se comportent de manière similaire, ce qui est caractéristique d'un comportement entropique, indépendant de la température, comme nous l'avons vu dans la partie précédente. Au contraire, le régime de temps long ($t \gtrsim M$) présente une loi de puissance avec un exposant $-\mu$, qui est l'empreinte d'une dynamique activée thermiquement.

Comme nous avons considéré jusqu'à présent des modèles totalement connectés, on peut se demander si une connectivité finie $Z \ll M$ modifierait fortement ou non les résultats précédents. Bien qu'une étude détaillée du modèle BM en connectivité finie dépasse le cadre du présent travail, nous commentons ici les résultats de simulations préliminaires sur des graphes aléatoires avec une connectivité moyenne finie. En particulier, décroître la connectivité ne modifie guère le temps global de décroissance de la fonction de corrélation, que ce soit à l'équilibre ou en régime de vieillissement. Par contre, les résultats numériques hors d'équilibre présentés en encart de la Fig. 1.3 (gauche) pour $M = 10^3$ et différentes valeurs de Z , indiquent que le fait de réduire la connectivité tend à diminuer l'échelle de temps au-delà de laquelle l'activation thermique devient dominante. Cela était attendu, car une connectivité finie génère de nombreux minima locaux, à partir desquels on ne peut s'échapper que par activation thermique. On peut alors supposer que dans des modèles vitreux réalistes, même si la "cellule corrélée élémentaire" peut contenir un grand nombre de degrés de liberté, l'effet de la connectivité peut encore réduire davantage l'échelle de temps associée à la transition, ce qui suggère que les phénomènes activés pourraient être pertinents sur des échelles de temps accessibles (expérimentalement ou dans des simulations).

A partir des résultats que nous venons de présenter, on peut suggérer le scé-

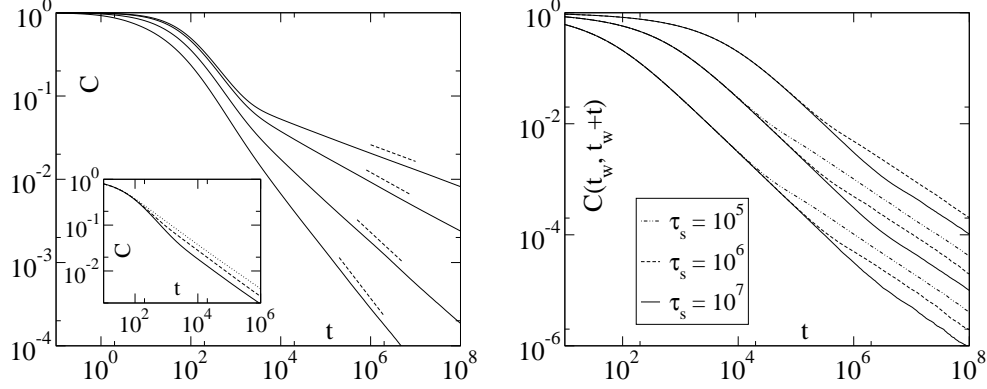


FIG. 1.3 – *A gauche* : corrélation $C(t_w, t_w + t, M)$ en régime de vieillissement du modèle de taille finie, pour $M = 10^3$, $t_w = 10^2$ et $\mu = 0.2, 0.3, 0.5$ et 0.7 , montrant une transition d'un régime entropique à un régime activé avec un exposant $-\mu$. Encart : effet d'une connectivité Z finie pour $M = 10^3$, $t_w = 10^2$ et $\mu = 0.5$. Pointillés : $Z = 100$, tirets : $Z = 300$, trait plein : totalement connecté. Réduire la connectivité raccourcit la durée du régime entropique. *A droite* : corrélation $C(t_w, t_w + t)$ du modèle ThBM en régime de vieillissement ($\mu = 0.7$), pour $\tau_s = 10^5$ ($t_w = 10^2, 10^3$), 10^6 et 10^7 ($t_w = 10^2, 10^3, 10^4$); t_w augmente de gauche à droite. On voit nettement une transition entre une dynamique entropique (exposant -1) et une dynamique activée (exposant $-\mu$).

nario suivant concernant le comportement des verres réalistes. D'une part, on s'attend comme cela a été discuté plus haut à ce qu'un grand système puisse être considéré comme une collection de petits sous-systèmes (quasiment) indépendants [71], dont la taille serait de l'ordre de la longueur de cohérence, de sorte que des modèles phénoménologiques de taille finie pourraient effectivement être pertinents pour décrire des verres réels. Par ailleurs, nous venons de voir que même avec une dynamique entropique, un régime dominé par l'activation thermique apparaît au-delà d'une certaine échelle de temps (qui diverge avec la taille du système). Cependant, la présence d'une connectivité finie du réseau de points-selles et de minima (c'est-à-dire le fait que toutes les transitions directes ne soient pas possibles) peut réduire considérablement cette échelle de temps, si bien qu'elle peut devenir beaucoup plus courte que le temps d'équilibration du système, et être de ce fait accessible dans les simulations numériques ou dans les mesures expérimentales. Dans le régime activé à temps long, on s'attend donc génériquement à ce que la dynamique d'un verre réaliste soit semblable à celle du modèle de pièges (avec cependant une distribution des barrières qui n'est pas nécessairement exponentielle). On peut d'ailleurs se demander à ce stade si un petit nombre de minima seulement doivent être pris en considération pour décrire ces phénomènes activés, au lieu d'un grand nombre comme cela est fait habituellement dans le modèle de pièges. Dans la phase basse température du modèle

BM totalement connecté, mais de taille finie, les phénomènes activés ne font effectivement intervenir qu'un nombre restreint de minima, ceux dont l'énergie est la plus basse. Au contraire, lorsque l'on prend en compte une connectivité finie, de nombreux minima locaux apparaissent, et tous ces minima contribuent à la dynamique de vieillissement activée. Ce dernier cas de figure est probablement le plus proche du comportement à temps long des verres réels, parmi ceux que nous avons évoqués.

Même si une étude quantitative du modèle BM en taille finie dans le régime hors d'équilibre serait d'un grand intérêt, elle nécessiterait une séparation d'échelle bien plus grande que celle que nous avons obtenue, ce qui est difficile à atteindre numériquement. Nous proposons donc une autre version du modèle BM, dans laquelle on peut sans risque prendre la limite $M \rightarrow \infty$ sans éliminer la transition dynamique qui nous intéresse ici. Ceci peut être fait en tenant compte d'une structure particulière de l'espace des phases.

Effet d'une énergie seuil

En revenant au paradigme du paysage d'énergie avec une séparation nette en énergie entre points-selles et minima [7, 52, 92, 102, 8], on peut essayer d'imiter cette structure de l'espace des phases en introduisant à la main une énergie seuil E_s qui va permettre de définir des contraintes cinétiques dans le modèle : les transitions directes entre états d'énergie E et E' sont interdites si E et E' sont toutes deux inférieures à E_s , et inchangées dans le cas contraire par rapport au modèle BM usuel. En d'autres termes, les états ayant une énergie $E > E_s$ peuvent être considérés comme des points-selles, à partir desquels tous les autres états sont accessibles, alors que les états avec une énergie $E < E_s$ représentent des minima isolés depuis lesquels le système ne peut s'échapper qu'en sautant vers un point-selle, avant de redescendre en fin de compte dans un autre minimum, éventuellement plus profond. Une telle définition pourrait être appliquée à un système de taille finie M , et le temps d'équilibration serait dans ce cas une fonction de M , probablement d'ordre M . Dans les liquides de Lennard-Jones, il a été trouvé que ce seuil en énergie E_s était apparemment proportionnel au nombre N de degrés de liberté, mais selon les arguments développés plus haut, N devrait être borné par $\xi(T)^d$, de sorte que l'on s'attend à ce que E_s reste fini même pour des systèmes macroscopiques. De la même manière, M devrait aussi rester fini, mais en supposant que la plus basse énergie E_{min} trouvée dans le système est nettement plus basse que E_s , on peut néanmoins faire l'approximation qui consiste à prendre la limite $M \rightarrow \infty$ en gardant E_s finie, afin de décrire la dynamique sur des échelles de temps beaucoup plus courtes que le temps d'équilibration du système (qui est fini en taille finie).

La Fig. 1.3 présente les résultats des simulations numériques de la fonction de corrélation dans ce modèle BM généralisé, que l'on appellera désormais modèle ThBM ("Threshold Barrat-Mézard"), pour différentes valeurs de t_w et E_s , en se concentrant sur le régime de temps long ($t \gg t_w$). Les simulations montrent

l'apparition d'une transition entre deux lois de puissance distinctes, la première avec un exposant -1 correspondant au comportement usuel à temps long du modèle BM (dynamique entropique), et la seconde avec un exposant $-\mu$ typique de la queue de la corrélation dans le modèle de pièges (dynamique thermiquement activée).

Nous présentons maintenant un argument d'échelle afin de mieux appréhender cette transition dynamique. Nous nous concentrons tout d'abord sur le cas le plus intéressant où l'énergie typique atteinte à t_w , qui est d'ordre $-T_g \ln t_w$, reste nettement supérieure à E_s , ce qui est équivalent à $t_w \ll \tau_s$, en ayant défini une échelle de temps $\tau_s \equiv \exp(|E_s|/T_g)$.

Nous supposons, et nous l'avons testé numériquement, que la queue (E inférieure à $-T_g \ln t_w$) de la distribution dynamique des énergies $P(E, t_w)$ garde la forme habituelle $P(E, t_w) \propto e^{E/T_g}$ (que l'on trouve à la fois dans le modèle BM et dans le modèle de pièges) pour $E > E_s$ et pour $E < E_s$. On s'attend alors au comportement asymptotique suivant pour la distribution dynamique des temps de séjour $p(\tau, t_w)$:

$$p(\tau, t_w) \sim \frac{1}{t_w} \left(\frac{t_w}{\tau} \right)^2 \quad t_w \ll \tau \ll \tau_s \quad (1.47)$$

$$p(\tau, t_w) \sim \frac{A}{t_w} \left(\frac{t_w}{\tau} \right)^{1+\mu} \quad \tau \gg \tau_s \quad (1.48)$$

ces expressions correspondant à la queue à grands τ des distributions dynamiques dans le modèle BM et dans le modèle de pièges respectivement. Le facteur A est déterminé par continuité de la distribution en τ_s , ce qui donne $A = (t_w/\tau_s)^{1-\mu}$. En calculant la corrélation pour $t_w \ll t \ll \tau_s$, on retrouve comme précédemment $C(t_w, t_w + t) \sim t_w/t$, alors que pour $t \gg \tau_s$, on a maintenant :

$$C(t_w, t_w + t) \sim \frac{t_w}{\tau_s} \left(\frac{\tau_s}{t} \right)^\mu \quad (1.49)$$

Pour résumer les résultats précédents, on peut introduire une fonction d'échelle $f(\cdot)$ telle que $C(t_w, t_w + t)$ s'écrive :

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{t_w}{\tau_s} f\left(\frac{t}{\tau_s}\right) \quad (1.50)$$

avec le comportement asymptotique suivant pour $f(z)$:

$$f(z) \sim \frac{1}{z} \quad (z \ll 1), \quad f(z) \sim \frac{1}{z^\mu} \quad (z \gg 1) \quad (1.51)$$

Afin de tester cette prédiction, nous avons tracé sur la Fig. 1.4 les mêmes données que précédemment, mais en utilisant les variables d'échelle $(\tau_s/t_w) C(t_w, t_w + t)$ et t/τ_s . La superposition des courbes est très bonne à temps long (pour $t \gg t_w$), ce qui confirme la validité de cette analyse. Notons cependant que la totalité de la

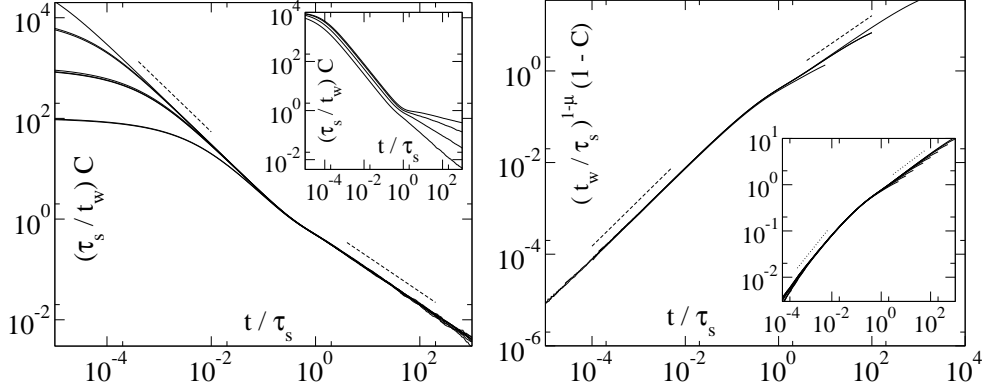


FIG. 1.4 – *A gauche* : mêmes données que sur la figure précédente (modèle ThBM), remises à l'échelle pour mettre en évidence la transition entropique / activé, en traçant $(\tau_s/t_w) C(t_w, t_w + t)$ en fonction de t/τ_s (cf. texte). Pointillés : pentes -1 et $-\mu$. Encart : effet de la température, $\mu = 0.2, 0.3, 0.5$ et 0.7 de haut en bas, $t_w = 10^3$ et $\tau_s = 10^7$. *A droite* : même analyse dans le cas $t_w \gg \tau_s$ ($\mu = 0.3$); $(t_w/\tau_s)^{1-\mu} [1 - C(t_w, t_w + t)]$ est tracé en fonction de t/τ_s . On observe une transition d'un régime entropique linéaire à un régime activé $C \sim (t/t_w)^{1-\mu}$; $\tau_s = 10^3$ ($t_w = 10^5, 10^6$) et 10^4 ($t_w = 10^6, 10^7$). Encart : idem pour $\mu = 0.6$. Le régime entropique présente une singularité d'exposant $(1 - \mu)/\mu$; $\tau_s = 5 \cdot 10^3, 10^4, 2 \cdot 10^4$ et $t_w = 10^5, 10^6, 10^7$.

courbe ne peut pas se remettre à l'échelle de manière simple car la première partie se comporte encore en t/t_w , de sorte que deux régimes d'échelle $t \sim t_w$ et $t \sim \tau_s$ doivent être pris en compte séparément. La Fig. 1.4 (gauche) montre que dans la limite d'une grande séparation d'échelle entre t_w et τ_s , les courbes se réduiraient essentiellement, en échelles logarithmiques, à deux segments de droite avec des pentes différentes -1 et $-\mu$. La dépendance en température de ces courbes est clairement mise en évidence dans l'encart de la Fig. 1.4 (gauche), ce qui montre que la pente est indépendante de μ pour $t_w \ll t \ll \tau_s$ (et égale à -1), alors qu'elle en dépend fortement (en étant égale à $-\mu$) pour $t \gg \tau_s$.

Dans le régime opposé $t_w \gg \tau_s$, le système est piégé dans des minima profonds de sorte que le comportement devient similaire à celui du modèle de pièges, à un décalage près en énergie. Toutefois, le système doit nécessairement visiter des états d'énergie $E > E_s$ pour s'échapper des minima, et relaxer ensuite vers un autre minima. Par conséquent, une transition entre un comportement entropique et un comportement activé est aussi attendue dans ce cas pour $t \sim \tau_s$, qui tombe maintenant dans le régime de temps court ($1 \ll t \ll t_w$). Pour analyser cette transition, on peut obtenir une relation d'échelle suivant la même méthode que

pour l'Eq. (1.50), qui s'écrit maintenant :

$$1 - C(t_w, t_w + t) = \left(\frac{\tau_s}{t_w}\right)^{1-\mu} g\left(\frac{t}{\tau_s}\right) \quad (1.52)$$

où la fonction d'échelle $g(z)$ se comporte comme :

$$g(z) \sim z^\gamma \quad (z \ll 1), \quad g(z) \sim z^{1-\mu} \quad (z \gg 1) \quad (1.53)$$

avec $\gamma = \min[1, (1 - \mu)/\mu]$, comme pour le modèle BM habituel. La Fig. 1.4 (droite) présente les résultats numériques pour différents t_w et τ_s , avec $\mu = 0.3$ et 0.6 , et montre une bonne superposition des données, confirmant là encore l'existence d'une transition dynamique pour $t \sim \tau_s$.

En résumé, une structure non totalement connectée de l'espace des phases génère un grand nombre de minima locaux, de sorte que l'échelle de temps associée à la fin du régime entropique peut être fortement réduite par rapport au cas complètement connecté, ce qui suggère que cette transition devrait être pertinente dans des systèmes vitreux réalistes sur des échelles de temps expérimentales, même en-dessous de la température de transition vitreuse.

1.1.6 Conclusion

Dans cette partie, nous avons montré qu'une transition d'un comportement entropique à un comportement activé thermiquement apparaît spontanément dans des modèles vitreux simples une fois qu'une longueur de cohérence finie a été prise en compte, ce qui autorise conceptuellement à décomposer un système macroscopique en une collection de petits sous-systèmes indépendants [37, 155]. Dans ce cadre, on est conduit naturellement à considérer des modèles d'espace des phases de taille finie pour décrire la dynamique locale dans une de ces "cellules corrélées élémentaires".

Il est intéressant de constater que dans le modèle de pièges, la taille finie M remplace schématiquement la coupure temporelle t_w qui apparaît en régime de vieillissement, sans affecter les lois de puissance à temps court et à temps long trouvées pour la fonction de corrélation. A l'inverse, dans le modèle BM, l'équilibre en taille finie diffère de manière significative du régime de vieillissement : la singularité à temps court n'est pas modifiée, mais celle à temps long est gouvernée par l'activation thermique plutôt que par un mécanisme entropique, car elle seule permet de quitter les états les plus profonds, lorsque le nombre d'états est fini. En généralisant cette analyse au cas du régime de vieillissement dans les systèmes de taille finie, pour lesquels les deux échelles de temps t_w et M entrent en jeu, la transition dynamique existe pour $t \sim M$ comme à l'équilibre, et peut même être trouvée plus tôt si une connectivité finie est prise en compte. Bien qu'une transition similaire ait déjà été observée dans des simulations numériques [6, 67], une analyse quantitative de l'échelle de temps associée serait très utile, afin de voir comment elle varie avec la température et avec la taille globale du système.

En particulier, si une décomposition en petits sous-systèmes indépendants est valable, on s'attend à ce que l'échelle de temps associée à la transition sature à une valeur finie pour de grands systèmes.

En s'inspirant du paradigme du paysage d'énergie, nous avons ensuite proposé une généralisation du modèle BM dans laquelle la transition n'est pas liée directement à la taille finie du système, mais plutôt à un seuil en énergie E_s qui sépare l'espace des phases en points-selles pour $E > E_s$ et en minima pour $E < E_s$. En supposant que le temps d'équilibration est suffisamment grand, on trouve que la fonction de corrélation continue de vieillir, même au-delà de la transition entre dynamique entropique et activée, avec cette fois un comportement caractéristique de l'activation thermique. Il est d'ailleurs intéressant de constater que cette transition entre les deux types de dynamiques de vieillissement conduit à des lois d'échelles inhabituelles, en raison du fait que deux échelles de temps t_w et τ_s sont impliquées dans la dynamique au lieu d'une. De plus, la présence de nombreux minima locaux dans l'espace des phases conduit à des temps de transition entre les deux régimes nettement plus faibles que le temps d'équilibration, contrairement à ce qui se produit dans le cas totalement connecté.

1.2 Vieillissement critique et ultramétrie dynamique

Après avoir étudié les propriétés d'une dynamique stochastique dans différents types de paysages d'énergie, nous allons maintenant aborder un autre thème issu des études dynamiques des modèles de verres de spins en champ moyen, à savoir l'ultramétrie dynamique. Nous tenterons d'illustrer cette notion dans le cadre des modèles de dynamique dans l'espace des phases (pièges et BM), afin de mieux en cerner la signification physique. Il a été conjecturé qu'une classe particulière de modèles en champ moyen, incluant le modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK), possède des propriétés d'ultramétrie dynamique, qui reflètent très précisément la structure hiérarchique (en arbre) de la solution statique. Cette ultramétrie dynamique est associée à l'existence d'une infinité d'échelles de temps dans le sens suivant : si $C(t_1, t_2)$ est la fonction de corrélation entre les temps t_1 et t_2 ($t_1 < t_2$), alors dans la limite dans temps longs :

$$C(t_1, t_3) = \min[C(t_1, t_2), C(t_2, t_3)], \quad \forall t_2 \in [t_1, t_3] \quad (1.54)$$

Il a été montré que cette propriété des fonctions de corrélation était valable pour la solution des équations dynamiques (de couplage de modes) décrivant les verres de spins "continus" en champ moyen, dans le régime de vieillissement [62]. De plus, cette propriété s'avère invariante par toute reparamétrisation du temps de la forme $t \mapsto h(t)$, où $h(t)$ est une fonction (arbitraire) croissante, suffisamment régulière et tendant vers l'infini quand $t \rightarrow \infty$. Tester si l'ultramétrie dynamique est satisfaite dans des systèmes désordonnés réalistes est rendu difficile par

le fait que cette propriété ne devrait être valable que dans la limite des temps asymptotiquement grands, et que des corrections de temps fini sont a priori attendues. Par conséquent, une question pertinente dans ce contexte est de savoir quelle est la forme de ces corrections, est surtout leur importance quantitative.

Dans cette partie, nous montrons analytiquement que l'ultramétrie dynamique est présente dans les modèles de type pièges (modèle de pièges usuel et modèle de Barrat-Mézard) si l'on se place exactement au point critique. Nous donnons la forme explicite de la fonction de corrélation et nous discutons les corrections de temps fini et de forçage fini. Notons que dans ces modèles à un seul niveau d'arborescence, la dynamique est ultramétrique alors que la statique ne possède pas de structure hiérarchique complexe. Nous aborderons également la question des corrections de temps fini aux relations de fluctuation dissipation, ainsi que les extensions à plusieurs niveaux du modèle de pièges, ce qui nous permettra d'argumenter que l'ultramétrie dynamique devrait être générique à temps court (au début du régime de vieillissement) pour ce type de modèles, dans l'ensemble de la phase vitreuse. Nous montrons enfin que les données expérimentales d'aimantation thermorémanente (TRM) confirment cette idée, et nous rappellerons le lien avec le bruit en $1/f$, déjà discuté dans ce contexte.

1.2.1 Fonction de corrélation au point critique

Le calcul de la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ à la température critique $T = T_g$ est détaillé en annexe, pour le modèle de pièges et pour le modèle Barrat-Mézard. De manière très intéressante, il s'avère que l'expression asymptotique de la fonction de corrélation est la même dans les deux modèles, ce qui suggère que les propriétés de vieillissement au point critique présentent un certain degré d'universalité. Plus précisément, dans la limite où $\ln t_w$ et t sont tous les deux grands, on obtient au premier ordre d'un développement en $1/\ln t_w$:

$$C(t_w, t_w + t) \simeq \frac{\ln(1 + \frac{t_w}{t})}{\ln t_w} \quad (1.55)$$

Cette relation montre que $C(t_w, t_w + t)$ n'est pas une fonction de t/t_w , à l'inverse du comportement générique obtenu dans l'ensemble de la phase vitreuse $T < T_g$ [41]. Au contraire, en prenant $t \sim at_w^\alpha$, on obtient dans la limite $t_w \rightarrow \infty$:

$$C(t_w, t_w + t) = \mathcal{C}(\alpha) \quad (1.56)$$

où $\mathcal{C}(\alpha)$ est donné par :

$$\mathcal{C}(\alpha) = 1 - \alpha \quad (\alpha < 1), \quad \mathcal{C}(\alpha) = 0 \quad (\alpha \geq 1) \quad (1.57)$$

Remarquons que $\mathcal{C}(\alpha)$ est une fonction monotone décroissante de α . Une relation semblable a été trouvée récemment dans le modèle des électeurs [74], pour lequel la fonction de corrélation $C_{\text{vot}}(t_w, t_w + t)$ définie par :

$$C_{\text{vot}}(t_w, t_w + t) = \langle S(t_w)S(t_w + t) \rangle \quad (1.58)$$

est donnée par la relation :

$$C_{\text{vot}}(t_w, t_w + t) = \frac{\ln(1 + \frac{2t_w}{t})}{\ln t_w} \quad (1.59)$$

au premier ordre en $1/\ln(t_w)$, qui se réduit dans la limite des temps asymptotiquement grands à $C_{\text{vot}}(t_w, t_w + t) = \mathcal{C}(\alpha)$, avec le même $\mathcal{C}(\alpha)$ que pour le modèle de pièges. De surcroît, des résultats numériques sur le modèle d'Edwards-Anderson en dimension $d = 4$ et $d = 6$, obtenus pour une température $T = 0.5T_c$, semblent confirmer cette dépendance temporelle de la corrélation [151].

Il est important de noter que la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ apparaît comme une fonction de $\alpha = \ln t / \ln t_w$ qui ne peut s'écrire sous la forme d'une fonction du rapport $h(t_w + t)/h(t_w)$, quelle que soit la fonction h choisie.³ Ce rapport apparaît naturellement, avec une fonction h inconnue, dans la partie vieillissante de la solution des équations dynamiques correspondant aux modèles de verres de spins en champ moyen avec une brisure à un pas de la symétrie des répliques. Toutefois, pour les modèles à brisure continue de la symétrie des répliques, pour lesquels on s'attend à ce que l'ultramétrie dynamique soit vérifiée, la fonction de corrélation $\tilde{C}(t_w, t_w + t)$ est donnée par une somme infinie de contributions provenant des différents secteurs temporels [62, 40] :

$$\tilde{C}(t_w, t_w + t) = \sum_i \mathcal{C}_i \left(\frac{h_i(t_w + t)}{h_i(t_w)} \right) \quad (1.60)$$

où les h_i sont des fonctions (croissantes) inconnues définissant la $i^{\text{ème}}$ échelle de temps, et où l'on suppose que les \mathcal{C}_i décroissent vers 0 de manière monotone à grands arguments. Une forme utile pour $h_i(u)$, qui n'a pas reçu pour l'instant de justification théorique, mais qui permet d'illustrer la relation précédente, s'écrit [40] :

$$h_i(u) = \exp \left[\frac{u^{1-\nu_i}}{1-\nu_i} \right], \quad 0 \leq \nu_i \leq 1 \quad (1.61)$$

Il est facile de voir que pour ce choix de h_i , l'échelle de temps sur laquelle le rapport $h_i(t_w + t)/h_i(t_w)$ varie de manière significative est précisément $t_w^{\nu_i}$. Le cas $\nu = 0$ correspond donc à la dynamique stationnaire, alors que $\nu = 1$ donne du vieillissement simple. Si on prend maintenant $t = t_w^\alpha$ (avec $0 < \alpha < 1$) dans l'Eq. (1.60), ainsi que la limite $t_w \rightarrow \infty$, tous les secteurs tels que $\nu_i < \alpha$ ont relaxé vers 0, alors que les secteurs correspondant à $\nu_i > \alpha$ n'ont encore pas commencé à décroître. En introduisant un continuum de valeurs de ν , on trouve que la fonction de corrélation est donnée par :

$$\tilde{C}(t_w, t_w + t_w^\alpha) = \int_\alpha^1 d\nu \rho(\nu) \mathcal{C}_\nu(1) \quad t_w \rightarrow \infty \quad (1.62)$$

³En particulier, cette dépendance fonctionnelle est significativement différente de celle en $\ln(t_w + t)/\ln t_w$ trouvée dans les modèles de gouttelettes des verres de spins, malgré une ressemblance apparente.

où $\rho(\nu)$ est la “densité” de secteurs temporels d’ordre t_w^ν , et $C_\nu(1)$ est la valeur initiale de la corrélation dans ce secteur. A partir de ce résultat, on voit que $\tilde{C}(t_w, t_w + t)$ devient en effet une fonction de $\alpha = \ln t / \ln t_w$ dans la limite des temps longs. Par conséquent, la superposition d’une infinité de contributions *sous-vieillesse* définies par l’Eq. (1.61) conduit naturellement à une fonction de corrélation qui dépend de $\ln t / \ln t_w$, pour laquelle l’ultramétrie dynamique s’avère explicite. Le modèle de pièges critique correspond ainsi à une contribution uniforme de tous les secteurs, à savoir $\rho(\nu)C_\nu(1) = 1, \forall \nu$.

1.2.2 Ultramétrie dynamique

Nous allons montrer maintenant que $C(t_w, t_w + t)$, à la température critique, est ultramétrique dans le sens défini ci-dessus. Pour alléger les expressions, on peut introduire les notations suivantes :

$$C(t_1, t_2) = C_1 \quad C(t_2, t_3) = C_2 \quad C(t_1, t_3) = C_3 \quad t_1 < t_2 < t_3 \quad (1.63)$$

En supposant que $C(t, t')$ (avec $t < t'$) est une fonction croissante de t et décroissante de t' , ce qui est une propriété très générale, on obtient aisément que $C_3 \leq \min(C_1, C_2)$. Nous devons simplement montrer que l’une au moins des deux corrélations C_1 et C_2 est égale à C_3 . Afin de prendre la limite des temps infinis, il est nécessaire de spécifier la relation imposée entre les trois temps. Une paramétrisation naturelle, justifiée par le fait qu’elle conduit à des valeurs non triviales des C_i , est la suivante :

$$t_3 - t_1 \sim a t_1^\alpha \quad , \quad t_2 - t_1 \sim b t_1^\beta \quad (1.64)$$

avec bien entendu $\beta \leq \alpha$. Il faut maintenant distinguer entre plusieurs cas :

- Si $\beta < \alpha$, on a pour $t_1 \rightarrow \infty$:

$$t_3 - t_2 \sim a t_1^\alpha - b t_1^\beta \sim a t_1^\alpha \quad (1.65)$$

de sorte que $C_1 = \mathcal{C}(\beta)$ et $C_2 = C_3 = \mathcal{C}(\alpha) < \mathcal{C}(\beta)$.

- Au contraire, si $\beta = \alpha$, on obtient $C_1 = C_3 = \mathcal{C}(\alpha)$, ainsi que $C_2 \geq C_3$.

Par conséquent, nous avons bien montré que la relation $C_3 = \min(C_1, C_2)$ était satisfaite dans tous les cas, ce qui implique que ce modèle vérifie l’ultramétrie dynamique. L’apparition de l’ultramétrie dynamique peut d’ailleurs être considérée comme une signature de l’existence d’une multiplicité d’échelles de temps impliquées dans la dynamique. C’est justement le cas de ce modèle, même s’il n’y a pas de structure en arbre des états pour rendre compte de cette hiérarchie d’échelles de temps. Cette propriété provient en fait de l’exact compensation, à la température critique, du poids de Boltzmann $e^{E/T}$ ($E > 0$ est la barrière d’énergie) et du facteur entropique $\rho(E)$: la probabilité pour la particule d’avoir une énergie donnée (ou, de manière équivalente, un temps de piégeage donné, en échelle logarithmique), est essentiellement uniforme sur l’intervalle $[0, T_g \ln t_w]$.

En d'autres termes, l'ultramétrie dynamique s'avère être ici une conséquence de l'invariance d'échelle critique.

1.2.3 Analyse à temps fini

Une analyse intéressante a été proposée par Cugliandolo et Kurchan dans le cadre de l'étude dynamique du modèle SK [62]. Ces auteurs ont fait l'hypothèse que, dans la limite des temps infinis, il existe une fonction $f(x, y)$, non nécessairement continue, telle que $C_3 = f(C_1, C_2)$. Nous avons montré au paragraphe précédent qu'une telle fonction existait bien dans le cas présent et qu'elle était donnée par $f(x, y) = \min(x, y)$.

Une représentation utile, proposée en Réf. [62], est de tracer les courbes de niveau de f dans le plan (C_1, C_2) , autrement dit les courbes correspondant à C_3 constant, avec $C_3 = f(C_1, C_2)$, qui se réduisent dans notre cas à deux segments de droites ($C_1 = C_3$ et $C_2 = C_3$) à angle droit. Pour des temps grands, mais finis, cette fonction f doit inclure des corrections de temps fini, de sorte que $C_3 = F(C_1, C_2; t_1)$, avec $f(x, y) = \lim_{t_1 \rightarrow \infty} F(x, y; t_1)$. La représentation dans le plan (C_1, C_2) est ainsi un bon moyen de visualiser la convergence vers la fonction asymptotique $f(C_1, C_2)$. Elle a été utilisée avec les données numériques pour tester si l'ultramétrie dynamique apparaît dans certains modèles, sans arriver pour autant à des conclusions définitives [62, 23], mis à part dans quelques cas particuliers telle qu'une étude récente du modèle d'Edwards-Anderson à quatre dimensions [150].

Appliquons maintenant cette procédure au modèle de pièges critique. Afin de manipuler des équations valables à temps finis (mais grands), nous devons repartir de l'Eq. (1.55), reformulée de la manière suivante :

$$C(t_i, t_j) = \frac{\ln(1 + \frac{t_i}{t_j - t_i})}{\ln t_i} \quad t_i < t_j \quad (1.66)$$

Il faut noter que tous les résultats à temps finis présentés dans cette partie doivent être entendus comme des développements au premier ordre en $1/\ln t_1$. En inversant ces relations pour exprimer t_2 et t_3 en fonction de t_1 , C_1 et C_3 , on peut écrire une expression explicite pour $F(C_1, C_2; t_1)$:

$$C_3 = F(C_1, C_2; t_1) = -\frac{1}{\ln t_1} \ln(t_1^{-C_1} + t_1^{-C_2}(1 - t_1^{-C_1})^{1+C_2}) \quad (1.67)$$

Afin de tracer les courbes définies par C_3 constant, il est plus commode d'exprimer C_2 comme une fonction $G(C_1, C_3; t_1)$:

$$C_2 = G(C_1, C_3; t_1) = \frac{\ln(1 - t_1^{-C_1}) - \ln(t_1^{-C_3} - t_1^{-C_1})}{\ln t_1 - \ln(1 - t_1^{-C_1})} \quad (1.68)$$

Les courbes correspondantes dans le plan C_1, C_2 sont présentées sur la Fig. 1.5 (gauche) pour $C_3 = 0.1, 0.3, 0.5$ et 0.7 , et pour trois temps distincts ($t_1 = 10^5$,

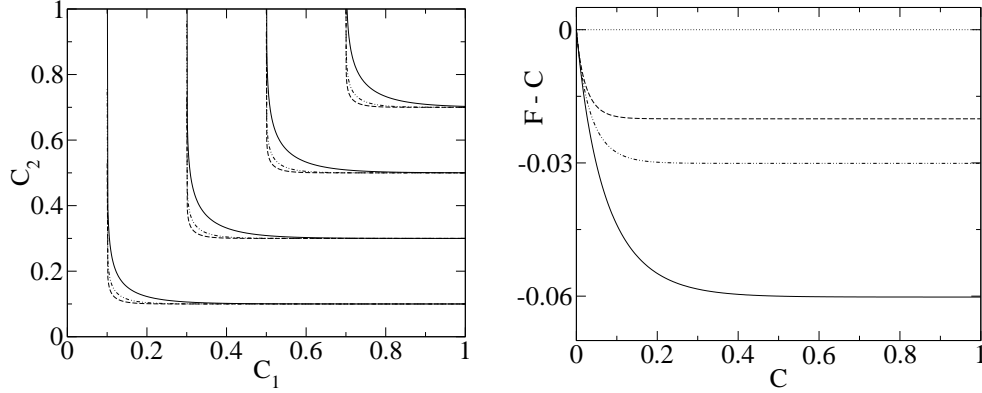


FIG. 1.5 – *A gauche* : courbes correspondant à $C_3 = F(C_1, C_2; t_1)$ constant dans le plan (C_1, C_2) ; de gauche à droite, les courbes correspondent à $C_3 = 0.1, 0.3, 0.5$ et 0.7 . Chaque groupe de trois courbes montre la convergence avec t_1 vers la fonction asymptotique $f(C_1, C_2) = \min(C_1, C_2)$ avec $t_1 = 10^5$ (trait plein), 10^{10} (tirets / pointillés), 10^{15} (tirets). *A droite* : $F(C, C; t_1) - C$ en fonction de C pour les mêmes valeurs de t_1 que sur la figure de gauche. La droite en pointillés, correspondant à $f(C, C) = C$ dans la limite $t_1 \rightarrow \infty$, a été ajoutée à titre de comparaison. L'écart à la droite limite est presque indépendant de C , sauf pour $C \ll 1$.

10^{10} et 10^{15}). Notons que cette convergence est très lente près de la singularité $C_1 = C_2$.

Cugliandolo et Kurchan ont aussi introduit en Réf. [62] la notion d'échelle de temps de corrélation à travers la représentation de $f(C, C)$ en fonction de C . Comme nous l'avons déjà mentionné, cette fonction vérifie l'inégalité $f(C, C) \leq C$. Il peut alors exister des points fixes C^* tels que $f(C^*, C^*) = C^*$, et chacun de ces points fixes est associé à une échelle de temps de corrélation. Si l'ultramétrie dynamique est satisfaite sur un secteur temporel particulier, correspondant à des valeurs de corrélation comprises entre C' et C'' , tous les C appartenant à cet intervalle $[C', C'']$ sont des points fixes. Dans notre cas, l'ultramétrie est vérifiée sur tout l'intervalle de corrélation $[0, 1]$. Mais dans ce modèle, on peut aller au-delà de l'analyse à temps infini et quantifier la convergence de $F(C, C; t_1)$ avec t_1 vers la fonction asymptotique $f(C, C) = C$. On trouve :

$$F(C, C; t_1) = C - \frac{\ln(1 + (1 - t_1^{-C})^{1+C})}{\ln t_1} \quad (1.69)$$

Pour $C > 0$, cette expression se simplifie lorsque $t_1 \gg 1$:

$$F(C, C; t_1) \simeq C - \frac{\ln 2}{\ln t_1} \quad (1.70)$$

A l'ordre dominant, cette correction ne dépend pas de C , au moins lorsque C n'est

pas trop proche de 0. La Fig. 1.5 (droite) présente $F(C, C; t_1) - C$, pour les mêmes valeurs de t_1 que précédemment, afin de mettre en évidence cette convergence.

Le dernier résultat peut s'interpréter également dans le cadre de la Fig. 1.5 (gauche). Pour une valeur donnée de C_3 , le point $C(t_1)$ défini par la relation $F(C(t_1), C(t_1); t_1) = C_3$ converge vers la singularité à angle droit $C_1 = C_2 = C_3$ comme - cf. Eq. (1.70) :

$$C(t_1) \simeq C_3 + \frac{\ln 2}{\ln t_1} \quad (1.71)$$

Cette correction logarithmique explique sans doute, si on la suppose relativement générique, pourquoi il semble si difficile d'observer la convergence vers la relation ultramétrique dans les données expérimentales ou numériques, pour lesquelles seulement quelques décades (habituellement entre quatre et six) sont disponibles.

1.2.4 Effet d'un forçage externe

L'effet d'un forçage externe (ou "cisaillement") sur la dynamique de vieillissement a déjà été étudié dans le contexte des modèles de champ moyen [23] et dans une généralisation du modèle de pièges décrivant le comportement des "matériaux vitreux mous", le modèle SGR [149, 147, 81]. Dans les deux modèles, le vieillissement est interrompu par le forçage pour t_w supérieur à une échelle de temps τ_r qui diverge lorsque le "taux de cisaillement" $\dot{\gamma}$ tend vers 0. Dans le modèle SGR, cette échelle de temps est donnée par :

$$\tau_r \simeq \frac{1}{\dot{\gamma}} \left(\ln \frac{1}{\dot{\gamma}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.72)$$

Dans la limite où le temps d'attente t_w est nettement plus grand que τ_r , la dynamique du modèle devient stationnaire. En première approximation, la distribution en loi de puissance des temps de piégeage $p(\tau)$ n'est pas affectée par le forçage pour $\tau \ll \tau_r$, alors que pour $\tau \gg \tau_r$, $p(\tau)$ décroît exponentiellement. En considérant maintenant la fonction de corrélation $C(t, \dot{\gamma})$, on trouve le même résultat que précédemment, en remplaçant simplement t_w par τ_r :

$$C(t, \dot{\gamma}) = C \left(\frac{\ln t}{\ln \tau_r} \right) \simeq 1 - \frac{\ln t}{\ln \tau_r} \quad t \ll \tau_r \quad (1.73)$$

Comme cela a été discuté en Réfs. [23, 150], l'ultramétrie dynamique se manifeste dans ce contexte par l'apparition d'une infinité d'échelles de temps dans la limite $\tau_r \rightarrow \infty$ (c'est-à-dire $\dot{\gamma} \rightarrow 0$) : le temps nécessaire à la fonction de corrélation pour décroître jusqu'à une certaine valeur c diverge comme τ_r^{1-c} (cf. [112] pour une discussion plus approfondie de ce point). Notons également qu'une loi d'échelle en $\ln t / \ln \tau_r$ a déjà été proposée afin d'ajuster des données numériques [23].

1.2.5 Rapport de fluctuation dissipation

Il est également intéressant d'étudier le rapport de fluctuation dissipation X dans le modèle de pièges au point critique.⁴ Ce rapport est défini comme :

$$X(t_1, t_2) = \frac{TR(t_1, t_2)}{\partial C(t_1, t_2)/\partial t_1} \quad (1.74)$$

où $R(t_1, t_2)$ est la réponse au temps $t_2 > t_1$ à un faible champ appliqué au temps t_1 [41, 80, 148]. Dans le modèle de pièges, où le champ modifie uniquement le temps de séjour du site de départ, on trouve que la relation suivante est valable en toute généralité, sans hypothèse de stationnarité :

$$TR(t_1, t_2) = -\frac{\partial C(t_1, t_2)}{\partial t_2} \quad (1.75)$$

En utilisant ce résultat, on voit que dans la phase "liquide" $T > T_g$, pour laquelle toutes les fonctions à deux temps ne dépendent que de la différence des temps, le théorème de fluctuation dissipation (FDT) usuel est valable et $X = 1$. Au contraire, dans la phase vitreuse $T < T_g$, on trouve que $X(t_1, t_2) = t_1/t_2$: la valeur de X reste non triviale dans tout le régime d'échelle $t_2 - t_1 \sim t_1$. Au point critique $T = T_g$, on peut exprimer X au premier ordre en $1/\ln t_1$ comme :

$$X(t_1, t_2) = \frac{(t_1^C - 1)^2}{t_1^C(t_1^C + 1 - C)} \quad C \equiv C(t_1, t_2) > 0 \quad (1.76)$$

Par conséquent, pour toute valeur $C > 0$ fixée, X tend vers 1 dans la limite $t_1 \rightarrow \infty$. Nous montrons sur la Fig. 1.6 (gauche) le graphe classique de la réponse intégrée $\chi(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} R(t', t_2) dt'$ en fonction de $C(t_1, t_2)$, paramétré par $t_1 < t_2$ (à t_2 fixé), qui doit donner une droite de pente $-1/T_g$ lorsque le FDT s'applique. Là encore, on constate une convergence très lente vers le résultat asymptotique $X = 1$. Remarquons que même si la paramétrisation par t_1 à t_2 fixé n'est pas la plus usuelle ni la plus intuitive, c'est la seule qui garantisse que la pente locale est bien égale à $-X(t_2, t_1)/T$ lorsque la courbe limite n'est pas encore atteinte – cf. Eq. (1.74).

1.2.6 Modèle de pièges à plusieurs niveaux et discussion

Le modèle de pièges simple dont nous venons de décrire le comportement critique peut être considéré comme un modèle à un pas de brisure de symétrie des répliques. Afin de généraliser ce modèle au cas de la brisure continue de symétrie des répliques, il a été proposé en Réf. [41] (et développé davantage en Réf. [141]) de suivre la procédure de Parisi pour la solution statique. Sans rentrer dans les détails, cela signifie que chaque piège est divisé, de manière récursive

⁴Il faut noter que la notion de comportement critique hors d'équilibre qui apparaît ici est assez différente de celle correspondant au cas de la croissance de domaines ferromagnétiques par exemple [86, 87].

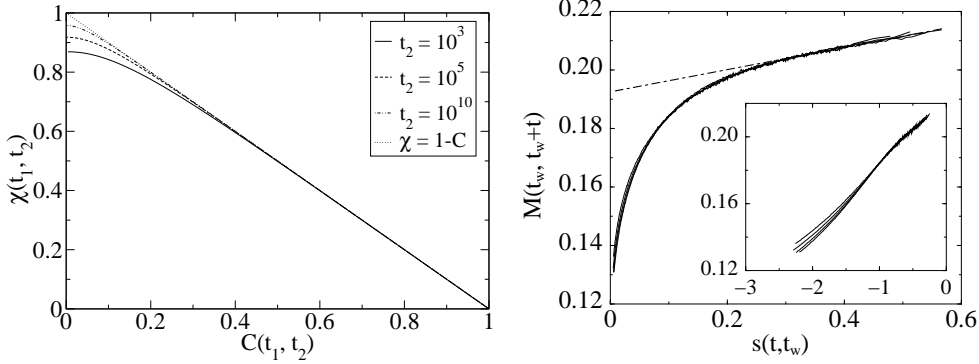


FIG. 1.6 – *A gauche : graphe de la réponse intégrée $\chi(t_1, t_2)$ en fonction de $C(t_1, t_2)$ paramétré par t_1 (avec $t_1 < t_2$), pour $t_2 = 10^3, 10^5$ et 10^{10} . La pente locale vaut $-X(t_1, t_2)$ ($T_g = 1$), et elle converge très lentement vers la valeur asymptotique $-1/T_g$ pour les petites valeurs de C . A droite : données expérimentales de TRM dans un verre de spins $AgMn$ à $T = 0.75T_g$; $M(t_w, t_w + t)$ est tracé en fonction de la variable $s(t, t_w)$ définie dans le texte, pour $t_w = 300, 1000, 3000$ et $10000s$. La remise à l'échelle est bonne pour $s > 0.3$ environ (soit $\ln t / \ln t_w < 0.7$), mais elle devient inadaptée pour des temps plus longs (cf. encart où M est tracé en fonction de $\ln s$). La droite en pointillés est un ajustement affine des données à temps court.*

et hiérarchique, en une nouvelle série de pièges. Chaque niveau k de pièges est caractérisé par un certain recouvrement entre les états q_k et par une distribution exponentielle des énergies de barrières, avec une température critique T_g^k qui dépend du niveau considéré. Ces températures critiques sont reliées à la fonction de Parisi $x_k = x(q_k)$ par $T_g^k = T/x_k$, et satisfont les relations $T_g^k < T_g^{k-1}$. A toute température, les niveaux de l'arbre correspondant à $q > q_{EA}(T)$, où q_{EA} est le paramètre d'Edwards-Anderson, sont tels que $x_k > 1$, de sorte que ces niveaux sont équilibrés à temps long (car $T_g^k < T$).

Dans le modèle de pièges à un seul niveau, la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ en régime de vieillissement ($T < T_g$) se comporte à temps court comme :

$$C(t_w, t_w + t) \simeq 1 - \frac{\sin \pi x}{\pi(1-x)} \left(\frac{t}{t_w} \right)^{1-x} \quad 1 \ll t \ll t_w \quad (1.77)$$

avec $x = T/T_g$. Dans le modèle avec un nombre fini M de niveaux, la fonction de corrélation totale est définie par :

$$C(t_w, t_w + t) = \sum_{k=0}^M q_k [C_k(t_w, t_w + t) - C_{k+1}(t_w, t_w + t)]$$

$$= q_0 + \sum_{k=1}^M (q_k - q_{k-1}) C_k(t_w, t_w + t) \quad (1.78)$$

$C_k(t_w, t_w + t)$ étant la probabilité que le marcheur n'ait jamais sauté au-delà du niveau k de l'arbre entre t_w et $t_w + t$, avec la convention $C_0(t_w, t_w + t) = 1$ et $C_{M+1}(t_w, t_w + t) = 0$ [41]. A partir de cette définition, on voit que $C(t_w, t_w + t)$ est dominé à temps court par les niveaux k tels que $x_k \simeq 1$, pour lesquels la singularité est la plus forte (nous supposons ici que $T < T_g^0$, autrement dit qu'un niveau au moins est dans la phase de vieillissement). On s'attend donc à observer l'ultramétrieité dynamique associée au niveau k^* pour lequel $x_{k^*} = 1$ dans le régime de temps court défini par $\ln t / \ln t_w < 1$, avant que le régime en t/t_w associé aux niveaux $k < k^*$ n'apparaisse – rappelons que si $C(t_w, t_w + t)$ est une fonction de t/t_w , alors la fonction $f(x, y)$ définie plus haut ne peut être égale à $\min(x, y)$.

Il est important de noter que cette ultramétrieité à temps court existe pour le modèle de pièges hiérarchique dans toute la phase basse température, mais elle n'est pas reliée à l'ultramétrieité statique due à la structure en arbre, cette dernière ayant pour but de rendre compte de la solution statique de Parisi avec brisure continue de symétrie des répliques. Ainsi, l'origine de l'ultramétrieité dynamique dans le modèle de pièges généralisé apparaît comme très différente de celle trouvée dans les modèles de verres de spins en champ moyen, puisqu'elle est dans notre cas liée à la dynamique critique de l'un des niveaux, et la hiérarchie d'échelles de temps ne peut être associée à la hiérarchie des niveaux. Par contre cette structure en arbre permet l'existence d'un niveau critique pour toute température $T < T_g^0$. L'interprétation physique des deux scénarios s'avère donc radicalement différente, même si une partie de la phénoménologie est très similaire.

Les expériences de vieillissement dans les verres de spins ont été interprétées dans le cadre de ce modèle hiérarchique [41]. Le besoin de recourir à plusieurs niveaux ne provient pas seulement des phénomènes de rajeunissement et de mémoire dans les expériences de saut en température, mais aussi de la forme détaillée des courbes d'aimantation thermorémanente (TRM) à une température donnée, qui montrent que les singularités à temps court et à temps long sont décrites par des exposants x_k distincts [159]. L'exposant à temps court $x \simeq 0.8$ se révèle notablement différent de celui à temps long, $x \simeq 0.2$.

Comme cela a été discuté en Réfs. [9, 38], il est naturel d'interpréter les niveaux de la hiérarchie en termes d'échelles de longueur, en associant une valeur de $x = x(\ell)$ à chaque échelle de longueur ℓ de telle sorte que $x(\ell) \sim \ell^{-\theta}$, avec $\theta > 0$. On peut donc s'attendre à ce que pour toute température dans la phase vitreuse, il existe une échelle de longueur "critique" ℓ^* telle que $x(\ell^*) = 1$. Cette échelle de longueur particulière va ainsi contribuer à la corrélation et à la réponse comme une fonction de $\ln t / \ln t_w$.

Nous avons réanalysé certaines données de TRM expérimentales dans l'esprit de la présente discussion, en supposant de manière autocohérente que le FDT

est vérifié dans le régime $t \ll t_w$. Nous montrons sur la Fig. 1.6 (droite) la décroissance de la TRM $M(t_w, t_w + t)$ dans AgMn à $T = 0.75T_g$ [2, 134, 1], tracée comme une fonction de la variable $s(t, t_w) = \ln(1 + t_w/t)/\ln t_w$, comme suggéré par l'Eq. (1.55). Cette figure montre que la remise à l'échelle des données est très bonne à temps court, mais n'est plus vérifiée pour les grandes valeurs de t/t_w , correspondant à $s(t, t_w)$ petit. Partant de l'Eq. (1.78), on s'attend d'ailleurs à observer la somme d'une contribution $\mathcal{M}(k < k^*)$ des niveaux k tels que $k < k^*$, qui dépendrait seulement de t/t_w , d'une contribution des niveaux $k \simeq k^*$ proportionnelle à $s(t, t_w)$, et finalement d'une contribution stationnaire des niveaux $k > k^*$, que l'on peut supposer faible en première approximation. Lorsque $\alpha = \ln t/\ln t_w < 1$, la première contribution varie peu, puisque $(t/t_w)^{1-x_k} = t_w^{(\alpha-1)(1-x_k)}$ est très faible pour les grands t_w , alors que la seconde contribution est une fonction de α . Ceci suggère que dans le régime de temps court, on devrait observer :

$$M(t_w, t_w + t) = \mathcal{M}(k < k^*) + m_1 s(t, t_w), \quad (1.79)$$

où m_1 est un préfacteur inconnu. La quantité $\varphi = m_1/(\mathcal{M}(k < k^*) + m_1)$ mesure la contribution relative des niveaux $k < k^*$ et $k \simeq k^*$ dans la décroissance totale du signal. La ligne pointillée sur la Fig. 1.6 (droite) est un ajustement linéaire de la décroissance initiale, en fonction de s , à partir duquel on peut extraire (dans cet exemple particulier) $\varphi \simeq 0.2$.

Dans les formules ci-dessus, le temps est mesuré implicitement en prenant comme unité le temps microscopique τ_0 . La valeur de τ_0 n'est pas nécessairement le temps associé au retournement d'un spin, d'ordre $10^{-12}s$, car des effets dynamiques collectifs peuvent exister au voisinage du point de transition [75, 43]. Sur la Fig. 1.6, nous avons choisi $\tau_0 = 10^{-5}s$ pour obtenir la meilleure remise à l'échelle. Cette valeur est également très proche de celle extraite de l'analyse faite en Réf. [75].

La conclusion est que les données de TRM sont en effet compatibles avec un comportement en $\ln t/\ln t_w$ à temps court (au sens $1 \ll t \ll t_w$). Notons que ce comportement est équivalent à une variation logarithmique de la susceptibilité alternative, ou au bruit en $1/f$. Il a été montré dans des travaux antérieurs [41, 141] que l'existence de niveaux au voisinage de $x = 1$ conduit génériquement au bruit en $1/f$ à temps long et à basse fréquence, car la contribution des autres niveaux (de k supérieur ou inférieur à k^*) devient négligeable dans ce régime. Nous avons ainsi montré que les degrés de libertés qui contribuent au bruit en $1/f$ donnent également naissance à l'ultramétrie dynamique.

1.3 Températures effectives dans les systèmes vitreux

Nous poursuivons maintenant notre démarche visant à mieux comprendre les notions issues des théories de champ moyen des verres en les mettant en

œuvre dans des modèles simples, et le dernier thème que nous allons aborder est celui de la température effective. Cette notion trouve ses origines dans des approches empiriques déjà anciennes, et il serait plus correct dans ce cas de parler de température fictive [156, 133, 132, 64], mais elle a acquis ses lettres de noblesse grâce aux développements des théories dynamiques des verres en champ moyen. Nous commencerons par citer brièvement les résultats bien établis concernant cette notion, grâce aux relations de fluctuation-dissipation, avant d'en cerner certaines limites et de citer quelques solutions alternatives proposées dans la littérature, ayant certes des fondations moins solides. Nous présenterons ensuite nos propres résultats sur ce thème, en commençant par un modèle très simple, à savoir un système à deux niveaux maintenu hors d'équilibre par un forçage externe aléatoire. Malgré sa simplicité, nous verrons que les différentes grandeurs physiques caractérisant ce modèle sont décrites par (au moins) deux températures effectives distinctes, toutes deux supérieures à la température du bain thermique. Nous essaierons également de comprendre pourquoi les modèles de dynamique vitreuse dans l'espace des phases (modèle de pièges ou de Barrat-Mézard) ne permettent pas de définir une température effective, excepté dans certains cas très spécifiques [139]. Enfin, nous proposerons en tant que piste de réflexion une conjecture sur une autre approche possible de la notion de température effective, centrée sur l'entropie, et qui permet de faire le lien sous certaines hypothèses entre différentes manières intuitives de comprendre la signification physique de cette notion.

1.3.1 Un bref survol de l'état des connaissances

Les relations de fluctuation dissipation : une base solide...

Bien que les systèmes hors d'équilibre comme les verres ou ceux présentant de la croissance de domaines ne puissent pas être décrits par le formalisme thermodynamique habituel, il a été montré que l'on peut donner un sens précis à la notion de température dans de tels systèmes en régime de vieillissement, ce qui amène à définir une température différente de celle du bain thermique dans lequel le système est plongé. Pour un système à l'équilibre à la température T , les relations de fluctuation dissipation (RFD) reliant la fonction de corrélation $C(t)$ à la fonction de réponse $R(t)$ s'écrivent :

$$R(t) = -\frac{1}{T} \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1.80)$$

Cette relation peut être généralisée au régime de vieillissement, en introduisant un paramètre $T_{\text{eff}}(t_w, t_w + t)$ pour relier la corrélation $C(t_w, t_w + t)$ à la réponse $R(t_w, t_w + t)$ [64] :

$$R(t_w, t_w + t) = \frac{1}{T_{\text{eff}}(t_w, t_w + t)} \frac{\partial}{\partial t_w} C(t_w, t_w + t) \quad (1.81)$$

Dans certains modèles de dynamique vitreuse en champ moyen (modèle p-spin en particulier), on peut montrer que pour des régimes temporels particuliers, $T_{\text{eff}}(t_w, t_w + t)$ est une constante T_{eff} , différente de la température T du bain. De plus, cette définition de T_{eff} satisfait les propriétés fondamentales d'une température, notamment le fait que le flux d'énergie entre deux systèmes est spontanément dirigé de celui dont la température est la plus haute vers celui dont la température est la plus basse, ce qui justifie ainsi le nom de "température effective" qui lui a été conféré. Il est commode d'introduire la réponse intégrée $\chi(t_w, t_w + t)$ par la relation :

$$R(t_w, t_w + t) = -\frac{\partial}{\partial t_w} \chi(t_w, t_w + t) \quad (1.82)$$

On peut alors représenter dans un graphe paramétrique χ en fonction de C , comme nous l'avons d'ailleurs fait plus haut pour le modèle de pièges au point critique. Dans une telle représentation, un régime temporel dans lequel T_{eff} est constant apparaît comme un segment de droite. Pour tester l'existence d'une température effective dans un système vitreux, il suffit donc de chercher si la représentation paramétrique χ en fonction de C converge vers une courbe linéaire, ou au moins linéaire par morceaux. Pour être plus précis, des relations linéaires par morceaux ne peuvent être utilisées pour définir de manière cohérente des températures effectives que si la corrélation possède plusieurs échelles de temps de décroissance, ce qui conduit à définir une température pour chaque échelle de temps. En passant à la limite d'une infinité d'échelle de temps, on voit que l'on peut encore définir une température effective même si la relation entre corrélation et réponse est complètement non linéaire. Cela nécessite néanmoins une dépendance temporelle bien spécifique pour la corrélation, qui conduit en général à l'ultramétrie dynamique. Dans les modèles réalistes tels que des liquides de Lennard-Jones à basse température, pour lesquels des températures effectives ont pu être définies, on observe en général deux régimes successifs de décroissance, dénommés respectivement β et α . Au premier régime β correspond une température égale à celle du bain, alors que le régime α donne naissance à une température effective T_{FD} le plus souvent supérieure à T . Ces deux régimes sont également observés expérimentalement sur des verres réels, mais pour l'instant la détermination expérimentale de températures effectives par les relations de fluctuation dissipation reste un problème ouvert, même si plusieurs études ont déjà été menées [93, 16, 95].

... mais un domaine d'application restreint

En revanche, certains modèles stochastiques simples comme le modèle de pièges [39, 129] ou le modèle Barrat-Mézard [14, 30] présentent des relations de fluctuation dissipation non linéaires (même par morceaux), bien que leur fonctions de corrélation et de réponse en régime de vieillissement ne décroissent que sur une seule échelle de temps caractéristique $t \sim t_w$, ce qui ne permet donc pas de définir une température effective de manière pertinente [80, 148, 139, 146]. Par

ailleurs, il faut noter que la température effective T_{FD} est *a priori* une quantité à deux temps. Si on la définit à partir des relations de fluctuation-dissipation en transformée de Fourier, ce qui était en fait la définition originale [64], elle devient une fonction de la fréquence ω et du temps d'attente t_w . Même si la notion de température effective ne prend tout son sens que si T_{FD} est indépendant de ω dans certaines plages de fréquence (et converge vers une limite pour $t_w \rightarrow \infty$), on peut cependant en donner une interprétation heuristique plus générale, quelle que soit la dépendance en ω , en supposant que T_{FD} est la "température" (dans un sens un peu vague) des modes de relaxation du système ayant une fréquence ω . Tout ceci suggère qu'il serait peut-être intéressant d'introduire une notion moins stricte de température effective, qui soit dans un sens à préciser une température moyennée sur les différents modes.

Pour définir des températures effectives dans un cadre plus général, sans qu'il soit nécessaire d'avoir une RFD linéaire, d'autres définitions alternatives ont été proposées dans la littérature, basées essentiellement sur des notions d'entropie configurationnelle. Remarquons à ce propos que la notion de température à l'équilibre thermodynamique possède de fortes connections avec l'entropie, alors que cette grandeur est assez peu présente dans le cadre des températures effectives liées aux RFD (voir cependant [60]). Dans ce contexte, elle est utilisée principalement pour définir la limite de faible production d'entropie dans laquelle les systèmes vitreux sont considérés. Une alternative populaire, développée à l'origine dans le cadre de l'étude des poudres et de la matière granulaire, consiste à considérer que la dynamique s'effectue principalement entre états bloqués (ce qui est finalement une vision proche de celle de la dynamique de pièges), et que le nombre d'états bloqués correspondant à une valeur donnée des paramètres extérieurs (volume, énergie...) permet de définir une entropie S_{Edw} . Les dérivés de cette entropie par rapport au volume et à l'énergie peuvent alors être identifiés respectivement comme la compactivité effective et la température effective. Dans les systèmes vitreux, une telle approche revient pour l'essentiel à identifier la valeur hors d'équilibre de l'énergie avec la valeur d'équilibre à une température effective, en général plus élevée. C'est aussi ce qui ressort de l'approche utilisée par Sciortino et collaborateurs [144], qui utilise la minimisation d'une énergie libre construite à partir d'une décomposition de la dynamique en pseudo-équilibre à l'intérieur des structures inhérentes, et en transition entre ces structures. Dans les deux approches, la température effective est en fin de compte définie en inversant la relation donnant l'énergie à l'équilibre en fonction de la température, $E_{eq}(T)$, pour donner $T(E)$, où E est alors la valeur hors d'équilibre de l'énergie.

1.3.2 Modèle à deux niveaux avec forçage aléatoire

Nous allons considérer un modèle très simple de système stochastique avec forçage externe aléatoire, qui nous avons introduit dans le cadre d'une collaboration avec P. Bonville et J. Hodges afin d'interpréter des résultats expérimentaux de spectroscopie Mössbauer dans des pyrochlores frustrés $Gd_2Sn_2O_7$ [35]. En effet,

lorsque l'on tente d'ajuster le spectre Mössbauer mesuré expérimentalement dans ces composés à une température $T = 27mK$ par un spectre théorique, on s'aperçoit que l'on doit utiliser une température d'ajustement d'environ $90mK$, bien supérieure donc à la température de l'expérience. Cela s'explique physiquement par les fluctuations du champ hyperfin, qui maintiennent les niveaux hyperfins hors de l'équilibre.

Afin de rendre compte d'une manière simplifiée de ces phénomènes, il est commode d'introduire un modèle à deux niveaux (*up* et *down*), décrit par une variable de spin $S = \pm m_0$, et soumis à un champ extérieur $H(t) = \pm H_0$ qui se renverse aléatoirement, avec une probabilité $1/\tau_f$ par unité de temps. Bien que ce modèle ait été proposé pour répondre à une question expérimentale bien précise, nous allons dorénavant nous affranchir du contexte initial, et considérer le modèle en toute généralité comme un modèle minimal de système thermique avec forçage externe, pour bien comprendre comment une température effective peut apparaître lorsqu'un système est maintenu hors d'équilibre.

Pour un système à deux niveaux, il est justifié de décrire la dynamique de relaxation à l'aide d'une seule constante de temps τ_r . En effet, l'opérateur d'évolution de l'équation maîtresse pour les probabilités $P_u(t)$ et $P_d(t)$ d'être dans les états *up* et *down* respectivement a deux valeurs propres : la première est nulle et correspond à l'équilibre de Boltzmann, et la seconde vaut $1/\tau_r$. Comme le champ aléatoire $H(t)$ est caractérisé par une probabilité de renversement $1/\tau_f$ par unité de temps, l'intervalle de temps entre deux renversements successifs est distribué suivant une loi exponentielle de moyenne τ_f :

$$\rho(t_f) = \frac{1}{\tau_f} e^{-t_f/\tau_f} \quad (1.83)$$

Pour déterminer les distributions des populations de chaque niveau, il apparaît plus simple, du fait des propriétés de symétrie du problème, d'utiliser l'aimantation $m(t)$ définie en associant à chacun des deux états un spin $S = \pm 1$:

$$m(t) = P_u(t) - P_d(t) \quad (1.84)$$

Au cours d'un intervalle de temps durant lequel $H(t)$ est constant, on peut calculer aisément l'expression de $m(t)$, que nous désignerons par $m^+(t)$ ou $m^-(t)$, selon le signe de $H(t)$. En supposant par exemple que $H(t)$ est positif entre les instants t_1 et t_2 , puis négatif entre t_2 et t_3 , on peut écrire, pour $t_1 \leq t \leq t_2$:

$$m^+(t) = m_0 [1 - e^{-(t-t_1)/\tau_r}] + m^-(t_1) e^{-(t-t_1)/\tau_r} \quad (1.85)$$

et pour $t_2 \leq t \leq t_3$:

$$m^-(t) = -m_0 [1 - e^{-(t-t_2)/\tau_r}] + m^+(t_2) e^{-(t-t_2)/\tau_r} \quad (1.86)$$

où $m_0 = \text{th}(H_0/T)$ est l'aimantation d'équilibre du système, à la température T et sous un champ statique H_0 . Puisque les instants t_i sont choisis aléatoirement,

nous devons déterminer la séquence des aimantations aléatoires correspondant à chaque instant de renversement, $m^-(t_{2i+1})$ et $m^+(t_{2i+2})$. Dans l'état stationnaire, ces deux quantités sont des variables aléatoires m^- et m^+ , avec une distribution de probabilité $\mathcal{P}_-(m^-)$ et $\mathcal{P}_+(m^+)$. Entre deux renversements, m^+ et m^- sont reliés par :

$$m^+ = m_0(1 - e^{-t_f/\tau_r}) + m^- e^{-t_f/\tau_r} \quad (1.87)$$

et réciproquement. De manière évidente, m^+ et m^- sont tous deux dans l'intervalle $[-m_0, m_0]$. Le fait que les distributions de probabilité soient stationnaires permet d'écrire l'équation suivante :

$$\mathcal{P}_+(m^+) = \int_{-m_0}^{m_0} dm^- \mathcal{P}_-(m^-) \int_0^{+\infty} dt_f \rho(t_f) \times \delta[m^+ - (m_0(1 - e^{-t_f/\tau_r}) + m^- e^{-t_f/\tau_r})] \quad (1.88)$$

Pour des raisons de symétrie, les distributions \mathcal{P}_+ et \mathcal{P}_- satisfont la relation suivante :

$$\mathcal{P}_-(m) = \mathcal{P}_+(-m) \quad (1.89)$$

de sorte que l'on obtient une équation impliquant une seule distribution. Afin de simplifier les notations, il est commode d'effectuer les changements de variable suivants :

$$u = e^{-t_f/\tau_r}, \quad y = \frac{m^+}{m_0}, \quad z = \frac{m^-}{m_0} \quad (1.90)$$

On a alors : $P_+(y) = m_0 \mathcal{P}_+(m^+)$, ce qui conduit à l'équation intégrale :

$$P_+(y) = \int_{-1}^1 dz P_+(-z) \int_0^1 \frac{\tau_r du}{u} \frac{u^{\tau_r/\tau_f}}{\tau_f} \delta[y - ((1 - u) + zu)] \quad (1.91)$$

En introduisant le rapport $\mu = \tau_r/\tau_f$, on trouve après quelques lignes de calcul :

$$P_+(y) = \mu(1 - y)^{\mu-1} \int_{-y}^1 \frac{P_+(z)}{(1 + z)^\mu} dz \quad (1.92)$$

On peut vérifier que la distribution Béta suivante est une solution exacte de cette équation intégrale :

$$P_+(y) = \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu)}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\mu)} (1 - y)^{\mu-1} (1 + y)^\mu \quad (1.93)$$

La distribution $P_-(y)$ s'en déduit par symétrie, puisque $P_-(y) = P_+(-y)$. Nous sommes maintenant intéressés par la distribution de l'aimantation $m(t)$ à un instant t quelconque, qui ne correspond pas nécessairement à un renversement. En supposant que les instants de renversement t_i sont donnés, choisissons aléatoirement un instant t , qui va ainsi être compris entre t_i et t_{i+1} . La distribution de probabilité de $\Delta t \equiv t - t_i$, sachant $t_f \equiv t_{i+1} - t_i$, est uniforme :

$$p(\Delta t|t_f) = \frac{1}{t_f} \theta(\Delta t) \theta(t_f - \Delta t) \quad (1.94)$$

Par ailleurs, la probabilité $\psi(t_f)$ de se trouver dans un intervalle de temps de longueur t_f est proportionnelle à t_f :

$$\psi(t_f) = \frac{t_f}{\tau_f^2} e^{-t_f/\tau_f} \quad (1.95)$$

On obtient donc pour la distribution globale de Δt :

$$p(\Delta t) = \int_0^\infty dt_f p(\Delta t|t_f) \psi(t_f) = \frac{1}{\tau_f} e^{-\Delta t/\tau_f} \quad (1.96)$$

Autrement dit, la distribution des Δt est identique à celle des τ_f , ce qui signifie simplement que les instants de renversement sont choisis de manière complètement aléatoire. Ainsi, les distributions $P_+(y)$ et $P_-(y)$ que nous avons calculées sont aussi celles qui gouvernent l'aimantation observée à un instant quelconque.

Cette distribution peut être utilisée pour calculer les populations moyennes des niveaux d'énergie, comme nous allons le faire au paragraphe suivant. Ici, nous mentionnons simplement le résultat obtenu pour la distribution globale $P(y)$ de l'aimantation adimensionnée, obtenue en moyennant sur les périodes de H positif et négatif. Comme les deux valeurs de H sont équiprobables, on peut écrire $P(y)$ sous la forme :

$$P(y) = \frac{1}{2} [P_+(y) + P_+(-y)] = \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu)}{\Gamma(\frac{1}{2}) \Gamma(\mu)} (1 - y^2)^{\mu-1} \quad (1.97)$$

qui est bien entendu une expression paire en y , ce qui conduit à une valeur nulle de l'aimantation. Notons que pour $\mu \rightarrow 0$, cette distribution tend vers deux distributions δ de Dirac en $y = \pm 1$, comme on pouvait s'y attendre. Il est d'ailleurs intéressant de constater que pour $\mu < 1$, les points $y = \pm 1$ restent les valeurs les plus probables de l'aimantation. Cela vient du fait que pour des renversements suffisamment espacés dans le temps, l'aimantation a le temps de converger vers sa valeur asymptotique. En revanche, lorsque les renversements deviennent trop fréquents (c'est-à-dire pour $\mu > 1$), la valeur la plus probable de l'aimantation devient $y = 0$. Pour les grandes valeurs de μ ($\mu \gg 1$), on obtient une distribution gaussienne de largeur égale à $1/\sqrt{\mu}$.

Il apparaît que l'on peut définir deux températures effectives différentes dans ce modèle, selon que l'on fasse référence aux populations des niveaux d'énergie, ou aux relations de fluctuation dissipation. Dans le premier cas, la démarche consiste à identifier les populations moyennes de chaque niveau d'énergie avec les populations d'équilibre à la température effective T_{eff} , ce qui peut toujours se faire dans un système à deux niveaux. Il faut cependant bien noter que nous considérons ici les niveaux d'énergie (H_0 et $-H_0$) et non les états de spins (*up* et *down*), le lien entre les deux n'étant défini que pour une valeur donnée du champ externe $H(t)$. Lorsque $H(t) = H_0$, l'état d'énergie le plus bas correspond à l'état de spin *up*, alors que pour $H(t) = -H_0$, il correspond à l'état *down*.

Les probabilités d'être dans l'état fondamental pour $H(t) = H_0$ et $H(t) = -H_0$, notées p_ℓ^+ et p_ℓ^- respectivement, sont données par :

$$\begin{aligned} p_\ell^+ &= \frac{1}{2}(1 + m^+) = \frac{1}{2}(1 + y m_0) \\ p_\ell^- &= \frac{1}{2}(1 - m^-) = \frac{1}{2}(1 - y m_0) \end{aligned} \quad (1.98)$$

Par conséquent, la population moyenne du niveau fondamental est obtenue par :

$$\langle p_\ell \rangle = \frac{1}{2} + \frac{m_0}{4} \int_{-1}^1 dy [y P_+(y) - y P_-(y)] \quad (1.99)$$

Cette expression se réécrit, grâce à la symétrie des distributions :

$$\langle p_\ell \rangle = \frac{1}{2} \left[1 + m_0 \int_{-1}^1 dy y P_+(y) \right] \quad (1.100)$$

En utilisant l'expression de $P_+(y)$ obtenue en Eq. (1.93), on trouve :

$$\langle y \rangle_{P_+} = \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu)}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\mu)} \frac{\Gamma(\frac{3}{2})\Gamma(\mu)}{\Gamma(\frac{3}{2} + \mu)} = \frac{1}{1 + 2\mu} \quad (1.101)$$

d'où l'on déduit que la population moyenne du niveau fondamental vaut :

$$\langle p_\ell \rangle (\mu, T) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{1 + 2\mu} \text{th}(H_0/T) \right) \quad (1.102)$$

On peut désormais identifier cette population moyenne avec une population d'équilibre à la température T_{eff} :

$$\langle p_\ell \rangle (\mu, T) = \frac{1}{2} (1 + \text{th}(H_0/T_{\text{eff}})) \quad (1.103)$$

On obtient alors la relation suivante entre T_{eff} , T et μ :

$$\text{th}(H_0/T_{\text{eff}}) = \frac{1}{1 + 2\mu} \text{th}(H_0/T) \quad (1.104)$$

qui redonne bien $T_{\text{eff}} = T$ pour $\mu \rightarrow 0$. Dans la limite $T \gg m_0 H_0$, cette expression se réduit à :

$$T_{\text{eff}} \simeq (1 + 2\mu) T \quad (1.105)$$

alors que pour $T \ll H_0$, la température effective tend vers une constante :

$$\text{th}(H_0/T_{\text{eff}}) \simeq \frac{1}{1 + 2\mu} \quad (1.106)$$

Grâce à la structure particulièrement simple de ce modèle à deux niveaux, les propriétés thermodynamiques (énergie moyenne, chaleur spécifique) sont précisément celles d'un système à deux niveaux sans forçage, à la température T_{eff} .

Par contre, les propriétés liées à l'aimantation (comme la susceptibilité) ne sont pas décrites par cette température effective, qui ne fait appel qu'aux niveaux d'énergie, et non pas aux états de spins. Nous allons donc étudier spécifiquement les relations de fluctuation dissipation dans ce modèle, en ne considérant pour simplifier que les grandeurs statiques, plutôt que les fonctions de corrélation et de réponse, qui nécessiteraient le recours à un formalisme plus complexe.

Pour étudier les relations de fluctuation dissipation, considérons N systèmes à deux niveaux indépendants, dans la limite thermodynamique. En associant à chacun d'eux un spin $S_i = \pm 1$, on peut introduire l'aimantation totale $M = \sum_{i=1}^N S_i$. Les relations de fluctuation dissipation les plus simples s'écrivent, à l'équilibre (sans forçage) :

$$\chi = \frac{1}{T}(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (1.107)$$

où χ est la susceptibilité statique $\chi = \partial \langle M \rangle / \partial h$. On peut aisément exprimer la variance de l'aimantation en fonction de l'aimantation moyenne par spin $m(t) = \langle M \rangle / N$:

$$\begin{aligned} \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 &= \sum_i \langle S_i^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle - N^2 m(t)^2 \\ &= N(1 - m(t)^2) \end{aligned} \quad (1.108)$$

Ces moyennes sont en fait des moyennes d'ensemble à un instant t donné, et il faut ensuite prendre la moyenne temporelle, notée $\langle \dots \rangle_t$, pour tenir compte des fluctuations liées au renversement du champ $H(t)$. On trouve alors :

$$N \langle 1 - m(t)^2 \rangle_t = N \left(1 - \frac{m_0^2}{1 + 2\mu} \right) \quad (1.109)$$

Il faut également calculer la susceptibilité statique, et pour cela refaire les calculs en appliquant un champ constant h , tel que $|h| \ll H_0$. En repartant de l'Eq. (1.88), convenablement modifiée pour tenir compte du champ h en remplaçant $m_0 = \text{th}H_0/T$ par $m_0^+ = \text{th}(H_0 + h)/T$, on obtient par intégration sur m^+ :

$$\langle m^+ \rangle_t = \frac{m_0^+}{1 + \mu} + \frac{\mu}{1 + \mu} \langle m_- \rangle_t \quad (1.110)$$

De même, l'équation de bilan similaire pour $\mathcal{P}_-(m_-)$ conduit à :

$$\langle m^- \rangle_t = \frac{m_0^-}{1 + \mu} + \frac{\mu}{1 + \mu} \langle m_+ \rangle_t \quad (1.111)$$

avec $m_0^- = \text{th}[(-H_0 + h)/T]$. En combinant ces deux équations et en développant au premier ordre en h , on obtient finalement l'aimantation par spin moyennée dans le temps :

$$\langle m \rangle_t = \frac{1}{2}[\langle m_+ \rangle_t + \langle m_- \rangle_t] = \frac{h}{T} [1 - \text{th}^2(H_0/T)] \quad (1.112)$$

soit pour la susceptibilité statique :

$$\langle \chi \rangle_t = \frac{N}{T} [1 - \text{th}^2(H_0/T)] \quad (1.113)$$

On peut maintenant définir une température effective T_{FD} par la relation de fluctuation dissipation généralisée :

$$\langle \chi \rangle_t = \frac{1}{T_{FD}} \langle (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \rangle_t \quad (1.114)$$

Cette relation conduit à l'expression suivante pour la température effective :

$$T_{FD} = \frac{T}{1 + 2\mu} \frac{1 + 2\mu - \text{th}^2(H_0/T)}{1 - \text{th}^2(H_0/T)} \quad (1.115)$$

Cette expression donne bien une température effective supérieure à T , comme on pouvait s'y attendre. Cela dit, on constate d'emblée que cette température effective T_{FD} issue de la relation de fluctuation dissipation diffère de celle introduite plus haut à partir de considérations sur les populations des niveaux d'énergie. On voit ainsi que même dans un modèle aussi simple qu'un système à deux niveaux, la présence d'un forçage externe qui maintient le système hors d'équilibre nécessite l'introduction de deux températures effectives distinctes, chacune étant pertinente pour décrire certaines grandeurs physiques. On peut dès lors se demander si la température effective introduite dans les modèles de champ moyen de dynamique vitreuse grâce aux RFD décrit bien l'ensemble des propriétés du système, ou si plusieurs températures effectives devraient être introduites pour obtenir une description complète.

1.3.3 Absence de RFD linéaire dans le modèle de pièges

Il est maintenant bien connu que les modèles de dynamique dans l'espace des phases que nous avons considéré dans ce chapitre (modèles de pièges et de Barrat-Mézard) conduisent à des relations de fluctuation dissipation (RFD) non linéaires dans leur phase vitreuse $T < T_g$ [80, 148, 146]. Ce n'est qu'en abandonnant les relations de bilan détaillé, et pour certaines valeurs particulières des paramètres, que des RFD linéaires ont pu être obtenues récemment par Ritort [139]. Cette étude mettait d'ailleurs l'accent sur le fait qu'il est nécessaire pour cela d'utiliser des taux de transitions ne dépendant que du site d'arrivée, et non pas du site de départ. On sait en effet depuis les articles fondateurs du modèle de pièges qu'en choisissant de tels taux de transition, et en supposant qu'ils respectent le bilan détaillé, on obtient bien une RFD linéaire, mais elle conduit à une température effective égale à la température T du bain thermique. Pour obtenir une température effective différente, il faut renoncer au bilan détaillé.

Nous allons essayer dans ce paragraphe de comprendre pourquoi les RFD sont génériquement non linéaires dans ces modèles, en revenant au cas du modèle de

pièges usuel avec des taux de transition ne dépendant que du site de départ. Pour cela, il est utile de rappeler le principe du calcul des relations de fluctuation dissipation. Tout d'abord, une variable d'aimantation m_i est tirée aléatoirement sur chaque site i d'après une distribution $\tilde{\rho}(m)$ de variance 1, indépendamment de l'énergie E_i . Ces hypothèses, très fortes, peuvent être assouplies, mais nous pouvons nous restreindre ici au cas le plus simple, dans un but d'illustration. Compte tenu du fait que l'aimantation rencontrée lorsque l'on change de piège est statistiquement indépendante de l'aimantation précédente, la fonction de corrélation de l'aimantation se réduit dans ce cas à la corrélation de saut $C(t_w, t_w + t)$, autrement dit à la probabilité de ne pas avoir changé de piège dans l'intervalle de temps $[t_w, t_w + t]$.

En appliquant un champ h à partir de l'instant t_w , on peut également considérer l'aimantation $M(t_w, t_w + t)$ au temps $t_w + t$. De manière intuitive, cette aimantation est due à deux contributions (qui ne sont *a priori* pas strictement additives) : d'une part, la contribution du piège où l'on se trouve à l'instant t_w , et d'autre part la contribution des pièges visités par la suite. Même si cette décomposition peut sembler de prime abord artificielle, elle est en fait à l'origine de la non-linéarité des RFD, comme nous allons le voir maintenant. Pour cela, nous allons calculer l'aimantation que l'on obtiendrait si la deuxième contribution uniquement était présente dans le modèle. Cela revient en fait à considérer une version modifiée du modèle, dans laquelle le temps de séjour est déterminé lors de l'arrivée sur le piège i à partir d'une distribution exponentielle de moyenne τ_i , et n'est pas modifié par l'introduction d'un champ au cours du séjour. Ce n'est qu'à l'arrivée sur le piège suivant que l'effet du champ se fera sentir. Nous allons montrer qu'une telle version du modèle conduit à une RFD linéaire de pente $1/T_g$. Le modèle est décrit par la distribution dynamique de probabilité $P_2(E, m, t, h)$, qui donne la distribution des énergies $P(E, t, h)$ par intégration sur m . En utilisant la convention $E < 0$, la fonction de corrélation et l'aimantation définies plus haut s'écrivent respectivement (avec $\beta = 1/T$) :

$$C(t_w, t_w + t) = \int_{-\infty}^0 dE P(E, t_w, 0) e^{-te^{\beta E}} \quad (1.116)$$

$$M(t_w, t_w + t) = \int_{-\infty}^0 dE P(E, t_w, 0) \int_0^t d\tau p(\tau|E) M_0(t - \tau) \quad (1.117)$$

où $p(\tau|E)$ est la probabilité de sortir du piège après un temps τ sachant que le piège a une énergie E , et $M_0(t)$ est l'aimantation moyenne après un temps t en présence d'un champ h , sachant que l'on part de la distribution *a priori* $\rho(E) \tilde{\rho}(m)$ à l'instant $t = 0$. En prenant la transformée de Laplace par rapport à t des fonctions ci-dessus, on trouve :

$$\hat{C}(s, t_w) = \int_{-\infty}^0 dE \frac{P(E, t_w, 0)}{s + e^{\beta E}} \quad (1.118)$$

$$\hat{M}(s, t_w) = \hat{M}_0(s) \int_{-\infty}^0 dE P(E, t_w, 0) \frac{e^{\beta E}}{s + e^{\beta E}} \quad (1.119)$$

Pour calculer $M_0(t)$, il est commode d'introduire la grandeur $M_1(E, t)$ définie par :

$$M_1(E, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dm m P_2(E, m, t, h) \quad (1.120)$$

de sorte que $M_0(t)$ s'exprime de la manière suivante :

$$M_0(t) = \int_{-\infty}^0 dE M_1(E, t) \quad (1.121)$$

L'équation gouvernant l'évolution de $M_1(E, t)$ peut se déduire facilement de l'équation maîtresse gouvernant la distribution de probabilité jointe $P_2(E, m, t, h)$, en présence du champ h :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_2}{\partial t}(E, m, t, h) &= -e^{\beta(E-hm)} P_2(E, m, t, h) \\ &+ \rho(E) \tilde{\rho}(m) \int_{-\infty}^0 dE' \int_{-\infty}^{\infty} dm' e^{\beta(E'-hm')} P_2(E', m', t, h) \end{aligned} \quad (1.122)$$

Par intégration sur m et en négligeant les termes du second ordre en h , on trouve pour $M_1(E, t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} M_1(E, t) = -e^{\beta E} M_1(E, t) + \beta h e^{\beta E} P(E, t, 0) \quad (1.123)$$

où $P(E, t, 0)$ est la distribution dynamique des énergies en l'absence de champ, qui s'exprime en transformée de Laplace comme :

$$\hat{P}(E, s, 0) = \frac{1}{s} \frac{\rho(E)}{s + e^{\beta E}} \left[\int_{-\infty}^0 dE' \frac{\rho(E')}{s + e^{\beta E'}} \right]^{-1} \quad (1.124)$$

Après résolution en utilisant la transformée de Laplace $\hat{M}_1(E, s)$, on trouve pour $\hat{M}_0(s)$:

$$\hat{M}_0(s) = \frac{1}{s} \beta h \int_{-\infty}^0 dE \frac{\rho(E) e^{\beta E}}{(s + e^{\beta E})^2} \left[\int_{-\infty}^0 dE' \frac{\rho(E')}{s + e^{\beta E'}} \right]^{-1} \quad (1.125)$$

Les intégrales ci-dessus peuvent se calculer dans la limite $s \rightarrow 0$ (c'est-à-dire pour des temps longs), et on trouve :

$$\hat{M}_0(s) = \frac{h}{s T_g} \quad (1.126)$$

ce qui signifie que l'aimantation $M_0(t)$ converge vers la limite $M_\infty = h/T_g$. En revenant à la grandeur qui nous intéressait au départ, à savoir l'aimantation $\hat{M}(s, t_w)$, on obtient finalement :

$$\hat{M}(s, t_w) = \frac{h}{s T_g} \int_{-\infty}^0 dE P(E, t_w) \frac{e^{\beta E}}{s + e^{\beta E}} \quad (1.127)$$

d'où l'on déduit la relation de fluctuation dissipation suivante :

$$\hat{M}(s, t_w) = \frac{h}{T_g} \left[\frac{1}{s} - \hat{C}(s, t_w) \right] \quad (1.128)$$

En prenant la transformée de Laplace inverse, et en introduisant la susceptibilité dynamique $\chi(t_w, t_w + t) = M(t_w, t_w + t)/h$, on peut écrire :

$$\chi(t_w, t_w + t) = \frac{1}{T_g} [1 - C(t_w, t_w + t)] \quad (1.129)$$

Dans cette version modifiée du modèle, on a donc bien une relation de fluctuation dissipation linéaire, avec une température effective égale à T_g . Nous présentons sur la Fig. 1.7 des simulations numériques dans le modèle BM à $T = 0$ montrant que si le piège où l'on se trouve à t_w n'est pas affecté par le champ h , on retrouve une RFD linéaire, alors que la RFD est non linéaire dans la version originale du modèle [146, 139].

Pour tenter de mieux comprendre pourquoi le piège visité à t_w pourrait jouer un rôle différent de ceux visités ultérieurement, comme nous venons de le suggérer, il est intéressant de rappeler que le modèle de pièges peut être interprété comme la dynamique à temps long du modèle à énergies aléatoires (REM) [68], comme cela a été montré en Réf. [18]. En effet, dans le cas du REM à basse température ($T < T_c$), le système séjourne très longtemps dans les états les plus profonds, et passe de l'un à l'autre en visitant des états de haute énergie, pendant un temps qui reste court en comparaison. En considérant le REM comme la limite à $p \rightarrow \infty$ du modèle p-spins, celui-ci possède donc de manière naturelle une variable d'aimantation associée à chaque état, cette aimantation étant simplement la somme de tous les spins. Lorsque l'on applique un champ h , même très faible, les états les plus profonds vont être complètement renouvelés, car les états ayant une aimantation d'ordre N (où N est le nombre de spins) vont subir un écart en énergie d'ordre hN , et certains d'entre eux vont donc devenir plus profonds que les minima en l'absence de champ. Ce renouvellement des états les plus profonds implique que le système va passer l'essentiel de son temps sur des états d'aimantation non nulle, ce qui n'était pas le cas avant d'appliquer le champ. Ainsi, l'état dans lequel le système se trouve à l'instant t_w lorsque le champ est appliqué aura typiquement une aimantation nulle. Pour s'échapper de ce site et trouver les nouveaux états les plus profonds, le système doit passer par des états de haute énergie, et donc franchir une barrière d'énergie. Si l'on suppose que l'évolution du système s'effectue par retournement d'un spin à la fois (ou éventuellement d'un nombre fini de spins), on s'attend à ce que la barrière d'énergie à franchir soit peu modifiée par l'introduction du champ. On devine ainsi que le piège dans lequel le système se trouve à t_w lorsque le champ est introduit va jouer un rôle différent de ceux visités par la suite.

Ces arguments suggèrent également qu'il pourrait exister dans le REM une transition, en fonction de l'intensité du champ h , entre un régime possédant une

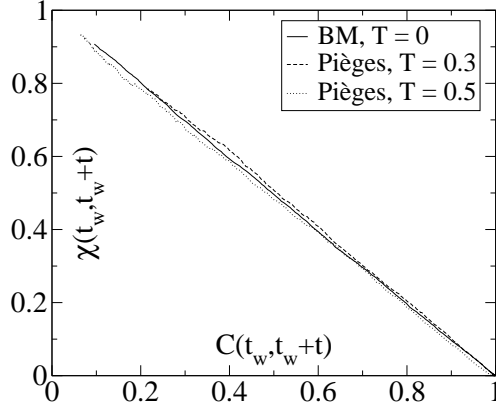


FIG. 1.7 – *Graphes de fluctuation dissipation du modèle BM et du modèle de pièges, modifiés suivant la procédure décrite dans le texte. Trait plein : modèle BM à $T = 0$, $t_w = 10^3$; tirets : modèle de pièges à $\mu = 0.3$ et $t_w = 10^4$; pointillés : modèle de pièges à $\mu = 0.5$ et $t_w = 10^3$.*

RFD linéaire pour $1/N \ll h \ll 1$ et un régime semblable à ce qu'on obtient dans le modèle de pièges pour $h \ll 1/N$. En effet, dans ce dernier cas, les écarts en énergie générés par l'application du champ h ne suffisent plus à renouveler les pièges les plus profonds, et on peut s'attendre à retrouver un comportement de type pièges en ce qui concerne les relations de fluctuation dissipation. Tout ceci reste néanmoins spéculatif pour l'instant, et il serait nécessaire de tester ces idées, soit par simulations numériques, soit analytiquement.

1.3.4 Une notion moins stricte de température effective

Puisque certains modèles vitreux ne peuvent être décrits par une relation de fluctuation dissipation linéaire, peut-on alors trouver une notion moins stricte de température effective, qui garde cependant une signification physique claire? C'est ce que nous proposons de faire dans ce paragraphe, et cela nous amènera à formuler des liens entre différentes approches alternatives aux RFD, ouvrant peut-être ainsi une voie vers une meilleure compréhension de ces notions. Précisons toutefois que les résultats présentés ici ne constituent pour l'instant que des pistes de réflexion, et restent pour l'essentiel de nature heuristique.

Une approche thermodynamique

En partant des relations d'équilibre élémentaires, la température thermodynamique est habituellement définie par :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad (1.130)$$

où S est l'entropie et \bar{E} est la moyenne thermodynamique de l'énergie. Notons que les autres quantités extensives comme le volume ou le nombre de particules sont maintenues constantes dans cette dérivation. Cette relation signifie que si l'on considère deux états d'équilibre très proches l'un de l'autre, et qui ne diffèrent que par leur énergie et leur entropie, les différences d'entropie et d'énergie entre ces deux états, dS et dE , sont telles que $dE = TdS$. Toutefois, on peut également donner à cette relation un sens dynamique, si l'on considère un système proche de l'équilibre, en contact avec un thermostat à la température T . Dans ce cas, l'équilibre correspond au minimum de l'énergie libre F . Si l'on considère une perturbation $\delta P_i(t)$ d'ordre ε par rapport à la probabilité d'équilibre P_i^{eq} de chaque état microscopique i , les dérivées temporelles \dot{E} et \dot{S} de l'énergie et de l'entropie sont d'ordre ε , alors que la dérivée de l'énergie libre \dot{F} est d'ordre ε^2 , puisque l'énergie libre est minimale à l'équilibre. Pour une perturbation infinitésimale, on a donc au premier ordre en ε la relation :

$$\dot{E} - T\dot{S} = 0 \quad (1.131)$$

Ainsi, la température thermodynamique peut être mesurée également à partir des taux de relaxation de l'énergie et de l'entropie, plutôt qu'en considérant deux états d'équilibre voisins. Maintenant, au lieu de s'intéresser à la relaxation très près de l'équilibre, on peut considérer des systèmes vitreux, ou présentant de la croissance de domaines, pour lesquels l'évolution se déroule loin de l'équilibre, mais avec un taux d'évolution des quantités à un temps (énergie, entropie...) qui devient infiniment lent, comme c'est le cas près de l'équilibre (bien que les dépendances temporelles puissent être très différentes dans les deux cas, à savoir en loi de puissance ou exponentielle). Une manière naturelle de définir une température effective est alors de généraliser la relation précédente :

$$\dot{E} - T_e\dot{S} = 0 \quad (1.132)$$

Un simple argument thermodynamique permet de relier cette température effective T_e à la température T du bain thermique avec lequel le système est en contact, et à la production d'entropie σ . La deuxième loi de la thermodynamique permet d'écrire :

$$\dot{S} = \frac{1}{T}\dot{E} + \sigma \quad (1.133)$$

En utilisant l'Eq. (1.132), on trouve alors :

$$\frac{1}{T_e} = \frac{1}{T} + \frac{\sigma}{\dot{E}} \quad (1.134)$$

Ainsi, T_e est finie et différente de T si la production d'entropie diminue approximativement au même taux que le flux d'énergie. Il serait nécessaire de savoir si une telle définition conduit à une grandeur qui vérifie les propriétés élémentaires de la notion de température, comme le fait que la chaleur s'écoule spontanément

du système le plus chaud à celui le plus froid. Nous n'avons pour l'instant pas trouvé d'argument fort pour valider ou infirmer cette propriété.

D'autre part, même si cette température effective n'est pas *a priori* reliée à celle définie grâce aux relations de fluctuation dissipation T_{FD} , des similitudes qualitatives apparaissent. En particulier, on constate que si l'on refroidit le système, $\dot{E} < 0$ et $T_e > T$, comme on le constate habituellement pour T_{FD} [64]. A l'inverse, si l'on chauffe celui-ci, $\dot{E} > 0$ et $T_e < T$, en accord qualitatif avec les résultats obtenus par les relations de fluctuation dissipation dans le modèle XY, où il a été trouvé que $T_{\text{FD}} < T$ si l'on part d'une condition initiale équilibrée à température nulle [28].

Lien avec l'approche statistique

Nous allons maintenant tenter de donner une interprétation de cette température effective T_e dans le contexte de la description statistique de la dynamique de vieillissement. En considérant un système décrit par une distribution dynamique des énergies $P(E, t)$, on peut faire l'hypothèse simplificatrice que cette distribution $P(E, t)$ vérifie une loi d'échelle du type :

$$P(E, t) = p(E - \lambda(t)) \quad (1.135)$$

dans laquelle $\lambda(t)$ est une fonction du temps uniquement. Cette forme est satisfaite de manière exacte dans le modèle de pièges et dans le modèle BM lorsque l'on utilise une densité d'état $\rho(E)$ exponentielle, auquel cas $\lambda(t) = -T \ln t$ et $-T_g \ln t$ respectivement. Il est important de remarquer que $\lambda(t)$ est aussi l'énergie moyenne au temps t à une constante additive près, de sorte que :

$$\dot{\bar{E}} = \frac{d\lambda}{dt} \quad (1.136)$$

En partant d'un système à M états, on peut définir l'entropie S de la manière habituelle par :

$$S = - \sum_{i=1}^M P_i \ln P_i \quad (1.137)$$

A la limite thermodynamique $M \rightarrow \infty$, on peut réécrire l'entropie à l'aide du formalisme continu en énergie, en tenant compte de la relation entre formulation discrète et continue $P_i(t) = P(E_i, t)/[M\rho(E)]$ (qui suppose que P_i ne dépend de i qu'à travers l'énergie E_i) :

$$S(t) = \ln M - \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE P(E, t) \ln \left[\frac{P(E, t)}{\rho(E)} \right] \quad (1.138)$$

En dérivant par rapport au temps, on obtient :

$$\dot{S} = - \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \frac{\partial P}{\partial t}(E, t) \ln \left[\frac{P(E, t)}{\rho(E)} \right] \quad (1.139)$$

Les propriétés d'échelle de $P(E, t)$ données en Eq. (1.135) permettent d'écrire :

$$\frac{\partial P}{\partial t}(E, t) = -\frac{d\lambda}{dt} \frac{\partial P}{\partial E}(E, t) \quad (1.140)$$

si bien que l'entropie devient :

$$\dot{S} = -\frac{d\lambda}{dt} \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \frac{\partial P}{\partial E}(E, t) \ln \left[\frac{P(E, t)}{\rho(E)} \right] \quad (1.141)$$

Une intégration par partie conduit pour des temps longs au résultat suivant :

$$\dot{S} = -\frac{d\lambda}{dt} \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE P(E, t) \frac{\partial}{\partial E} \ln \left[\frac{P(E, t)}{\rho(E)} \right] \quad (1.142)$$

si l'on suppose que $P(E_{max})$ et $P(E_{min})$ sont nuls, ce qui est généralement le cas en régime de vieillissement (mais pas nécessairement vrai à l'équilibre). En utilisant l'Eq. (1.136), on trouve que la température effective définie par l'Eq. (1.132) s'exprime en fonction de la distribution $P(E, t)$ comme :

$$\frac{1}{T_e} = -\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE P(E, t) \frac{\partial}{\partial E} \ln \left[\frac{P(E, t)}{\rho(E)} \right] \quad (1.143)$$

Cette expression suggère une interprétation très intéressante de cette grandeur : la température T_e (ou plus exactement son inverse) s'exprime comme une moyenne dynamique d'une pseudo-température inverse $\beta(E, t)$ associée à l'énergie E :

$$\frac{1}{T_e} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE P(E, t) \beta(E, t) \quad (1.144)$$

avec

$$\beta(E, t) = -\frac{\partial}{\partial E} \ln \left[\frac{P(E, t)}{\rho(E)} \right] \quad (1.145)$$

Notons par ailleurs qu'au voisinage immédiat de l'équilibre à la température T , l'Eq. (1.143) est également valable, avec cette fois $T_e = T$ et $\beta(E, t) = 1/T$, mais la démonstration en est différente, puisque le calcul que nous avons présenté suppose que le système se trouve loin de l'équilibre. Enfin, en partant de l'Eq. (1.143), on peut encore écrire, en supposant toujours que $P(E_{max})$ et $P(E_{min})$ sont nuls :

$$\frac{1}{T_e} = -\int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \frac{\partial P}{\partial E}(E, t) + \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE P(E, t) \frac{d \ln \rho}{dE} \quad (1.146)$$

$$= \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE P(E, t) \frac{d \ln \rho}{dE} \quad (1.147)$$

de sorte que $1/T_e$ peut s'interpréter comme une "température d'Edwards". En effet, $\ln \rho(E)$ n'est rien d'autre que l'entropie microcanonique $S(E)$, et dS/dE est donc la température inverse microcanonique $\beta_{micro}(E)$. Le fait d'associer à un

système hors d'équilibre la température microcanonique correspondant à l'énergie $\bar{E}(t)$ – ce que suggère la relation Eq. (1.147) puisque $P(E, t)$ est centrée sur $\bar{E}(t)$ – est alors une procédure très proche de celle proposée par Edwards.

Précisons que les résultats obtenus ci-dessus ne sont valables au sens strict que dans le cas où une relation entre temps et énergie telle que celle proposée en Eq. (1.135) existe (la forme fonctionnelle de $\lambda(t)$ pouvant être quelconque). Cependant, en prenant une fois encore le modèle de pièges comme illustration, on sait que pour une densité d'états non exponentielle (par exemple gaussienne [129]), l'Eq. (1.135) se généralise en :

$$P(E, t) = \tilde{p}(E - \lambda(t), t) \quad (1.148)$$

dans laquelle la dépendance temporelle principale est prise en compte dans $\lambda(t)$. Autrement dit, la déformation de la fonction d'échelle reste lente par rapport à la dérive globale en énergie. Dans ce cas, l'analyse proposée plus haut reste valable pour l'essentiel, en tenant compte d'une lente dépendance temporelle de tous les paramètres. Par contre, nous n'avons pas trouvé comment généraliser les résultats précédents au cas où la forme fonctionnelle de la distribution dynamique des énergies $P(E, t)$ est très différente de celle obtenue avec une distribution exponentielle, par exemple :

$$P(E, t) = \frac{1}{\lambda(t)} \psi \left(\frac{E}{\lambda(t)} \right) \quad (1.149)$$

comme dans le modèle de Sinai. Pour conclure, nous avons donc proposé une approche différente de la notion de température effective, basée sur les flux d'énergie et d'entropie plutôt que sur les relations de fluctuation dissipation. Bien que la pertinence de cette définition du point de vue des propriétés élémentaires requises pour une température ne soit pas établie, elle permet néanmoins de relier cette définition thermodynamique à d'autres interprétations de nature statistique, d'une part la température d'Edwards, et d'autre part une moyenne dynamique sur les énergies de la "pseudo-température" des modes d'énergie E . Dans le cas d'une densité d'états exponentielle $\rho(E) = T_g^{-1} e^{E/T_g}$, on trouve ainsi une température effective T_e égale à T_g , ce qui est également cohérent avec la relation souvent proposée dans les théories de champ moyen $T_e = T/x$, x étant le facteur de brisure à un pas de la symétrie des répliques $x \equiv T/T_g$. Mais comme nous l'avons rappelé plus haut, on s'attend à ce que les relations que nous avons proposées soient valables pour une classe beaucoup plus grande de distributions $\rho(E)$, en incluant une lente dépendance temporelle de T_e .

Chapitre 2

Diffusion et vieillissement à une dimension

2.1 Introduction

Dans le premier chapitre, nous avons étudié les propriétés de la dynamique vitreuse dans l'espace des phases, à l'aide de modèles totalement connectés, ou en gardant une forte connectivité lorsque des contraintes cinétiques ont été imposées. Dans ce type de modèles, le système peut choisir à chaque transition entre un grand nombre de pièges possibles. Or il a été proposé il y a quelques années de classer les systèmes présentant du vieillissement en deux grandes familles, à l'aide du recouvrement entre l'état dynamique à l'instant $t_w + t$ de deux répliques ayant des histoires thermiques identiques jusqu'au temps t_w , puis indépendantes ensuite [13]. La première famille est définie par le fait que ce recouvrement tend vers 0 pour $t \rightarrow \infty$ (à t_w grand, mais fixé), ce qui provient justement du grand nombre de bifurcations possibles dans l'espace des phases (grand nombre de nouveaux états accessibles en partant d'un état donné). Les modèles de pièges usuels correspondent donc à cette première famille, comme cela a été démontré en Réf. [13]. Au contraire, pour d'autres systèmes qui forment la deuxième famille, et parmi lesquels on trouve la croissance de domaines, ce recouvrement tend vers une limite finie lorsque $t \rightarrow \infty$. On peut alors interpréter la dynamique comme l'évolution à l'intérieur d'une "rigole" dans l'espace des phases, ce qui force les deux répliques à rester proches l'une de l'autre. Il est ainsi naturel de vouloir généraliser le modèle de pièges au cas de la dimension finie, et en particulier au cas unidimensionnel, qui correspond à la diffusion d'une particule sur un réseau à une dimension en présence de fort désordre. Ce modèle possède donc une double interprétation : soit il s'agit de la dynamique d'un système vitreux possédant une structure en "rigole" de son espace des phases, soit on peut le considérer comme un problème de diffusion de particules dans l'espace réel, en présence d'un environnement fortement désordonné.

Les généralisations de dimension finie du modèle de pièges ont déjà été étudiées il y a de nombreuses années [4, 5, 120, 44], mais seules des quantités à un

temps, mal appropriées pour étudier le vieillissement, ont été considérées alors. Ces propriétés de vieillissement n'ont été abordées que ces dernières années, par des physiciens [129, 138] ainsi que par des mathématiciens [82, 17], les deux approches se révélant complémentaires. Notons également que ce modèle de pièges unidimensionnel a été étudié en utilisant une procédure de renormalisation dans une série de travaux très récents [126, 128, 127]. Par ailleurs, il a été récemment proposé que le modèle de pièges unidimensionnel était pertinent pour décrire les “bulles” de dénaturation d'ADN sous torsion [96]. On s'attend à ce qu'en dimension $d > 2$, le modèle de pièges ait des propriétés qualitativement similaires au cas totalement connecté, car chaque site est visité par la marche un nombre fini de fois. En basse dimension $d \leq 2$, les corrélations induites par les multiples visites de la marche sur un site donné pourraient conduire à des changements qualitatifs. Il a été montré par exemple que certaines quantités présentent des propriétés de “sous-vieillissement” [138], c'est-à-dire qu'elles décroissent sur des échelles de temps qui se comportent avec le temps d'attente t_w comme t_w^ν , avec $\nu < 1$. En raison du nombre limité de sites accessibles, on pourrait aussi s'attendre à d'intéressantes propriétés de localisation dynamique, ce qui signifie qu'il y a une probabilité finie pour que k particules indépendantes parties d'un site donné se retrouvent sur le même site (quel que soit ce site), même après un temps t_w très long. De telles propriétés de localisation dynamique ont été établies pour la première fois par Golosov dans le contexte du modèle de Sinai [89], puis étendues au cas biaisé [56], avant d'être démontrées rigoureusement dans le modèle de pièges unidimensionnel [82].

Dans ce chapitre, nous présentons une étude détaillée du modèle de pièges unidimensionnel, d'abord dans le cas non biaisé [32], puis en présence d'un faible biais [33], en utilisant à la fois des simulations numériques, des approximations analytiques et des arguments d'échelle. Dans la première partie, nous nous intéresserons plus particulièrement à la forme d'échelle du front de diffusion moyen $\langle p(x, t) \rangle$ dans la phase sous-diffusive et non gaussienne, pour lequel aucun résultat analytique n'est, à notre connaissance, disponible. Nous présenterons des arguments d'échelle ainsi que des procédures d'approximation pour rendre compte de nos données numériques. Nous discuterons ensuite l'idée d'un équilibre partiel dans ce modèle, associé à une échelle de longueur qui croît avec le temps, ce qui peut être testé en détail au travers de la distribution dynamique des probabilités d'occupation. Les moments de cette distribution sont les “rapports de participations inverse” considérés habituellement dans la littérature, qui caractérisent les propriétés de localisation de la mesure. De manière un peu surprenante, ces indicateurs de localisation sont finis (ainsi que cela a été montré pour la première fois dans la Réf. [82]), mais différents de leur contreparties d'équilibre. Nous discuterons en détail l'origine de cette différence, et nous tenterons de caractériser quantitativement la distribution dynamique des taux d'occupation. Dans la troisième partie, nous étudierons le comportement de vieillissement de deux fonctions de corrélations, qui présentent des propriétés d'échelle différentes, ce qui signifie que deux échelles de temps distinctes, t_w^ν et t_w , apparaissent dans ce modèle. Nous

développerons là encore des arguments intuitifs et des approximations analytiques simples en vue de comprendre ces différences, et nous obtiendrons de nouvelles prédictions pour le comportement asymptotique des fonctions d'échelle, qui se révèlent être en très bon accord avec les résultats numériques. Nous discuterons aussi l'existence possible de multiples régimes d'échelle dans ce modèle, comme on peut en trouver dans certains verres de spins [62] ou dans certaines généralisations du modèle de pièges [138].

2.2 Diffusion anormale dans le modèle de pièges 1D

2.2.1 Définition du modèle

Considérons un réseau unidimensionnel, et définissons sur chaque site i une variable aléatoire gelée $E_i > 0$, tirée à partir d'une distribution $\rho(E)$. Cette variable E_i doit être interprétée comme la barrière d'énergie que la particule (le marcheur) doit franchir pour quitter le site i . On choisit une dynamique activée caractérisée par une température T , ce qui signifie que le taux de transition w_i à partir du site i est donné par $w_i = \Gamma_0 e^{-E_i/T}$, où Γ_0 est une échelle de fréquence microscopique. Une fois que la particule a quitté le site i , elle choisit un des deux sites voisins, avec probabilité q_+ pour le site $i + 1$ et $q_- = 1 - q_+$ pour $i - 1$. Le cas totalement dirigé $q_+ = 1$ est relativement simple à analyser analytiquement, puisque chaque site est visité une seule fois [115, 44, 56]. Le cas non biaisé $q_+ = q_- = 1/2$ que nous étudions ici est nettement plus complexe car chaque site est visité un grand nombre de fois, ce qui induit des corrélations dans les taux de transitions vus par le marcheur. Notons également que dès l'instant où $q_+ \neq 1/2$, on s'attend à ce que les propriétés à temps long de la marche soient qualitativement les mêmes que dans le cas complètement dirigé [56].

Une remarque importante doit être faite à ce point : alors que les études numériques ont été effectuées précisément avec le modèle décrit ci-dessus, dans lequel les transitions sont permises uniquement entre plus proches voisins, les études analytiques ainsi que les arguments simplifiés présentés dans la suite sont censés s'appliquer à un cas plus général où les transitions sont seulement contraintes à avoir une portée finie ℓ_{sauf} .

Pour les arguments heuristiques et les études Monte-Carlo, il est plus commode de considérer le temps de piégeage τ d'une particule sur le site i plutôt que le taux de transition w_i . Une fois que les w_i sont donnés, τ est une variable aléatoire avec une distribution dépendant du site $p_i(\tau) = w_i e^{-w_i \tau}$, de moyenne $\tau_i = w_i^{-1}$. En choisissant une distribution exponentielle des profondeurs de pièges $\rho(E) = \frac{1}{T_g} e^{-E/T_g}$, la distribution des τ_i sur l'ensemble des sites est donnée par une loi de puissance :

$$\psi(\tau) = \frac{\mu \hat{\tau}_0^\mu}{\tau^{1+\mu}} \quad (\tau \geq \hat{\tau}_0) \quad (2.1)$$

où $\mu = T/T_g$ est la température réduite, et $\hat{\tau}_0 \equiv \Gamma_0^{-1}$ l'échelle de temps microscopique. Pour $T > T_g$, cette distribution a une valeur moyenne finie $\langle \tau \rangle = \mu \hat{\tau}_0 / (\mu - 1)$. Ceci correspond au cas de la diffusion usuelle, avec une constante de diffusion $D = a^2 / \langle \tau \rangle$ (a étant l'espacement du réseau) qui s'annule pour $T \rightarrow T_g^+$. Au contraire, si $T \leq T_g$, le premier moment de la distribution diverge, la diffusion devient anormale et des effets de vieillissement sont attendus. Une transition de phase dynamique se produit à T_g , comme dans le modèle totalement connecté. Cependant, on s'attend à ce que de nouvelles propriétés émergent de la structure spatiale dans ce modèle à une dimension.

2.2.2 Sous-diffusion induite par le désordre : un argument d'échelle

Nous rappelons d'abord un simple argument d'échelle, déjà présenté dans les références [4, 46, 44], qui conduit à un comportement sous-diffusif pour le modèle de piège unidimensionnel introduit ci-dessus. Pour simplifier, nous prendrons dans la suite a comme unité de longueur, et $\hat{\tau}_0$ comme unité de temps. De manière approximative, un marcheur typique partant d'un site initial donné a visité, après N pas, de l'ordre de \sqrt{N} sites, ce qui implique un déplacement typique $\xi \sim \sqrt{N}$. Chaque site est donc visité de l'ordre de \sqrt{N} fois, ce qui conduit à écrire le temps t écoulé sous la forme :

$$t \sim \sqrt{N} \sum_{i=-\sqrt{N}}^{\sqrt{N}} \tau_i \quad (2.2)$$

Comme la somme de M variable aléatoires distribuées selon l'Eq. (2.1) est proportionnelle à $M^{\frac{1}{\mu}}$, nous obtenons :

$$t \sim \sqrt{N}^{-1+\frac{1}{\mu}} \sim \xi^{1+\frac{1}{\mu}} \quad (2.3)$$

En inversant cette relation, on trouve le comportement sous-diffusif suivant :

$$\xi(t) \sim t^{\frac{\mu}{1+\mu}} \quad (2.4)$$

Notons que l'argument précédent n'est valable que dans la limite des temps longs, qui est définie par la condition $\xi(t) \gg \ell_{saat}$. Ce résultat avait également été obtenu par Machta [120], en utilisant des arguments de groupe de renormalisation. Le même comportement apparaît aussi dans le modèle à barrières aléatoires avec une distribution large des hauteurs de barrières, qui est censé être équivalent au modèle de pièges du point de vue des propriétés de diffusion [44]. Dans ce modèle, la probabilité (moyennée sur le désordre) d'être sur le site initial peut

être calculée exactement, et décroît comme $1/t^{\frac{\mu}{1+\mu}} = 1/\xi(t)$, en accord avec le résultat précédent. Cet exposant $\mu/(1+\mu)$ a aussi été confirmé par des simulations numériques [138].

Le cas $\mu = 1$ est particulier car des corrections logarithmiques apparaissent. En généralisant les arguments précédents, on obtient :

$$\xi(t) \sim \sqrt{\frac{t}{\ln t}} \quad (\mu = 1) \quad (2.5)$$

alors que pour $\mu > 1$ on retrouve $\xi(t) \sim \sqrt{t}$.

En notant $P_i(t)$ la probabilité d'être sur le site i au temps t , sachant que l'on est parti du site $i = 0$ à $t = 0$, une densité spatiale de probabilité $p(x, t)$ peut-être introduite par la relation $P_i(t) = a p(ia, t)$, qui ne prend un sens de limite continue que lorsque la moyenne sur le désordre (les temps de piégeage τ_i) $\langle \dots \rangle_\tau$ a été prise. On s'attend à ce que le front de diffusion moyen $\langle p(x, t) \rangle_\tau$ prenne la forme d'échelle suivante :

$$\langle p(x, t) \rangle_\tau = \frac{1}{\xi(t)} f\left(\frac{x}{\xi(t)}\right) \quad (2.6)$$

où $\xi(t)$ est donné par l'Eq. (2.4), et $f(\cdot)$ est une fonction d'échelle continue, dont la forme analytique n'est pas connue. Seule la valeur de $f(0)$ dans le modèle de barrières a été obtenue dans la Réf. [5]. Avant de nous pencher sur des problèmes plus subtils, nous avons étudié à la fois analytiquement et numériquement cette question du front de diffusion moyen qui, bien que simple dans sa formulation, recèle déjà des difficultés techniques significatives.

2.2.3 Front de diffusion moyen

Pour un système sans désordre, ou dans le cas $\mu > 1$ pour lequel le temps de piégeage moyen $\langle \tau \rangle$ est fini, le théorème de la limite centrale implique que le front de diffusion devient gaussien aux temps longs :

$$\langle p(x, t) \rangle_\tau = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Dt}\right) \quad (2.7)$$

$D = a^2/\langle \tau \rangle$ étant la constante de diffusion, avec a l'espacement du réseau, si bien que $D \propto (\mu - 1)$ lorsque $\mu \rightarrow 1^+$. Dans le cas $\mu \leq 1$, la loi d'échelle est modifiée, comme cela a été argumenté dans le paragraphe précédent, et on s'attend à ce que le front de diffusion ne soit plus gaussien.

Nous avons développé des procédures d'approximation simples, qui sont censées devenir exactes dans la limite $\mu \rightarrow 1^-$, pour calculer $\langle p(x, t) \rangle_\tau$ analytiquement pour $t \rightarrow \infty$. Ces calculs, qui sont reportés en annexe, confirment que $\langle p(x, t) \rangle_\tau$ peut effectivement se mettre sous la forme d'échelle donnée par l'Eq. (2.4). De plus, la fonction d'échelle $f(\zeta)$ peut être déterminée dans les limites $\zeta \rightarrow 0$ et $\zeta \rightarrow \infty$:

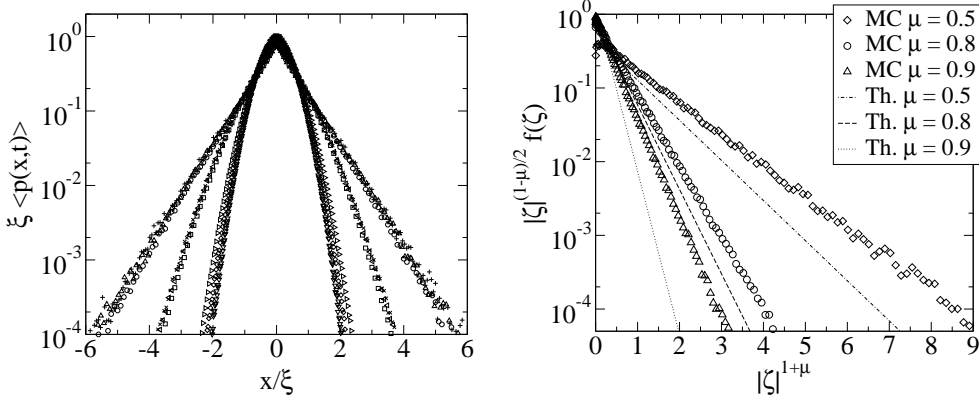


FIG. 2.1 – A gauche : $\xi \langle p(x,t) \rangle$ en fonction de $x/\xi(t)$ pour différentes températures et différents temps (simulations Monte-Carlo). En haut : $\mu = 0.2$, et $t = 10^6$ (\circ), 10^8 (Δ), 10^{10} ($+$) ; au milieu : $\mu = 0.5$ et $t = 10^3$ (\square), 10^4 (\triangleleft), 10^5 (\times) ; en bas : $\mu = 0.9$ et $t = 10^3$ (\triangleright), 10^4 (\diamond), 10^5 (∇). A droite : $|\zeta|^{(1-\mu)/2} f(\zeta)$ en fonction de $|\zeta|^{1+\mu}$ pour $\mu = 0.5$ (\diamond), 0.8 (\circ) et 0.9 (Δ) (extrapolations à $t \rightarrow \infty$ des données Monte-Carlo). La prédiction analytique est également présentée, pour les mêmes valeurs de μ . L'exposant prédit $|\zeta|^{1+\mu}$ est en bon accord avec les données numériques. Le meilleur accord concernant b – cf. Eq. (2.8) – est trouvé pour $\mu = 0.8$.

$$f(\zeta) \approx f_\infty |\zeta|^\alpha \exp(-b|\zeta|^\beta) \quad |\zeta| \rightarrow \infty \quad (2.8)$$

$$f(\zeta) \approx f_0 - f_1 |\zeta|^\mu - f_2 |\zeta|^\gamma \quad |\zeta| \rightarrow 0, \quad (2.9)$$

avec $\alpha = (\mu - 1)/2$, $\beta = 1 + \mu$ et $\gamma = \min(2, 1 + 2\mu)$. Les constantes f_0, f_1, f_2, f_∞ et b sont des nombres dépendants de μ qui sont également calculés en appendice, excepté f_2 – cf. Eqs (B.39), (B.50) et (B.51).

Dans le cas $\mu = 1$, nous trouvons en utilisant la même approximation, qui est maintenant censée être exacte à temps long, que la variable d'échelle ζ est donnée par $x\sqrt{\ln x/t} \approx x\sqrt{\frac{1}{2} \ln t/t}$ au premier ordre logarithmique, et que la fonction $f(\zeta)$ est exactement gaussienne, comme dans le cas $\mu > 1$. Plus précisément, le front de diffusion est donné, dans la limite $t \rightarrow \infty$, par :

$$\langle p(x,t) \rangle_\tau \simeq \sqrt{\frac{\ln t}{4\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t} \ln t\right) \quad (2.10)$$

Nous avons également développé une approximation dans le cas $\mu \rightarrow 0$ (cf. annexe B), mais comme les résultats obtenus sont très similaires à ceux que nous venons de présenter dans le cadre de l'approximation $\mu \rightarrow 1^-$, nous ne les discuterons pas davantage ici. Nous avons testé numériquement la validité de la loi d'échelle (2.6)

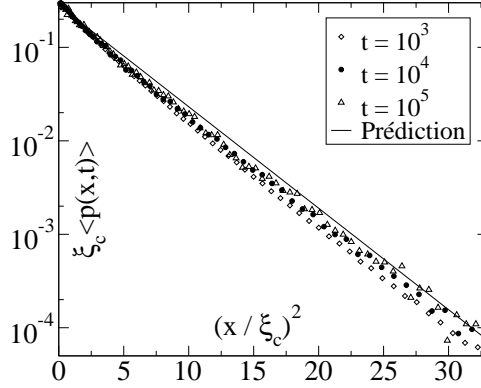


FIG. 2.2 – $\xi_c(t)\langle p(x,t) \rangle_\tau$ en fonction de $[x/\xi_c(t)]^2$ pour $\mu = 1$ et des temps $t = 10^3$ (\diamond), 10^4 (\bullet) et 10^5 (\triangle); $\xi_c(t)$ est la longueur de cohérence critique, définie comme $\xi_c(t) = [t/\ln(\Gamma t)]^{\frac{1}{2}}$, Γ étant ajusté sur les données à $t = 10^4$. Les courbes semblent converger aux temps longs vers la forme asymptotique gaussienne prédite par l'Eq. (2.10) – trait plein.

pour différentes valeurs de μ . Le tracé de $\xi(t)\langle p(x,t) \rangle$ en fonction de $x/\xi(t)$, pour différentes valeurs de t , montre que les courbes se superposent de manière satisfaisante – cf. Fig. 2.1 (gauche). Les meilleurs résultats sont obtenus pour $\mu = 0.2$ et 0.5 , même si pour $\mu = 0.2$ les données sont plus bruitées. Cependant, les corrections de temps fini deviennent fortes lorsque μ approche de 1, comme cela était attendu : en effet, on peut montrer que les corrections à la loi d'échelle ne deviennent négligeables que dans la limite où $t^{\frac{1-\mu}{1+\mu}} \gg 1$ – voir la discussion de ce point en annexe, en particulier l'Eq. (B.23). Pour $\mu = 0.9$ et $t = 10^5$, un des plus grands temps accessibles numériquement, ce paramètre vaut environ 1.8. Par conséquent, il est naturel que les données pour $\mu = 0.9$ soient fortement affectées par le voisinage de $\mu = 1$, qui joue le rôle d'un point critique.

Sur la Fig. 2.1 (droite), nous montrons les fonctions d'échelle correspondant à $\mu = 0.5, 0.8$ et 0.9 , obtenues par extrapolation à $t \rightarrow \infty$ des résultats numériques. Nous traçons en fait $f(\zeta)/\zeta^\alpha$ en fonction de ζ^β sur un graphe semi-logarithmique, afin de tester directement la forme asymptotique prédite par l'Eq. (2.8). On peut noter que bien que l'approximation soit censée être valable seulement pour μ proche de 1, la forme prédite semble correcte même pour des valeurs de μ assez faibles, telles que $\mu = 0.5$, puisque les courbes obtenues sont quasiment linéaires. On peut donc penser que l'exposant $1 + \mu$ dans l'exponentielle est soit exact, soit une très bonne approximation. De manière plus quantitative, la comparaison avec les prédictions analytiques (en prenant en compte les valeurs exactes des coefficients f_∞ et b) montre un écart systématique, qui est le plus faible pour $\mu = 0.8$, ce qui correspond à un compromis entre la perte de validité de l'approximation lorsque μ décroît et les corrections critiques de temps fini qui augmentent lorsque

μ tend vers 1.

Les données correspondant au cas $\mu = 1$ sont présentées sur la Fig. 2.2. Il est en fait nécessaire de prendre en compte une correction de temps fini, en remplaçant $\ln t$ par $\ln(\Gamma t)$, où Γ est une constante inconnue qui doit être ajustée sur les données. Cette correction apparaît naturellement, puisqu'elle correspond simplement à ajouter une contribution purement diffusive. En ajustant Γ sur les données correspondant à $t = 10^4$, on trouve $\Gamma \simeq 1.64$. On constate alors que pour de larges valeurs de $|x|$, la pente des courbes est la même pour les trois valeurs du temps simulées.

Nous avons aussi testé la région $|\zeta| \ll 1$. Pour $\mu = 0.5$, la singularité en $\sqrt{|\zeta|}$ prédite par notre approximation – cf. Eq. (2.8) – est plutôt convaincante. Toutefois, lorsque μ approche de 1 ($\mu < 1$), le coefficient f_1 du terme en $|\zeta|^\mu$ tend vers 0, de sorte que la correction suivante, en $|\zeta|^2$ devient significative. On observe alors approximativement une singularité effective avec un exposant δ_{eff} compris entre μ et 2 : on trouve $\delta_{eff} \approx 1.6$ pour $\mu = 0.8$ et $\delta_{eff} \approx 1.8$ pour $\mu = 0.9$.

2.3 Localisation dynamique

2.3.1 Localisation dynamique et équilibre partiel

Le problème de la diffusion unidimensionnelle est intéressant car, comme cela a été dit plus haut, chaque site est visité un grand nombre de fois par la marche. Par conséquent, une idée naturelle est qu'au temps t , la probabilité $P_i(t)$ de trouver la particule sur le site i devrait être très similaire à la distribution d'équilibre restreinte à un intervalle de longueur finie $\propto \xi(t)$. Plus précisément, on pourrait s'attendre à ce que $P_i(t)$ puisse s'écrire sous une forme de "quasi-équilibre" $P_i^{qe}(t)$:

$$P_i(t) \approx P_i^{qe}(t) = \frac{g_i(t)}{Z} e^{E_i/T} \quad (2.11)$$

$$Z = \sum_{i=-\infty}^{\infty} g_i(t) e^{E_i/T},$$

dans laquelle les facteurs de forme $g_i(t)$ varient lentement et décroissent sur une longueur de l'ordre de $\xi(t)$ (rappelons que E_i est l'opposée de l'énergie du site, d'où le signe positif dans l'exponentielle). L'idée d'un équilibre "partiel" est en fait assez générale, et souvent invoquée dans le contexte de la dynamique vitreuse. Bien qu'un système soit hors d'équilibre, on peut considérer son état au temps t comme un équilibre partiel restreint à la région de l'espace des phases qu'il a exploré jusqu'au temps t [161, 83, 12]. Cette idée d'équilibre partiel a été introduite et utilisée quantitativement dans le contexte des modèles de marches aléatoires dans la Réf. [138].

Nous allons discuter cette question en détail dans cette partie. Il apparaît que la statistique complète des P_i^{qe} peut être obtenue analytiquement, dans la limite

$\xi(t) \rightarrow \infty$, et comparée à la statistique des $P_i(t)$ déterminée numériquement. Nous trouvons que ces statistiques diffèrent de manière significative, même à temps long, ce qui signifie que cette dynamique hors d'équilibre ne s'approche jamais d'un régime de quasi-équilibre.

Rapport de participation et localisation

Afin de caractériser les propriétés statistiques d'une mesure de probabilité aléatoire, telle que $P_i(t)$ ou P_i^{qe} , il est intéressant d'introduire la distribution suivante :

$$\varphi(P) = \left\langle \sum_i P \delta(P - P_i) \right\rangle_\tau \quad 0 < P < 1 \quad (2.12)$$

qui est définie de manière à donner un poids faible au très grand nombre de pièges peu profonds, pour pouvoir mettre en évidence la statistique des pièges les plus profonds présents dans le système. Cette distribution $\varphi(P)$ est normalisée, en raison de la relation :

$$\int_0^1 \varphi(P) dP = \left\langle \sum_i P_i \right\rangle_\tau = 1 \quad (2.13)$$

Les moments d'ordre $k - 1$ de la distribution $\varphi(P)$ sont les "rapports de participation inverse" Y_k , utilisés fréquemment dans ce contexte de localisation :

$$\int_0^1 P^{k-1} \varphi(P) dP = \left\langle \sum_i P_i^k \right\rangle_\tau = Y_k \quad (2.14)$$

Ces rapports de participation possèdent une interprétation intéressante : si Y_k demeure fini (pour $k > 1$) lorsque le nombre de termes dans la somme diverge, on parle alors de localisation, car une fraction finie des particules restent concentrées sur un nombre fini de sites, même en présence d'un nombre infini de sites disponibles. Les Y_k ont été introduits initialement dans le contexte de la localisation électronique [36] ainsi que dans la théorie des verres de spins [125], et étudiés dans plusieurs autres problèmes [69, 48]. Notons également que dans la limite $k \rightarrow 1$, $(Y_k - 1)/(1 - k)$ tend vers l'entropie statistique de la mesure P_i .

A l'équilibre, et pour des valeurs entières de k , Y_k peut être interprété de la manière suivante : Y_k est la probabilité que k particules, toutes parties du même site à l'instant initial, se retrouvent sur le même site au temps t , quel que soit ce site. Manifestement, Y_k ne peut être non nul à temps long que s'il existe une attraction effective entre les particules. Dans le cas des systèmes désordonnés, cette attraction est induite par le désordre gelé, qui incite les particules à "condenser" sur des sites particulièrement favorables, bien que celles-ci n'interagissent pas entre elles.

Pour le problème présent, les valeurs de quasi-équilibre Y_k^{qe} des rapports de participation peuvent être calculées, en utilisant par exemple des intégrales auxiliaires [69] (voir aussi [124, 47]). Il apparaît que la forme précise des $g_i(t)$ - cf.

Eq. (2.11) – n'intervient pas, et que les Y_k^{qe} coïncident avec les valeurs d'équilibre Y_k^{eq} à la limite des temps longs et des grandes tailles. Pour $\mu \geq 1$, Y_k^{qe} tend vers 0, alors que pour $\mu < 1$, $Y_k^{qe}(t)$ converge lorsque $\xi(t) \rightarrow \infty$ vers la limite :

$$Y_k^{qe} = Y_k^{eq} = \frac{\Gamma(k - \mu)}{\Gamma(k) \Gamma(1 - \mu)} \quad (2.15)$$

identique à celle trouvée dans le modèle à énergies aléatoires. Remarquons que Y_k^{eq} tend vers 0 pour $\mu \rightarrow 1^-$, de sorte que $Y_k^{eq}(\mu)$ est continue à $\mu = 1$, et que $Y_k^{qe}(t)$ converge vers 0 pour $\mu = 1$, bien que très lentement. Cela signifie que dans la phase basse température $T < T_g$, la mesure d'équilibre se localise sur un ensemble fini de sites. La distribution $\varphi_{eq}(P)$ correspondante est donnée par :

$$\varphi_{eq}(P) = \frac{1}{\Gamma(1 - \mu) \Gamma(\mu)} P^{-\mu} (1 - P)^{\mu-1} \quad (2.16)$$

En vue de tester l'idée d'un équilibre partiel, une question pertinente est de savoir si les rapports de participation dynamiques $Y_k(t)$ convergent, à temps longs, vers les valeurs d'équilibre (ou de quasi-équilibre) Y_k^{eq} . Ce point peut être considéré également comme une question de permutation des deux limites $t \rightarrow \infty$ et $L \rightarrow \infty$ [40]. Le cas d'équilibre consiste à prendre d'abord la limite $t \rightarrow \infty$ à L fixé, puis à faire tendre L vers l'infini. Au contraire, pour le cas hors d'équilibre, on prend $L = \infty$ dès le départ et on s'intéresse ensuite à la limite $t \rightarrow \infty$.

Localisation dynamique : résultats numériques

Nous nous intéressons maintenant aux propriétés de localisation dynamiques, en partant d'une condition initiale ponctuelle $P_i(t = 0) = \delta_{i,0}$. Il a été montré par Fontes, Isopi et Newman [82] que ce processus de marche aléatoire, avec un temps de piégeage local dont la moyenne est infinie, converge vers un processus stationnaire, au prix d'une remise à l'échelle adéquate du temps et de l'espace. En conséquence, toutes les quantités à un temps, intégrées spatialement, telles que les rapports de participation, convergent à temps long vers une valeur asymptotique *a priori* différente de la valeur d'équilibre. Pour les Y_k , il a été montré en particulier que cette valeur est non nulle. Malheureusement, cette approche rigoureuse sur le plan mathématique n'a pas permis pour l'instant de déterminer les valeurs atteintes dynamiquement par les Y_k , mais seulement de prouver leur existence. Nous avons donc calculé numériquement la dépendance temporelle de $Y_k(t)$ pour différentes valeurs de k ($k = 2, 5/2, 3, 7/2, 4$). Les précisions techniques sur les méthodes employées dans les simulations sont reportées en annexe. Nos simulations confirment la convergence de $Y_k(t)$ vers une valeur limite pour les temps longs, et montrent également que cette valeur est distincte de la valeur d'équilibre.

Afin de mettre en évidence clairement la convergence de $Y_k(t)$ vers des valeurs asymptotiques différentes selon l'ordre des limites $t \rightarrow \infty$ et $L \rightarrow \infty$, nous avons

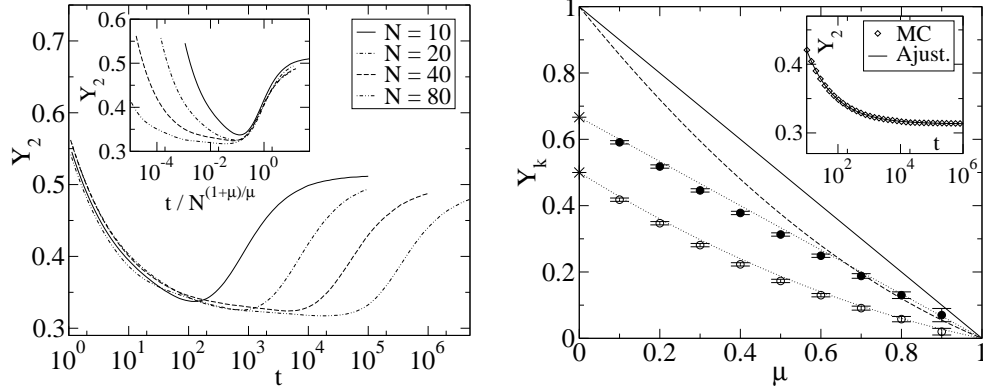


FIG. 2.3 – *A gauche* : test de la convergence de $Y_2(t)$ vers une valeur asymptotique hors d'équilibre, pour différentes (petites) tailles $L = 2N + 1$, afin que l'équilibre puisse être atteint, et $\mu = 0.5$. On voit nettement l'apparition d'un plateau pour une valeur inférieure à $Y_k^{eq}(L) = 0.5 + \mathcal{O}(1/L)$. En encart : le temps a été adimensionné par le temps ergodique $N^{(1+\mu)/\mu}$, montrant que la remontée correspond bien à la transition vers le régime d'équilibre. *A droite* : Y_2^{dyn} (symboles pleins) et Y_3^{dyn} (symboles vides) en fonction de μ . $Y_2^{eq}(\mu)$ (trait plein) et $Y_3^{eq}(\mu)$ (tirets) sont présentés pour comparaison. Les étoiles et les pointillés correspondent aux prédictions d'un modèle simple (cf. texte). Encart : illustration de la procédure d'extrapolation.

d'abord étudié des systèmes de petite taille $L = 2N + 1$ pour lesquels l'équilibre peut être atteint au cours des simulations, dans le cas particulier $k = 2$ et $\mu = 0.5$. La Fig. 2.3 (gauche) montre nettement l'apparition d'un plateau à une valeur $Y_2^{dyn}(L)$ inférieure à la valeur d'équilibre $Y_2^{eq}(L)$ vers laquelle les courbes remontent à temps longs ($Y_2^{eq}(L) = 0.5 + \mathcal{O}[1/L]$). En adimensionnant t par le temps caractéristique $N^{(1+\mu)/\mu}$ nécessaire au système pour s'équilibrer, on constate que les courbes se superposent bien dans la région correspondant à $t \sim N^{(1+\mu)/\mu}$. Ceci montre que ce plateau correspond effectivement à l'apparition d'un véritable régime stationnaire hors d'équilibre, dans lequel la longueur de diffusion $\xi(t)$ est très petite devant L . La transition entre les deux régimes se produit lorsque $\xi(t) \sim L$.

Pour étudier la valeur asymptotique $Y_k^{dyn} \equiv Y_k^{dyn}(L \rightarrow \infty)$, nous avons simulé des systèmes de très grande taille L . Cependant, la convergence temporelle de $Y_k(t)$ est très lente, et il est nécessaire d'avoir recours à une procédure d'extrapolation. Comme illustré sur l'encart de la Fig. 2.3 (droite) pour $k = 2$ et $\mu = 0.5$, nous avons fait l'hypothèse d'une convergence en loi de puissance pour Y_k , de la forme $Y_k(t) = Y_k^{dyn} + At^{-a}$, avec trois paramètres libres Y_k^{dyn} , A et a ; on constate que cette forme fonctionnelle ajuste correctement les données. Toutefois, pour μ proche de 1, le paramètre Y_k^{dyn} devient très sensible au choix de l'intervalle de temps utilisé pour l'ajustement, ce qui entraîne des barres d'erreur importantes.

La Fig. 2.3 (droite) présente les valeurs extrapolées de Y_2^{dyn} et Y_3^{dyn} en fonction de μ , et les compare avec les valeurs d'équilibre (pour $L \rightarrow \infty$) $Y_2^{eq} = 1 - \mu$ et $Y_3^{eq}(\mu) = (1 - \mu)(1 - \mu/2)$. Il apparaît clairement que la localisation dynamique est plus faible que celle obtenue à l'équilibre. En particulier, Y_2^{dyn} et Y_3^{dyn} convergent vers des valeurs inférieures à 1 lorsque μ tend vers 0. Nous argumenterons plus loin que $Y_k^{dyn}(\mu \rightarrow 0) = 2/(k + 1)$, alors que $Y_k^{eq}(\mu \rightarrow 0) = 1$ pour toute valeur de $k > 1$. Dans la limite opposée, $\mu \rightarrow 1$, nous justifierons également dans la suite que Y_k^{dyn} s'annule linéairement avec μ , cette fois en accord qualitatif avec les résultats d'équilibre. Ce comportement linéaire est compatible avec les données numériques, mais compte tenu des barres d'erreur lorsque μ est proche de 1, d'autres formes fonctionnelles seraient aussi acceptables. Nous montrons sur la Fig. 2.3 (droite) la prédiction d'un argument simple présenté dans la section 2.3.3, qui suggère $Y_k^{dyn}(\mu) = 2Y_k^{eq}(\mu)/(k + 1)$, ce qui est en assez bon accord avec les données numériques.

Ainsi, on constate que les rapports de participation dynamiques Y_k^{dyn} sont distincts des valeurs statiques, autrement dit que les poids relatifs des différents sites visités ne sont pas donnés par le rapport de leur poids de Boltzmann. Ce point est important, car il a été montré que dans le modèle de Sinai, les rapports de participation dynamiques et d'équilibre coïncident [130]. A ce stade, une possibilité intéressante, déjà envisagée dans le contexte des systèmes vitreux, serait que les Y_k^{dyn} correspondent à une mesure d'équilibre, mais avec une température effective différente de la température du bain thermique T , la première étant une fonction plus ou moins complexe de la deuxième. Cependant, nous allons montrer plus loin que cette hypothèse n'est pas vérifiée.

Notons que pour des espaces de dimension supérieure, en particulier $d > 2$, on peut montrer rigoureusement que $Y_k^{dyn} = 0$ [17], alors que Y_k^{eq} est toujours donné par l'Eq. (2.15) – le cas $d = 2$ est marginal, mais on trouve aussi $Y_k^{dyn} = 0$, la décroissance temporelle étant cette fois très lente, typiquement en $1/(\ln t)^{k-1}$. Toutefois, dans ce cas ($d > 2$), chaque site est visité un nombre fini de fois, et on pouvait s'attendre à ce que l'idée d'un équilibre partiel restreint à l'ensemble des sites visités se révèle quantitativement incorrecte, bien qu'elle soit capable de reproduire, au moins qualitativement, le comportement dynamique de certaines fonctions de corrélation [138]. Nous aurons l'occasion de revenir plus loin sur le cas de la dimension $d > 2$, qui présente également des propriétés intéressantes. Un autre cas soluble est la marche unidimensionnelle complètement dirigée, pour laquelle chaque site est visité une seule fois. Dans ce cas, Y_2^{dyn} peut être calculé exactement [56], et on trouve qu'il est différent, quoique proche, de la valeur d'équilibre $1 - \mu$.

L'aspect le plus surprenant de nos résultats à une dimension est que chaque site est visité, asymptotiquement, une infinité de fois, une propriété dont on pourrait s'attendre naïvement à ce qu'elle conduise à un équilibre partiel. Les résultats que nous venons d'obtenir concernent une population de particules, et montrent que cette population, à un instant donné, n'est pas décrite par une distribution d'équilibre. Une question différente, bien que reliée, concerne la fraction $f_i(t)$ du

temps total t qu'une particule donnée a passé sur le site i pendant l'intervalle de temps $[0, t]$. On peut également déduire de cette quantité des rapports de participation $\tilde{Y}_k(t)$ définis comme :

$$\tilde{Y}_k = \langle \langle \sum_i f_i(t)^k \rangle_p \rangle_\tau \quad (2.17)$$

où $\langle \dots \rangle_p$ représente la moyenne sur les particules et $\langle \dots \rangle_\tau$ correspond comme précédemment à la moyenne sur le désordre. Dans ce cas, nous avons observé numériquement que les Y_k sont en fait donnés par la relation d'équilibre – cf. Eq. (2.15). Par conséquent, nous sommes dans une situation où l'ergodicité est (faiblement) brisée : le temps relatif qu'une particule donnée passe sur les différents sites n'a pas la même statistique que la fraction relative des particules que l'on trouve sur les différents sites à un instant donné. Une telle différence entre des mesures d'ensemble et des mesures individuelles a déjà été discutée, dans un autre contexte, dans la Réf. [10], et a récemment été observée expérimentalement [53].

Equilibre local sur une région de taille finie

Nous avons vu que les rapports de participation n'atteignent jamais leur valeur d'équilibre dans le régime dynamique. Est-il possible, néanmoins, d'isoler une région de taille $\ell(t)$ éventuellement beaucoup plus petite que $\xi(t)$, telle qu'à l'intérieur de cette région l'équilibre soit atteint? Pour tester cette idée, il est possible de définir un rapport de participation restreint spatialement $Y_k(\ell, t)$ de la manière suivante :

$$Y_k(\ell, t) = \sum_{|i| \leq \ell} \tilde{P}_i(t)^k, \quad (2.18)$$

où $\tilde{P}_i(t)$ est la probabilité que la marche se trouve sur le site i , conditionnée au fait que la marche est sur l'intervalle $[-\ell, \ell]$:

$$\tilde{P}_i(t) = \frac{P_i(t)}{\sum_{|j| \leq \ell} P_j(t)} \quad (2.19)$$

La Fig. 2.4 (gauche) présente les résultats numériques pour la quantité $\Delta Y_2(\ell, t)$ définie par :

$$\Delta Y_2(\ell, t) = \frac{Y_2(\ell, t) - Y_2^{dyn}}{Y_2^{eq} - Y_2^{dyn}}, \quad (2.20)$$

telle que $\Delta Y_2 = 1$ pour une région équilibrée, et $\Delta Y_2 = 0$ par construction pour $\ell \gg \xi(t)$.

Les résultats présentés ont été obtenus pour t allant de 10^3 à 10^7 , et $\mu = 0.5$. Lorsque t tend vers l'infini à ℓ fixé, on constate que $Y_2(\ell, t)$ converge vers la valeur d'équilibre correspondante – qui dépend légèrement de ℓ , l'Eq. (2.15) n'étant

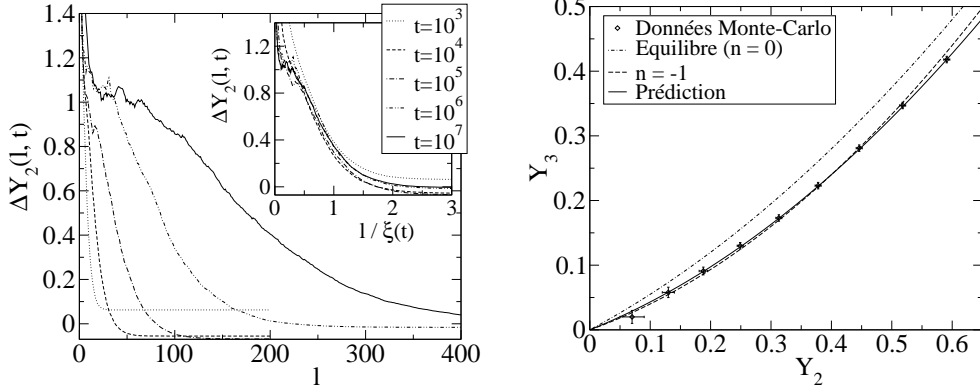


FIG. 2.4 – *A gauche* : $\Delta Y_2(l, t)$ en fonction de l pour $\mu = 0.5$ et $t = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 ($\xi(t)$ varie de 10 à 215). *En encart* : mêmes données en fonction de $l/\xi(t)$, montrant que la longueur d'équilibration est d'ordre $\xi(t)$. La divergence apparente à petit l est due à des effets de petite taille. *A droite* : courbe paramétrique $Y_3^{dyn}(\mu)$ en fonction de $Y_2^{dyn}(\mu)$, qui s'avère différente de la relation d'équilibre, correspondant à $n = 0$ dans le langage des répliques (pointillés). L'hypothèse $n = -1$ rend convenablement compte des données (tirets), mais la meilleure description est obtenue par un argument simple, cf. texte (trait plein).

valable que dans la limite des grandes tailles. Nous présentons en encart $\Delta Y_2(l, t)$ en fonction de $l/\xi(t)$. La superposition des courbes est assez satisfaisante, ce qui montre que la taille jusqu'à laquelle le système est équilibré croît comme $\xi(t)$, cette dernière étant donc la seule échelle de longueur dynamique dans ce modèle. On aurait pu en effet imaginer un autre scénario dans lequel l'équilibre ne serait atteint que sur une région de taille $\bar{l}(t) \ll \xi(t)$. Insistons néanmoins sur le fait qu'une description simple telle que celle proposée par l'Eq. (2.11), qui traduit la perte d'équilibre sur des régions de taille $\xi(t)$ par des facteurs de pondérations $g_i(t)$ indépendants des τ_i ne peut rendre compte de la différence observée entre Y_2^{eq} et Y_2^{dyn} .

2.3.2 Au-delà de l'équilibre partiel

Relation fonctionnelle entre les Y_k

Etant donné que les rapports de participation dynamiques ne prennent pas leur valeur d'équilibre, serait-il possible de définir une température fictive $\tilde{\mu}$, dépendant de μ , telle que tous les $Y_k^{dyn}(\mu)$ correspondent à $Y_k^{eq}(\tilde{\mu})$. Pour tester cette idée, on peut éliminer μ de l'Eq. (2.15), et réexprimer par exemple tous les Y_k en fonction de Y_2 , ce qui donne :

$$Y_k = f_k(Y_2) = \frac{\Gamma(k-1+Y_2)}{\Gamma(k)\Gamma(Y_2)} \quad (2.21)$$

cette relation ne traduisant *a priori* qu'une condition nécessaire. Nous avons représenté Y_3^{dyn} en fonction de Y_2^{dyn} pour différentes valeurs de μ sur la Fig. 2.4 (droite). Il apparaît clairement que cette relation est différente de la relation d'équilibre, présentée à titre de comparaison, ce qui montre qu'il n'est pas possible de définir une température fictive associée à la localisation à partir de Y_2^{dyn} .

Il a déjà été montré que la relation précédente entre les Y_k est incorrecte dans d'autres modèles, tels que le modèle de "mapping aléatoire" par exemple [69]. En s'inspirant de la méthode des répliques, on peut généraliser formellement l'Eq. (2.15) en :

$$Y_{k,n} = \frac{\Gamma(1-n)\Gamma(k-\mu)}{\Gamma(k-n)\Gamma(1-\mu)} \quad (2.22)$$

où n est le nombre de répliques (qui doit être pris égal à 0 pour retrouver l'Eq. (2.15), cf. Réfs. [69, 47]). On peut alors, comme précédemment, exprimer $Y_{k,n}$ en fonction de $Y_{2,n}$ pour une valeur de n arbitraire. On trouve que la valeur $n = -1$ rend compte de manière raisonnable des données numériques pour tout μ entre 0 et 1. Il est intéressant de constater que cette valeur $n = -1$ décrit de façon exacte le modèle de "mapping aléatoire à aire conservée" étudié dans la Réf. [69] (où d'autres modèles, correspondant à différentes valeurs négatives de n , sont également considérés). Cependant, comme nous allons le discuter maintenant, une étude plus précise de ce point révèle que l'hypothèse $n = -1$ ne décrit pas complètement les données numériques.

Condition initiale uniforme : le rôle du vieillissement

Afin de mieux comprendre les mécanismes associés à l'apparition de ces rapports de participation dynamiques non triviaux, nous allons étudier brièvement le cas du régime hors d'équilibre avec condition initiale uniforme, c'est-à-dire lorsque le site initial est choisi aléatoirement pour chaque marcheur. Pour mettre en œuvre plus facilement cette procédure, nous allons supposer que le système est de taille finie, avec un nombre de sites N . Cette procédure peut s'interpréter comme une trempe à partir d'une température initiale infinie, un protocole souvent invoqué en théorie des verres, et que l'on peut étudier analytiquement dans la version totalement connectée du modèle. D'un point de vue plus général, si l'on suppose que la probabilité d'occuper un site i peut se mettre sous la forme :

$$P_i(t) = \frac{1}{Z(t)} \tau_i f\left(\frac{\tau_i}{t}\right) \quad (2.23)$$

avec les comportements asymptotiques suivants pour la fonction $f(\cdot)$:

$$f(z) \rightarrow 1, \quad z \rightarrow 0 \quad ; \quad f(z) \sim \frac{1}{z}, \quad z \rightarrow \infty \quad (2.24)$$

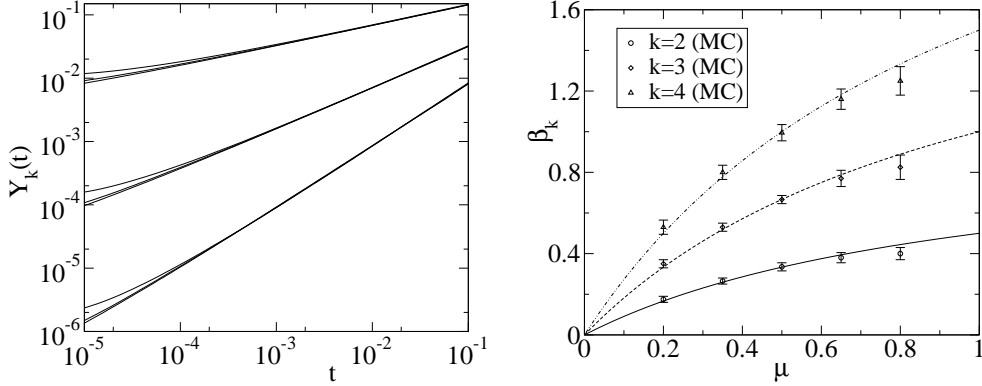


FIG. 2.5 – *A gauche* : $Y_k(t)$ en fonction de $t/N^{(1+\mu)/\mu}$, partant d'une condition initiale spatialement uniforme, pour $k = 2, 3, 4$, $\mu = 1/2$ et $N = 50, 100$ et 200 (données Monte-Carlo). On voit clairement apparaître la loi d'échelle en $t/N^{(1+\mu)/\mu}$, ainsi qu'un comportement en loi de puissance $Y_k \sim t^{\beta_k}$. *A droite* : comparaison entre les exposants β_k obtenus à partir des données numériques (symboles) et les prédictions analytiques (cf. texte), en fonction de μ et pour $k = 2, 3$ et 4 (de bas en haut).

alors les rapports de participation croissent en loi de puissance du temps tant que l'on reste loin de l'équilibre :

$$Y_{k,N}(t) = C_k \left(\frac{t^\mu}{N} \right)^{k-1} \quad 1 \ll t \ll t_{erg}(N) \sim N^{\frac{1}{\mu}} \quad (2.25)$$

où $t_{erg}(N)$ est le temps nécessaire pour équilibrer un système consistant en N pièges complètement connectés. Ce temps "ergodique" diverge lorsque $N \rightarrow \infty$, mais aucune limite pertinente à N infini ne peut être déduite pour $Y_k(t)$ car cette dernière quantité s'annule dans cette limite, à t fixé. La forme proposée pour les taux d'occupation $P_i(t)$ en Eq. (2.23) est exacte pour le modèle totalement connecté, et il est possible de calculer explicitement la fonction $f(\cdot)$ dans ce cas, mais on peut raisonnablement supposer qu'elle reste valable, au moins en tant qu'approximation, en dimension finie (mais suffisamment élevée).

Une étude numérique du comportement temporel de $Y_k(t)$ montre que les données se comportent également en loi de puissance – cf. Fig. 2.5 (gauche) – avec un exposant β_k , qui dépend de k et de la température. La Fig. 2.5 (droite) présente le comportement de β_k avec les paramètres μ et k . Ces résultats sont clairement différents de l'exposant $\bar{\beta}_k = \mu(k-1)$ trouvé dans la version totalement connectée. Ce nouvel exposant peut s'interpréter de la façon suivante : dans le modèle en champ moyen, le temps de piégeage typique τ_{typ} atteint après un temps t est de l'ordre de t lui-même, ce qui conduit à un comportement d'échelle en τ/t pour la probabilité d'occupation $P_i(t)$, alors que dans le cas unidimensionnel, τ_{typ} est fortement réduit par le fait que la marche visite un site donné un grand

nombre de fois. Comme $\tau_{iyp} \sim \xi^{1/\mu}$, on a – cf. Eq. (2.4) :

$$\tau_{iyp} \sim t^{\frac{1}{1+\mu}} \quad (2.26)$$

Il est alors naturel de supposer que $P_i(t)$ se met sous la forme, dans le cas unidimensionnel :

$$P_i(t) = \frac{1}{Z(t)} \tau_i g\left(\frac{\tau_i}{t^{\frac{1}{1+\mu}}}\right) \quad (2.27)$$

Dans ce cas, on trouve pour $Y_{k,N}(t)$:

$$Y_{k,N}(t) = \tilde{C}_k \left(\frac{t^{\frac{\mu}{1+\mu}}}{N}\right)^{k-1} \quad 1 \ll t \ll t_{erg}(N) \sim N^{\frac{1+\mu}{\mu}} \quad (2.28)$$

Ce résultat conduit ainsi à deux prédictions sur le comportement de $Y_k(t)$ en dimension $d = 1$: d'une part, les rapports de participation ne dépendent de t et N qu'à travers la variable d'échelle $t/N^{(1+\mu)/\mu}$ et d'autre part l'exposant β_k vaut maintenant $\beta_k = \mu(k-1)/(1+\mu)$. Ces deux prédictions se vérifient quantitativement, comme le montre la Fig. 2.5.

Néanmoins, cette approche ne permet pas de prédire le préfacteur \tilde{C}_k , et ceci pour deux raisons : d'une part, on ne connaît pas l'expression analytique de la fonction d'échelle $g(\cdot)$, et d'autre part, à une dimension, le modèle ne peut être décrit uniquement par une distribution de probabilité globale des énergies, la structure spatiale doit être prise en compte, ce qui signifie que l'Eq. (2.27) ne peut être qu'une approximation. Cependant, cela met en évidence le rôle important du vieillissement de la distribution des énergies dans l'apparition de propriétés de localisation hors d'équilibre.

Conjuguer vieillissement et croissance de longueur

Puisque l'approximation de l'équilibre partiel ne permet pas de décrire le comportement des rapports de participation observé numériquement, il est tentant de proposer une autre approximation, qui prenne explicitement en compte le phénomène de vieillissement. En se plaçant d'emblée en dimension finie d quelconque, cette approximation consiste à remplacer le nombre de sites N par le volume visité dynamiquement par la marche $\xi(t)^d$, dans les expressions obtenues au paragraphe précédent pour une condition initiale uniforme dans un système de taille finie. Au contraire, dans l'approximation de l'équilibre partiel, on remplacerait *a priori* N par $\xi(t)^d$ dans les expressions d'équilibre (notons que des versions plus subtiles de l'approximation d'équilibre partiel ont été développées dans la Réf. [138], mais leur interprétation reste un peu confuse). Pour $d = 1$, cette nouvelle approximation conduit à :

$$Y_k(t) \sim \left(\frac{t^{\mu/(1+\mu)}}{\xi(t)}\right)^{k-1} \quad (2.29)$$

qui tend vers une limite finie Y_k^∞ pour $t \rightarrow \infty$ puisque $\xi(t) \sim t^{\mu/(1+\mu)}$. Malheureusement, un tel argument d'échelle ne permet pas de déterminer précisément la valeur de la limite, et une comparaison quantitative avec les résultats numériques n'est donc pas possible, mais on comprend dans ce contexte que les Y_k^∞ n'ont aucune raison d'être égaux aux valeurs d'équilibre.

Pour tester un peu plus quantitativement cette approximation, il est intéressant d'étudier les propriétés du modèle en dimension $d > 1$, ce que nous allons maintenant faire très brièvement. Pour éviter les problèmes liés aux corrections logarithmiques qui apparaissent en dimension $d = 2$, nous allons formuler l'argument pour des dimensions $d > 2$, et présenter des résultats numériques pour le cas $d = 3$. Pour $d > 2$, on s'attend à ce que $\xi(t) \sim t^{\mu/2}$ et $\tau_{typ} \sim t$ (car pour une marche typique de n pas, on a $t \sim n^{1/\mu}$ et $\xi \sim \sqrt{n}$), de sorte que l'approximation donne pour $Y_k(t)$:

$$Y_k(t) \sim \left(\frac{t^\mu}{\xi(t)^d} \right)^{k-1} \sim t^{-\alpha(k-1)} \quad (2.30)$$

avec $\alpha = \mu(\frac{d}{2} - 1)$. Cette dernière expression peut se reformuler en termes de ξ uniquement :

$$Y_k(t) \sim \xi(t)^{-(d-2)(k-1)} \quad (2.31)$$

Cet argument conduit donc à une prédiction non triviale pour le comportement dynamique des rapports de participation. En effet, si les taux d'occupation étaient à peu près uniformes sur l'ensemble du volume $\xi(t)^d$ exploré à l'instant t , les $Y_k(t)$ présenteraient une décroissance en $\xi(t)^{-d(k-1)}$, bien plus rapide que celle prédite ci-dessus. Ce résultat est d'ailleurs très intéressant car il suggère que le nombre de sites qui apportent une contribution significative aux Y_k croît comme $\xi(t)^{d-2}$, autrement dit que la mesure de probabilité dynamique à l'instant t se localise sur un ensemble de dimension "fractale" $d - 2$ (bien que la dimension $d - 2$ soit entière, on s'attend à ce que l'ensemble soit non compact). Cependant, comme pour la dimension $d = 1$, cet ensemble de sites évolue au cours du temps, et ne converge pas vers une structure asymptotique (tant que la taille du système est infinie). On retrouve ainsi le fait que la dimension $d = 2$ est marginale, puisque la localisation se ferait alors sur un ensemble de dimension nulle. Mais on sait que les rapports de participation tendent vers 0 en dimension deux, ce qui signifie que la convergence est logarithmique.

Du point de vue de la distribution $\varphi(P, t)$, les lois de puissance obtenues sur $Y_k(t)$ se traduisent par un comportement d'échelle :

$$\varphi(P, t) = t^\alpha \psi(t^\alpha P) \quad (2.32)$$

Ce comportement d'échelle peut être mis en évidence sur les résultats des simulations numériques, comme le montre la Fig. 2.6, pour $\mu = 1/2$. Nous avons également confirmé ces résultats pour d'autres valeurs de μ . Néanmoins, si la loi d'échelle devient très rapidement vérifiée pour les petites valeurs de P (pour $P \lesssim 0.1$ environ), on peut constater que la région $0.1 \lesssim P < 1$ garde une trace

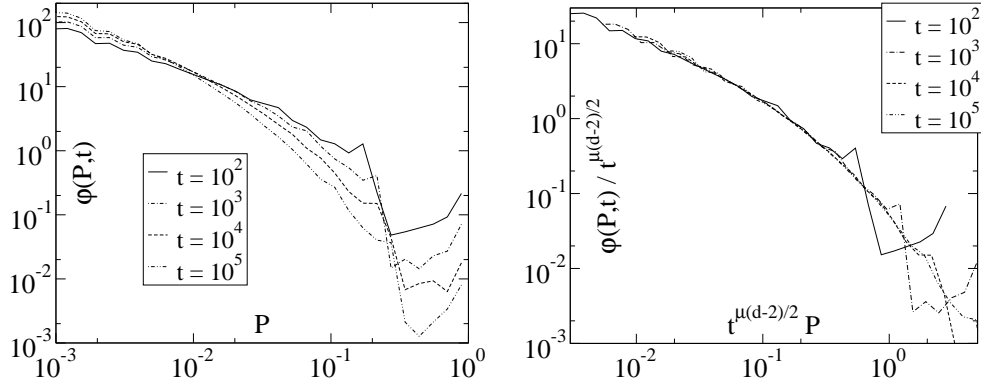


FIG. 2.6 – *A gauche* : distribution $\varphi(P, t)$ dans le modèle de pièges en dimension $d = 3$, pour $\mu = 0.5$ et $t = 10^2, 10^3, 10^4$ et 10^5 . *A droite* : mêmes données remises à l'échelle ; $\varphi(P, t)/t^{\mu(d-2)/2}$ est tracé en fonction de $t^{\mu(d-2)/2} P$.

très significative des premiers instants de la dynamique, et ne se remet pas à l'échelle avant des temps relativement longs. Par conséquent, les rapports de participation, qui sont fortement influencés par les valeurs de $\varphi(P, t)$ à P grand, ne convergent que très lentement vers la loi de puissance prédite. Autrement dit, on voit que la distribution $\varphi(P, t)$ contient une information plus facilement exploitable que ses moments, même si la connaissance de tous les $Y_k(t)$ équivaut en principe à celle de $\varphi(P, t)$.

En conclusion, on peut constater que cette approximation, qui va un pas au-delà de la version élémentaire de l'équilibre partiel, permet de comprendre pourquoi les rapports de participation diffèrent de leur valeur d'équilibre à une dimension, et prédit un comportement non trivial en dimension $d > 2$, qui est validé par les simulations numériques en $d = 3$. De surcroît, on voit apparaître dans ce dernier cas un régime de localisation faible, intermédiaire entre les états localisés habituels (pour lesquels Y_k garde une valeur finie) et l'état complètement délocalisé (correspondant à $Y_k \sim \xi^{-d(k-1)}$). Cette localisation faible correspond à une concentration de la mesure de probabilité sur un sous-ensemble de "volume" $\xi(t)^{d-2}$ à l'intérieur de l'espace exploré $\xi(t)^d$. Soulignons pour terminer que bien que l'approximation développée dans ce paragraphe ne puisse fournir que des arguments d'échelle, elle a le mérite de bien mettre en évidence l'existence de deux mécanismes antagonistes, la diffusion qui tend à délocaliser la mesure, et le vieillissement qui tend à la localiser.

Tentative de calcul analytique des rapports de participation

En utilisant la même procédure que pour $\langle p(x, t) \rangle_\tau$, on peut essayer de calculer $Y_k(t)$, qui est donné par :

$$Y_k(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p(x, t)^k \rangle_{\tau} \quad (2.33)$$

Cependant, ce calcul se révèle nettement plus difficile que dans le cas de $\langle p(x, t) \rangle_{\tau}$. En annexe, nous présentons un calcul simplifié dans le cas $k = 2$, dont le but est d'argumenter que Y_2^{dyn} est non nul dans la phase basse température $\mu < 1$, et nul pour $\mu > 1$. Bien que ce résultat ait déjà été prouvé rigoureusement [82], nous voulons introduire ici une méthode générale qui pourrait, en principe, fournir de manière systématique des approximations concernant Y_k pour toute valeur de μ , et non pas seulement pour $\mu < 1$. Nous obtenons le comportement de Y_2^{dyn} pour $\mu \rightarrow 1^-$, et nous prédisons aussi la manière dont $Y_2(t)$ décroît avec t pour $\mu > 1$. Pour cela, nous introduisons une fonction $R(t, t')$, telle que $Y_2(t) = R(t, t)$, par la relation :

$$R(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p(x, t) p(x, t') \rangle_{\tau} \quad (2.34)$$

ainsi que sa transformée de Laplace $\hat{R}(s, s')$:

$$\hat{R}(s, s') = \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt' e^{-st-s't'} R(t, t') \quad (2.35)$$

En utilisant des approximations assez fortes, nous obtenons que dans le cas particulier où $s = s'$ et $\mu < 1$:

$$\hat{R}(s, s) \simeq \frac{R_0}{s^2} \quad s \rightarrow 0 \quad (2.36)$$

avec un coefficient R_0 fini. En vue d'interpréter ce résultat, nous supposons que $R(t, t')$ satisfait, à temps longs, une relation d'échelle de la forme :

$$R(t, t') = Y_2^{dyn} \mathcal{R} \left(\frac{t}{t'} \right) \quad (2.37)$$

ce que nous avons confirmé par des simulations numériques. On trouve alors :

$$\hat{R}(s, s) \sim \frac{2Y_2^{dyn}}{s^2} \int_1^{\infty} du \frac{\mathcal{R}(u)}{(1+u)^2}, \quad (2.38)$$

ou, en utilisant l'Eq. (2.36),

$$Y_2^{dyn} = \frac{R_0}{2 \int_1^{\infty} du \frac{\mathcal{R}(u)}{(1+u)^2}}. \quad (2.39)$$

Puisque l'intégrale qui apparaît dans l'équation précédente converge (car $\mathcal{R}(u) \leq 1$), ce résultat suggère que Y_2^{dyn} est fini pour $\mu < 1$. Comme de plus R_0 s'annule linéairement quand $\mu \rightarrow 1^-$, nous pouvons conjecturer que :

$$Y_2^{dyn} \propto 1 - \mu \quad (\mu \rightarrow 1) \quad (2.40)$$

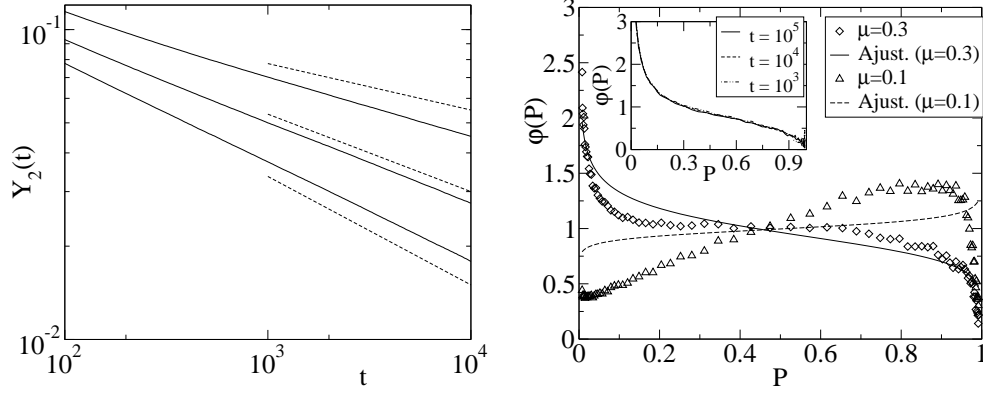


FIG. 2.7 – A gauche : $Y_2(t)$ pour $\mu = 1.3, 1.5$ et 1.7 (traits pleins, de haut en bas), montrant une décroissance en loi de puissance compatible avec la prédiction $t^{(1-\mu)/2}$ (pointillés). A droite : $\varphi_{dyn}(P)$ pour $\mu = 0.3$ et 0.1 , et ajustement par $\varphi_{-1, \tilde{\mu}}(P)$, avec $\tilde{\mu}$ comme paramètre libre – cf. Eq. (2.43). L’ajustement ne parvient pas à rendre compte des données de basse température. En encart : $\varphi(P, t)$ est tracé pour $t = 10^3, 10^4$ et 10^5 , mettant en évidence la convergence vers la distribution dynamique $\varphi_{dyn}(P)$ ($\mu = 0.5$).

ce qui est compatible avec les résultats numériques, et similaire au comportement d’équilibre. Le même niveau d’approximation sur Y_3 conduit aussi à une limite finie Y_3^{dyn} , et à un comportement linéaire en température $Y_3^{dyn} \propto 1 - \mu$ ($\mu \rightarrow 1^-$), de sorte que l’on peut raisonnablement supposer que cette dépendance linéaire est valable pour tout $k > 1$. Nous avons aussi étudié le cas $\mu > 1$, et nous trouvons :

$$\hat{R}(s, s) \sim s^{-\frac{5-\mu}{2}} \quad (1 < \mu < 2); \quad \hat{R}(s, s) \sim s^{-\frac{3}{2}} \quad (\mu > 2) \quad (2.41)$$

ce qui prédit que $Y_2(t)$ tend vers 0 comme $t^{(1-\mu)/2}$ pour $1 < \mu < 2$, et comme $t^{-1/2}$ pour $\mu > 2$. Ce dernier résultat était en fait attendu : lorsque le second moment de $\psi(\tau)$ est fini, la diffusion est purement normale, et la probabilité que deux particules parties du même site à $t = 0$ se retrouvent encore sur un même site décroît comme $\xi(t) \times 1/\xi(t)^2 \propto 1/\sqrt{t}$. Notons que pour $1 < \mu < 2$, la diffusion reste normale et $\xi(t) \sim \sqrt{t}$, mais les probabilités $P_i(t)$ d’occupation des sites deviennent fortement inhomogènes et ne peuvent plus être approximées par $1/\xi(t)^2$, comme dans le cas $\mu > 2$. Par ailleurs, le résultat pour $1 < \mu < 2$ a été testé numériquement pour $\mu = 1.3, 1.5, 1.7$ et les résultats sont présentés sur la Fig. 2.7 (gauche).

2.3.3 Décorrélation des demi-espaces

Une caractérisation fine : la distribution génératrice $\varphi(P)$

Nous avons vu dans les paragraphes précédents que différentes approximations simples pouvaient être proposées, et qu'en tenant compte simultanément du vieillissement et de la croissance de la longueur $\xi(t)$, on pouvait rendre compte des lois de puissance caractérisant la décroissance de la localisation en dimension $d > 2$. Cependant, le thème principal de cette étude reste la dimension $d = 1$, et il serait souhaitable de comprendre un peu plus quantitativement les phénomènes de localisation dans ce cas. Nous allons en particulier revenir sur l'hypothèse $n = -1$ émise plus haut, et formuler quelques arguments simples qui amèneront à des prédictions intéressantes.

Au lieu d'étudier Y_k pour toutes les valeurs de k , on peut analyser directement l'évolution temporelle de la distribution génératrice $\varphi(P, t)$, définie comme – cf. Eq. (2.12) :

$$\varphi(P, t) = \left\langle \sum_i P \delta(P - P_i(t)) \right\rangle_\tau \quad 0 < P < 1 \quad (2.42)$$

Pour des temps longs et dans un système de taille infinie, on s'attend à ce que $\varphi(P, t)$ converge vers une distribution stationnaire $\varphi_{dyn}(P)$. L'encart de la Fig. 2.7 (droite) montre $\varphi(P, t)$ pour trois (grandes) valeurs de t : $t = 10^3, 10^4$ et 10^5 . Les trois courbes se superposent de manière satisfaisante, au moins lorsque P n'est pas trop proche de 0 ou de 1, ce qui montre que $\varphi(P, t)$ est proche de $\varphi_{dyn}(P)$. Notons justement que puisque les Y_k sont sensibles à la région autour de $P = 1$, cet écart de la distribution sur les bords du domaine explique pourquoi les $Y_k(t)$ convergent plus lentement. La distribution génératrice $\varphi(P)$ apparaît donc comme un outil de caractérisation plus fin que ses moments Y_k , d'une part en raison du fait qu'il n'est guère possible de calculer tous les moments dans les simulations numériques, et surtout parce que les effets de temps finis se séparent assez naturellement des comportements asymptotiques dans la distribution $\varphi(P)$. En effet, la région P proche de 1 converge lentement, ce qui influe fortement sur les moments, alors que le reste de la distribution atteint plus rapidement le régime asymptotique (même si la normalisation impose des corrections, ces effets restent faibles).

On peut définir une distribution généralisée $\varphi_{n, \tilde{\mu}}(P)$ comme celle qui génère les $Y_{k,n}(\tilde{\mu})$, ce qui conduit à la distribution bêta suivante :

$$\varphi_{n, \tilde{\mu}}(P) = \frac{\Gamma(1-n)}{\Gamma(1-\tilde{\mu})\Gamma(\tilde{\mu}-n)} P^{-\tilde{\mu}}(1-P)^{\tilde{\mu}-n-1} \quad (2.43)$$

Nous allons maintenant tester de manière plus précise si les données sont compatibles avec l'hypothèse $n = -1$. La courbe paramétrique $Y_3^{dyn}(Y_2^{dyn})$ était juste une manière simple de tester si Y_3^{dyn} et Y_2^{dyn} satisfont une relation du type Eq. (2.22), dans laquelle μ serait remplacé par un paramètre inconnu $\tilde{\mu}$. En ce qui concerne $\varphi_{dyn}(P)$, on peut alors considérer $\tilde{\mu}$ comme un paramètre libre, et tenter d'ajuster les données numériques en variant $\tilde{\mu}$, n étant fixé à la valeur $n = -1$

trouvée au paragraphe précédent. Pour $\mu \geq 0.5$, les ajustements obtenus sont relativement satisfaisants (données non présentées ici). Par contre, pour $\mu < 0.5$, les meilleurs ajustements ne parviennent pas à rendre compte des données de manière satisfaisante, l'écart devenant de plus en plus grand à mesure que μ décroît – cf. Fig. 2.7 (droite) – ce qui montre que l'hypothèse $n = -1$ n'est finalement pas valable. Ceci est dû au fait que $\varphi_{n,\tilde{\mu}}(P)$ est une fonction monotone de P pour toute valeur de $\tilde{\mu}$, alors que $\varphi_{dyn}(P)$ devient non monotone à basse température. En conséquence, les données numériques ne peuvent être décrites par une relation du type Eq. (2.43), en particulier à très basse température, même si cette hypothèse rend compte de manière plutôt satisfaisante de la courbe paramétrique $Y_3^{dyn}(Y_2^{dyn})$. Afin de mieux comprendre ce phénomène de localisation dynamique, nous allons nous intéresser plus particulièrement au cas $\mu \rightarrow 0$, pour lequel des arguments simples peuvent être proposés.

Un argument heuristique dans la limite $\mu \rightarrow 0$

Bien que ce problème de localisation dynamique hors d'équilibre semble difficile à appréhender à température finie, il est possible de proposer un argument simple⁵ dans la limite $\mu \rightarrow 0$. Cet argument rend compte des limites non triviales (car strictement inférieures à 1) trouvées pour Y_2^{dyn} et Y_3^{dyn} à très basse température, comme on le voit sur la Fig. 2.3 (droite). Si $\mu \ll 1$, alors les plus grands temps de piégeage accessibles au bout d'un temps $t \gg 1$ seront nettement séparés les uns des autres. A titre d'exemple, on peut montrer que la distribution du rapport R entre le deuxième plus grand temps et le premier est $p(R) = \mu R^{\mu-1}$, qui tend vers $\delta(R)$ lorsque $\mu \rightarrow 0$. Par conséquent, dans cette limite, on peut supposer que le temps écoulé avant de trouver le piège i_0 le plus profond occupé au temps t devient négligeable par rapport au temps passé sur ce site i_0 . Notons par ailleurs que le temps effectivement passé en i_0 est en réalité beaucoup plus grand que le temps de piégeage τ_{i_0} lui-même, car la marche revient sur ce site un grand nombre de fois avant de trouver un piège plus profond (cf. section 2.4).

Le problème devient donc équivalent à celui d'une marche aléatoire en l'absence de désordre, mais avec deux parois absorbantes (correspondant aux deux plus grands pièges trouvés au temps t , de chaque côté de l'origine) placées en des positions aléatoires. Si ces parois absorbantes se trouvent respectivement à des distances x_r et x_l du site initial, alors la probabilité que la marche soit absorbée par la frontière de gauche (par exemple) vaut $p_l = x_r/(x_l + x_r)$. Comme le site initial peut se trouver en n'importe quelle position entre ces deux limites avec une probabilité uniforme, il en résulte que p_l et p_r sont des variables aléatoires uniformément distribuées sur $[0, 1]$. En revenant au modèle de pièges, cela signifie que seulement deux sites peuvent être occupés à un instant donné, et que les taux d'occupation sont distribués uniformément. Plus précisément, $\varphi(P)$ converge quand $\mu \rightarrow 0$ vers $\varphi_0(P)$ défini comme :

⁵Cet argument a été proposé à l'origine par Cécile Monthus (communication privée), et exploité ultérieurement de manière quantitative dans ses propres publications [126].

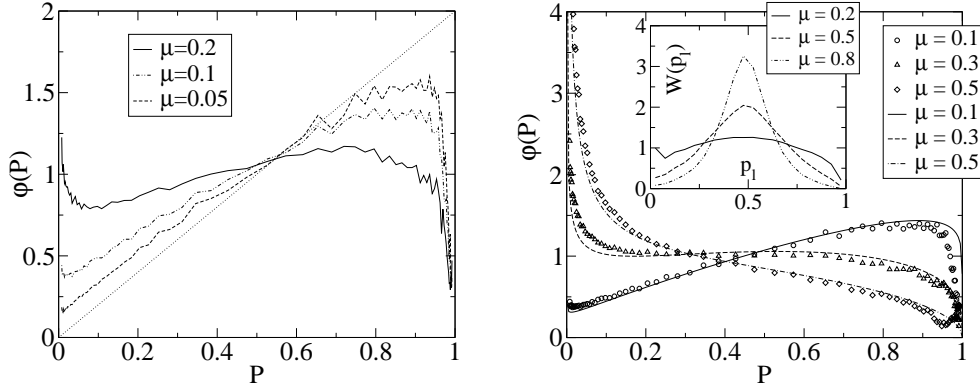


FIG. 2.8 – *A gauche* : $\varphi(P)$ à très basse température, $\mu = 0.2, 0.1$ et 0.05 . Les courbes semblent converger vers la distribution asymptotique $\varphi_0(P) = 2P$ (pointillés) pour $\mu \rightarrow 0$, même si la convergence est très lente. Les points $P = 0$ et $P = 1$ sont manifestement singuliers. *A droite* : comparaison entre $\varphi_{dyn}(P)$ obtenu par simulations (symboles) et $\varphi^*(P)$ calculé à partir d'un argument simple. L'accord s'avère très satisfaisant, sachant qu'aucun paramètre d'ajustement n'est utilisé. Encart : distribution $W(p_l)$ de la probabilité totale associée à un demi-espace, pour $\mu = 0.2, 0.5$ et 0.8 .

$$\varphi_0(P) = P \int_0^1 dp_l [\delta(p_l - P) + \delta(1 - p_l - P)] = 2P \quad (2.44)$$

ce qui donne pour les rapports de participation Y_k :

$$Y_k^0 = \int_0^1 P^{k-1} \varphi_0(P) dP = \frac{2}{k+1} \quad (2.45)$$

Dans les cas particuliers $k = 2$ et $k = 3$ présentés plus haut, on obtient $Y_2^0 = 2/3$ et $Y_3^0 = 1/2$, en bon accord avec les extrapolations à température nulle des données numériques – cf. Fig. 2.3 (droite). De surcroît, la Fig. 2.8 (gauche) confirme que $\varphi(P)$ converge vers $\varphi_0(P)$, même si cette convergence semble très lente, en particulier pour P proche de 1. Remarquons aussi que $\varphi_0(P)$ peut s'écrire sous la forme générale donnée par l'Eq. (2.43) avec le choix particulier $n = -2$ et $\tilde{\mu} = -1$, même si ces valeurs sont difficiles à interpréter physiquement.

Généralisation de l'argument à température finie

L'argument précédent peut être réinterprété de la manière suivante. A l'équilibre, la limite des températures nulles correspond au fait qu'un seul site contient tout le poids de la probabilité, ce qui implique que $Y_k^{eq}(\mu) \rightarrow 1$ quand $\mu \rightarrow 0$. Par ailleurs, à une dimension, le temps nécessaire pour explorer un intervalle de taille ℓ est d'ordre $\ell^{(1+\mu)/\mu}$, qui croît beaucoup plus vite que le temps nécessaire

pour sortir des pièges les plus profonds ($\sim \ell^{1/\mu}$) trouvés dans cet intervalle. En conséquence, si une particule trouve un piège profond par exemple à gauche du site initial, il y a une probabilité significative pour que cette particule n'ait pas le temps d'explorer la région de droite et de s'équilibrer avec un piège de profondeur comparable. C'est précisément l'essence de l'argument précédent : à température nulle, la fraction de la probabilité associée à chaque demi-espace (et concentrée sur un seul site pour chacun de ces demi-espaces) est une variable aléatoire distribuée uniformément entre 0 et 1, indépendamment de la profondeur relative des deux pièges. Une manière simple de généraliser cet argument à température finie est de supposer que chaque demi-espace est encore indépendamment équilibré et porte un poids total uniformément distribué entre 0 et 1, comme dans la limite de température nulle. Plus exactement, comme nous l'avions noté plus haut, il suffit de supposer que dans chaque demi-espace, la distribution de probabilité a la forme donnée par l'Eq. (2.11) avec des facteurs $g_i(t)$ arbitraire, mais indépendants des τ_i . En notant $\varphi(P, p_l)$ la distribution des poids restreinte au demi-espace gauche et normalisée à p_l , on trouve pour $0 < P < p_l$:

$$\varphi(P, p_l) = \frac{p_l}{\Gamma(1-\mu)\Gamma(\mu)} P^{-\mu} (p_l - P)^{\mu-1} \quad (2.46)$$

En moyennant sur p_l avec un poids uniforme, et en prenant en compte le second demi-espace, on obtient la prédiction suivante pour $\varphi(P)$:

$$\varphi(P) \simeq \varphi^*(P) = 2 \int_0^1 dp_l \varphi(P, p_l) \theta(p_l - P) \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \varphi^*(P) &= \frac{2}{\Gamma(1-\mu)\Gamma(1+\mu)} P^{1-\mu} (1-P)^\mu \\ &+ \frac{2\mu}{\Gamma(1-\mu)\Gamma(2+\mu)} P^{-\mu} (1-P)^{1+\mu} \end{aligned} \quad (2.48)$$

Bien que nous n'ayons aucune interprétation pour cela, il est tout de même intéressant de noter que φ^* peut s'écrire comme une superposition de $\varphi_{-2, \tilde{\mu}}$ pour deux valeurs distinctes de $\tilde{\mu}$,

$$\varphi^*(P) = (1-\mu) \varphi_{-2, \mu-1}(P) + \mu \varphi_{-2, \mu}(P) \quad (2.49)$$

avec $\varphi_{n, \tilde{\mu}}$ défini dans l'Eq. (2.43), et en accord avec le résultat trouvé pour $\mu \rightarrow 0$, certaines simplifications s'opérant dans ce dernier cas. Nous comparons cette prédiction avec les données numériques sur la Fig. 2.8 (droite), pour plusieurs valeurs de μ ($\mu = 0.1, 0.3, 0.5$). L'accord avec les données est étonnamment bon, compte-tenu de la simplicité de l'argument (ce dernier n'est *a priori* qu'une approximation relativement grossière), du fait qu'aucun paramètre d'ajustement n'est utilisé et que les données numériques ne sont pas totalement convergées (en particulier, on peut penser que $\varphi(P)$ est un peu sous-estimé pour P proche de 1). Notons également que les rapports de participation déduits de $\varphi^*(P)$ sont simplement proportionnels aux valeurs d'équilibre, le facteur de proportionnalité étant Y_k^0 :

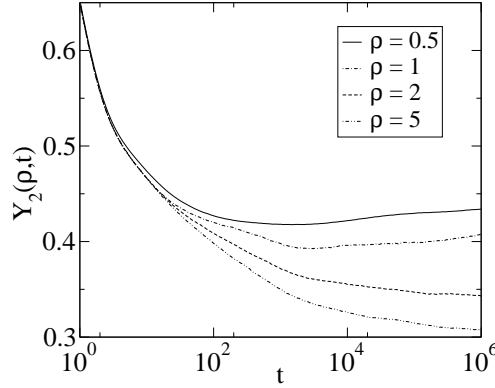


FIG. 2.9 – Evolution de $Y_k(\rho, t)$ en fonction de t pour différentes valeurs de ρ ($\rho = 0.5, 1, 2$ et 5), ρ étant l'exposant caractérisant la décroissance de la probabilité de sauter directement de x en $-x$.

$$Y_k^*(\mu) = \frac{2}{k+1} Y_k^{eq}(\mu) \quad (2.50)$$

Comme on le voit sur la Fig. 2.3 (droite), cette relation rend assez bien compte des données numériques et donne de très bons résultats pour les courbes paramétriques $Y_3(Y_2)$ – cf. Fig. 2.4 (droite). Par contre, si l'on calcule par simulations numériques la distribution $W(p_l)$ des poids $p_l = 1 - p_r$ porté par l'un des demi-espaces, on trouve qu'elle n'est probablement uniforme (comme nous l'avions supposé) que pour $\mu \rightarrow 0$ – cf. l'encart de la Fig. 2.8 (droite). Ceci donne donc du crédit à l'argument de température nulle, et suggère que le résultat est peut-être exact dans ce cas. Par contre, on constate qu'à température finie, l'argument ne peut être qu'une approximation, dont la précision devrait diminuer à mesure que μ augmente. En fait, pour μ proche de 1, cette prédiction est plus difficile à tester car la proximité du point critique rend la convergence de $\varphi(P, t)$ nettement plus lente. Nous avons recalculé $\varphi^*(P)$ en utilisant une distribution bêta symétrique pour $W(p_l)$, à savoir $W(p_l) = A[p_l(1-p_l)]^\sigma$, plus proche des résultats numériques. De manière assez surprenante cependant, la distribution $\varphi^*(P)$ obtenue ainsi est en moins bon accord avec les données que celle correspondant à $\sigma = 0$. En particulier, la forme asymptotique $\varphi(P) \sim (1-P)^\mu$, $P \rightarrow 1$, qui apparaît assez clairement sur les données numériques, n'est compatible qu'avec $\sigma = 0$. Ce point, qui mériterait davantage d'éclaircissements, n'a pu être résolu pour l'instant.

Discussion

L'image physique qui émerge des paragraphes précédents est la suivante. En ce qui concerne les quantités caractérisant globalement la localisation hors d'équilibre avec condition initiale ponctuelle, on peut raisonnablement considérer que l'espace est divisé en deux demi-lignes, et que chacune se comporte comme si

elle était équilibrée – ou quasi-équilibrée comme décrit par l'Eq. (2.11) – tout en étant hors d'équilibre par rapport à l'autre demi-espace. D'autre part, nous avons vu que les échelles de longueurs très inférieures à ξ pouvait être considérées comme équilibrées, et que l'écart à l'équilibre venait des plus grandes échelles, $|x| \gtrsim \xi$. L'argument précédent ne peut pas rendre compte de l'équilibration des petites échelles. L'ensemble de ces observations suggèrent, afin d'obtenir une image physique cohérente, que l'espace pourrait être en fait divisé en trois régions, un domaine équilibré centré sur l'origine (de taille $\phi\xi$, avec $\phi < 1$), et deux régions quasi-équilibrées de chaque côté, chacune de ces trois régions étant hors d'équilibre par rapport aux autres.

Un remède quelque peu artificiel à ce manque d'équilibration entre domaines serait de permettre à la particule de faire de grands sauts, d'ordre ξ , au lieu des sauts d'ordre 1 habituels. Nous avons pour cela ajouté aléatoirement des liens entre les sites x et $-x$, de telle sorte que le nombre de liens décroisse comme $|x|^{-\rho}$. La Fig. 2.9 présente les résultats obtenus par cette procédure pour le rapport de participation $Y_2(\rho, t)$, à la température $\mu = 0.5$. Les données suggèrent qu'il existe une valeur critique ρ_c (comprise entre 1 et 2) telle que $Y_2(\rho, t)$ converge lorsque $t \rightarrow \infty$ vers $Y_2^{eq} = 0.5$ pour $\rho < \rho_c$ et vers $Y_2^{dyn} \simeq 0.3$ pour $\rho > \rho_c$. Il pourrait être intéressant d'approfondir ce point et de déterminer plus précisément ρ_c , mais cela s'avère délicat compte tenu de la lenteur de la convergence, qui doit se faire sentir de plus en plus lorsque ρ approche ρ_c . Nous nous contentons donc d'un résultat semi-quantitatif, car notre but était d'illustrer le fait que cette différence entre Y_k^{dyn} et Y_k^{eq} est liée à la rareté des liens entre les sites sur ce réseau unidimensionnel.

2.4 Vieillessement et sous-vieillessement des corrélations

2.4.1 Motivations de l'étude

Nous allons maintenant considérer différentes définitions possibles des fonctions de corrélation, afin de sonder les propriétés de ce modèle en matière de vieillissement. Puisque le temps de piégeage le plus long rencontré au temps t_w se comporte comme t_w^ν , avec $\nu = 1/(1 + \mu) < 1$, on pourrait s'attendre naïvement à ce que les fonctions de corrélation à deux temps varient sur une échelle de temps t_w^ν . Ceci correspondrait à un comportement de type sous-vieillessement, pour lequel le temps de relaxation croît moins vite que t_w lui-même. C'est justement le cas pour la probabilité $\Pi(t_w, t_w + t)$ de ne pas être sorti du piège où l'on se trouvait à t_w pendant tout l'intervalle $[t_w, t_w + t]$. Cette fonction de corrélation a été calculée numériquement dans la Réf. [138], et satisfait bien, dans la limite de la précision numérique, une relation d'échelle de la forme $\Pi(t_w, t_w + t) = \pi(t/t_w^\nu)$. De plus, la forme de la fonction d'échelle a été comparée à la prédiction d'un argument de type "équilibre partiel", à savoir que la probabilité de trouver la particule

dans un piège de profondeur τ après un temps t_w est approximée par la probabilité d'équilibre sur une région de taille $\xi(t_w)$. Cette approximation prédit un comportement en loi de puissance pour $\pi(s)$ à la fois pour les petites et pour les grandes valeurs de s , avec des exposants qui concordent bien avec les déterminations numériques. Cependant, la forme précise de $\pi(s)$ prédite par cet argument s'écarte notablement des résultats numériques, ce qui est attendu compte-tenu des approximations utilisées. Remarquons que le succès de cette approximation de l'équilibre partiel réside dans le fait que $\Pi(t_w, t_w + t)$ dépend seulement de la probabilité moyenne d'occuper un site, et non pas de corrélations d'ordre plus élevé comme c'est le cas en ce qui concerne les rapports de participation Y_k .

De manière un peu surprenante, il s'avère que des fonctions de corrélation différentes peuvent présenter des propriétés de vieillissement totalement différentes. Considérons en particulier la probabilité $C(t_w, t_w + t)$ que la particule occupe le même site aux temps t_w et $t_w + t$, mais cette fois-ci indépendamment du fait qu'elle ait quitté ou non ce site au cours de cet intervalle de temps. Il est clair que $C(t_w, t_w + t) \geq \Pi(t_w, t_w + t)$. Mais il a été montré de manière rigoureuse [82, 17] que $C(t_w, t_w + t)$ est une fonction de t/t_w et *non pas* de t/t_w' . Cela signifie que même si la particule a, de manière presque sûre, changé de site au bout d'un temps $t_w' \ll t_w$, elle est retournée sur ce site de façon à ce que $C(2t_w, t_w)$ soit d'ordre 1, alors que $\Pi(2t_w, t_w)$ tend vers 0.

Cette différence n'est pas très intuitive *a priori*, en particulier parce que l'on sait que lorsque la particule a quitté le site où elle se trouvait à t_w , il lui faut *en moyenne* un temps infini pour y retourner, puisque la marche est unidimensionnelle. Mais comme $C(t_w, t_w + t)$ décroît sur une échelle de temps t_w , cela signifie que la probabilité de ne pas trouver la particule sur le site qu'elle occupait à t_w après un temps t tel que $t_w' \ll t \ll t_w$ doit tendre vers 0 lorsque $t_w \rightarrow \infty$. Le fait que la particule fasse de nombreux allers-retours entre $t_w + t_w'$ et $2t_w$ pourrait donc *a priori* conduire à des comportements intéressants de $C(t_w, t_w + t)$ dans le régime de "temps courts" $t \ll t_w$, qui n'a pas été étudié en détail dans la Réf. [82]. Par exemple, on pourrait trouver, comme dans la Réf. [138], différents "domaines temporels" $t \sim t_w^{\nu_1}$, $t \sim t_w^{\nu_2}$, etc., pour lesquels la fonction de corrélation présenterait des comportements analytiques distincts. C'est le point que nous souhaitons discuter maintenant.

2.4.2 Arguments analytiques

Avant de s'intéresser plus en détail au comportement à temps court de ces deux fonctions de corrélation, nous allons tenter de comprendre, d'un point de vue qualitatif, pourquoi Π et C présentent des temps de relaxation très différents. Pour que $C(t_w, t_w + t)$ puisse décroître vers 0, il faut attendre que la région sondée par la particule au temps $t_w + t$ soit notablement plus grande que la région explorée à t_w , c'est-à-dire un temps t tel que $\xi(t_w + t) \gg \xi(t_w)$. Mais comme $\xi(t_w)$ varie en loi de puissance, ce temps de décroissance est donc nécessairement d'ordre t_w . Ceci est dû au fait que lorsque la particule est confinée dans une région de taille

finie, que ce soit la taille L du système ou la longueur dynamique $\xi(t)$, les taux d'occupation sont concentrés sur un nombre fini de sites, de telle sorte que le seul moyen de se décorrélérer est de changer l'échelle de longueur de "confinement". Ceci ne se produit bien entendu que dans le cas du régime dynamique, où $\xi(t)$ augmente spontanément. A l'équilibre sur une taille L , il n'est donc plus possible de se décorrélérer totalement, et nous avons vérifié numériquement que la fonction de corrélation converge bien, pour $t \rightarrow \infty$, vers un plateau de valeur non nulle, même pour des grandes valeurs de L . Par contre, ce raisonnement ne s'applique pas à $\Pi(t_w, t_w + t)$, puisque dans ce cas la particule doit simplement quitter son piège pour se décorrélérer. Il faut remarquer également que ces arguments sont valables pour des temps t d'ordre t_w , et ne prédisent rien en ce qui concerne le comportement à temps court ($t \ll t_w$) des fonctions de corrélation.

Dans le même esprit que pour la Réf. [138], mais en utilisant une méthode légèrement différente, nous allons proposer un calcul approché de $C(t_w, t_w + t)$. La première étape consiste à introduire la probabilité d'occuper un site de temps de piégeage τ au temps t_w , que nous appellerons la distribution dynamique $p(\tau, t_w)$. En s'inspirant des propriétés du modèle de pièges totalement connecté [129], il est raisonnable de supposer la relation d'échelle suivante pour $p(\tau, t_w)$:

$$p(\tau, t_w) \simeq \frac{1}{t_w^\nu} \phi\left(\frac{\tau}{t_w^\nu}\right) \quad (2.51)$$

Cette relation prend en compte le fait que les temps de piégeage typiques sont d'ordre t_w^ν au bout d'un temps t_w – ils seraient d'ordre t_w dans le modèle totalement connecté – et elle a déjà été validée par nos études précédentes sur la localisation avec condition initiale uniforme. Il est important de noter que cette distribution dynamique n'est en principe qu'une approximation, même sur le plan des concepts, car on ne peut s'abstraire de manière rigoureuse de la structure spatiale du modèle, et de la présence de désordre gelé. Néanmoins, une approximation simple de ce type donne des résultats intéressants. Si l'on suppose que les échelles de temps courtes ($\tau \ll t_w^\nu$) sont équilibrées, alors que les grandes échelles ($\tau \gg t_w^\nu$) sont distribuées selon $\psi(\tau)$ (la distribution *a priori*), comme c'est le cas dans la version champ moyen, on obtient les formes asymptotiques suivantes pour $\phi(z)$:

$$\phi(z) \simeq \frac{\gamma_0}{z^\mu} \quad z \rightarrow 0 \quad (2.52)$$

$$\phi(z) \simeq \frac{\gamma_\infty}{z^{1+\mu}} \quad z \rightarrow +\infty \quad (2.53)$$

En utilisant la relation :

$$\Pi(t_w, t_w + t) = \int_1^\infty d\tau p(\tau, t_w) e^{-t/\tau} \quad (2.54)$$

on peut aisément déduire des Eqs. (2.52,2.53) les comportements à temps court et à temps long de $\Pi(t_w, t_w + t)$:

$$\Pi(t_w, t_w + t) \simeq 1 - \frac{\gamma_0}{1 - \mu} \Gamma(\mu) \left(\frac{t}{t_w^\nu} \right)^{1-\mu} \quad t \ll t_w^\nu \quad (2.55)$$

$$\Pi(t_w, t_w + t) \simeq \gamma_\infty \Gamma(\mu) \left(\frac{t}{t_w^\nu} \right)^{-\mu} \quad t \gg t_w^\nu \quad (2.56)$$

en accord avec les résultats de la Réf. [138], et avec nos propres simulations numériques (voir plus bas).

En ce qui concerne $C(t_w, t_w + t)$, il est nécessaire de prendre en compte le fait que lorsqu'une particule quitte son piège, elle va y retourner un grand nombre de fois avant de s'en échapper durablement. Nous proposons donc l'approximation suivante : une particule sera considérée comme ayant réellement quitté son site initial (celui occupé à t_w) si elle a trouvé un piège plus profond au cours de son excursion hors du piège initial. Etant donné un temps de piégeage τ , la probabilité que $\tau' > \tau$ s'écrit :

$$P(\tau' > \tau) = \int_\tau^\infty \frac{\mu d\tau'}{\tau'^{1+\mu}} = \frac{1}{\tau^\mu} \quad (2.57)$$

Donc la probabilité $\tilde{p}(\ell, \tau)$ que le premier piège rencontré ayant un temps de piégeage supérieur à τ soit trouvé à une distance ℓ vaut :

$$\tilde{p}(\ell, \tau) = P(\tau' > \tau) [P(\tau' < \tau)]^{\ell-1} = \frac{1}{\tau^\mu} \left(1 - \frac{1}{\tau^\mu} \right)^{\ell-1} \quad (2.58)$$

Pour τ et $\ell \gg 1$, on obtient :

$$\tilde{p}(\ell, \tau) \approx \frac{1}{\tau^\mu} e^{-\ell/\tau^\mu} \quad (2.59)$$

Il faut noter que nous ne donnons ici qu'un argument d'échelle, et que nous négligeons donc les corrections liées à la présence d'un nouveau piège de chaque côté du site initial. En conditionnant à la distance ℓ où se trouve le nouveau piège, la probabilité de l'atteindre vaut $1/\ell$ une fois que la particule a quitté son site initial. Par conséquent, la probabilité par unité de temps de s'échapper durablement du site initial peut s'écrire :

$$w(\tau, \ell) = \frac{1}{\tau \ell} \quad (2.60)$$

La fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ est alors simplement donnée par :

$$C(t_w, t_w + t) \approx \int_1^\infty d\tau p(\tau, t_w) \int_1^\infty d\ell \tilde{p}(\ell, \tau) e^{-w(\tau, \ell)t} \quad (2.61)$$

Après quelques changements de variables, et en utilisant les Eqs. (2.52, 2.53), on trouve les comportements à temps court et à temps longs suivants pour $C(t_w, t_w + t)$:

$$C(t_w, t_w + t) \simeq 1 - c_s \left(\frac{t}{t_w} \right)^{\frac{1-\mu}{1+\mu}} \quad t \ll t_w \quad (2.62)$$

$$C(t_w, t_w + t) \simeq c_l \left(\frac{t}{t_w} \right)^{-\frac{\mu}{1+\mu}} \quad t \gg t_w \quad (2.63)$$

où les constantes c_s et c_l sont données par :

$$c_s = \frac{\gamma_0}{1-\mu} \Gamma \left(\frac{2\mu}{1+\mu} \right)^2 \quad (2.64)$$

$$c_l = \frac{\mu\gamma_\infty}{(1+\mu)^2} \Gamma \left(\frac{\mu}{1+\mu} \right)^2 \quad (2.65)$$

Ces valeurs des exposants des singularités à temps court et à temps long n'avait, à notre connaissance, pas été prédites avant la publication de ce travail, et la valeur de l'exposant à temps long a été confirmée depuis par des études basées sur la renormalisation [126]. Notons que ces valeurs devraient, en principe, pouvoir être déduites de l'analyse exposée en Réf. [82] (même si elles n'ont pas été calculées dans l'article), mais la complexité du formalisme employé dans cette étude mathématique la rend peu exploitable par les physiciens. Nous allons maintenant nous tourner vers l'étude numérique de ces prédictions asymptotiques.

2.4.3 Résultats numériques et échelles de temps multiples

La Fig. 2.10 (gauche) présente $1 - \Pi(t_w, t_w + t)$ en fonction de t/t_w^ν , et $C(t_w, t_w + t)$ en fonction de t/t_w , pour différents temps d'attente ($t_w = 10^3, 10^4, 10^5$ et 10^6), à la température $\mu = 1/2$. La superposition des données est bonne, confirmant la validité des lois d'échelle prédites.

Nous commençons par tester brièvement le comportement à temps long ($t \gg t_w$) par simulations numériques. La Fig. 2.10 (droite) montre les corrélations $\Pi(t_w, t_w + t)$ et $C(t_w, t_w + t)$ en fonction du temps t , remises à l'échelle de manière appropriée, pour $t_w = 10^5$ et 10^3 respectivement ($\mu = 1/2$). Les deux fonctions de corrélation se comportent en lois de puissance à grand t , et les exposants trouvés sont en bon accord avec ceux prédits par les Eqs. (2.55) et (2.62), illustrés par les lignes pointillées (avec un préfacteur arbitraire), au moins pour cette valeur particulière de μ . Il faut noter également que, comme nous ne connaissons pas les constantes γ_0 et γ_∞ , nous ne pouvons pas tester directement les valeurs prédites pour les préfacteurs. Toutefois, en faisant le rapport des coefficients correspondant à Π et à C pour éliminer γ_0 et γ_∞ , on peut tester partiellement ces prédictions, et les résultats obtenus sont en assez bon accord avec les valeurs trouvées dans les simulations.

Nous allons analyser maintenant en détail le comportement à temps court de ces fonctions de corrélation. En traçant $\ln(1 - \Pi)$ en fonction de $\ln(t/t_w^\nu)$, on

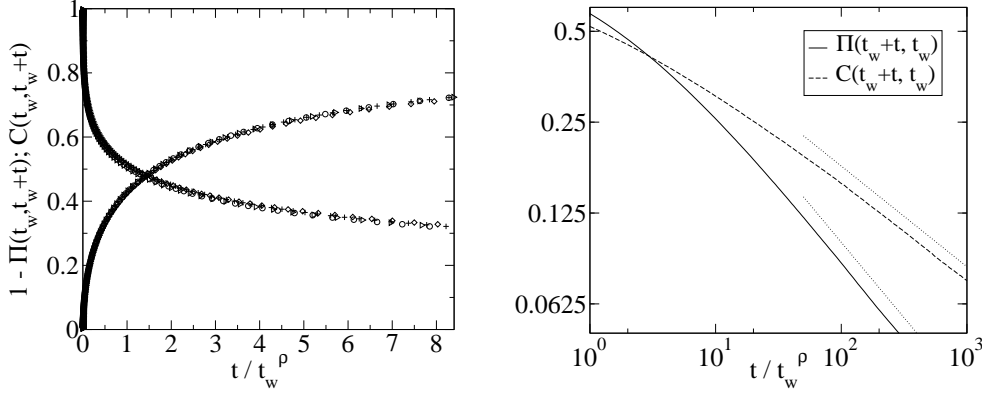


FIG. 2.10 – *A gauche* : $1 - \Pi(t_w, t_w + t)$ (courbe croissante) en fonction de t/t_w^ρ ($\rho = \nu$) et $C(t_w, t_w + t)$ (courbe décroissante) en fonction de t/t_w ($\rho = 1$) pour $\mu = 1/2$ et $\nu \equiv 1/(1 + \mu) = 2/3$. Les lois d'échelle sont très bien satisfaites, au moins dans cette fenêtre temporelle. Les symboles correspondent aux mêmes t_w pour les deux courbes : $t_w = 10^3$ (+), 10^4 (\diamond), 10^5 (\circ) et 10^6 (\triangleright). *A droite* : comportement à temps long de $\Pi(t_w, t_w + t)$ et $C(t_w, t_w + t)$ en fonction de leur variables d'échelle respectives, pour $\mu = 0.5$. Les courbes convergent vers un comportement en loi de puissance qui correspond bien aux exposants prédits $-1/2$ et $-1/3$ (pointillés).

constate que la loi d'échelle est correctement satisfaite et en bon accord avec la prédiction théorique $1 - \Pi \sim (t/t_w^\rho)^{1-\mu}$, obtenue dans la Réf. [138], mis à part des corrections de temps court qui disparaissent seulement pour $\Gamma_0 t \gg 1$.

Par ailleurs, un graphe similaire de $\ln(1 - C)$ en fonction de $\ln(t/t_w)$ s'avère moins convaincant, ce qui pourrait être le signe de l'existence de régimes temporels multiples (comme cela était le cas dans la Réf. [138], où des écarts aux lois d'échelle semblables à ceux-ci ont suggéré de tels régimes). Une façon d'étudier cette question consiste à introduire une fonction $g(\alpha, t_w)$ définie par :

$$g(\alpha, t_w) = -\frac{\ln[1 - C(t_w, t_w + t_w^\alpha)]}{\ln t_w}. \quad (2.66)$$

Si cette fonction a une limite $g_\infty(\alpha)$ quand $t_w \rightarrow \infty$, cela signifie que dans le domaine temporel correspondant à $t \sim t_w^\alpha$, la probabilité $1 - C$ que la particule se soit échappée de son site décroît comme $t_w^{-g_\infty(\alpha)}$ pour les grands t_w . A partir du régime en t/t_w établi en Réf. [82], nous savons déjà que $g_\infty(1) = 0$. Si $1 - C$ se comporte comme $(t/t_w)^\lambda$, même pour $t \sim t_w^\alpha$ avec $\alpha < 1$, alors on devrait observer $g_\infty(\alpha) = \lambda(1 - \alpha)$. Une déviation à la loi linéaire signifierait des régimes de temps multiples. En particulier, pour le modèle considéré en [138] pour $d = 1$, où deux exposants de sous-vieillessement $\nu_2 < \nu_1 < 1$ apparaissent, on trouve que la fonction $g_\infty(\alpha)$ est linéaire par morceaux dans les intervalles $[0, \nu_2]$ et $[\nu_2, \nu_1]$, avec des pentes différentes. On obtient également $g_\infty(\nu_2^-) = g_\infty(\nu_2^+)$ de sorte que $g_\infty(\alpha)$ est continue en ν_2 , et $g_\infty(\alpha > \nu_1) = 0$. Dans ce cas, un changement de

pente indique la présence d'une échelle de temps caractéristique. On pourrait imaginer des situations "multi-échelles" plus compliquées, dans lesquelles $g_\infty(\alpha)$ serait une courbe non linéaire (même par morceaux).

Nous avons d'abord testé cette procédure sur $\Pi(t_w, t_w + t)$, en définissant de manière analogue une fonction $g^*(\alpha, t_w)$ associée à Π . Dans ce cas, on s'attend à une loi d'échelle unique de sous-vieillessement, avec $\nu = 1/(1 + \mu)$, et $\lambda = 1 - \mu$, ce qui conduit à $g_\infty(\alpha) = (1 - \mu)(\nu - \alpha)$. La fonction $g^*(\alpha, t_w)$ est tracée pour différentes valeurs de t_w (à savoir $t_w = 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7) sur la Fig. 2.11 (gauche), pour $\mu = 1/2$. Par des arguments généraux, on peut s'attendre à des corrections de taille finie qui décroissent en $1/\ln t_w$ et $1/t_w^\gamma$. En tenant compte de ces corrections, on peut extrapoler de manière tout-à-fait satisfaisante $g_\infty^*(\alpha, t_w)$ à une fonction qui se trouve très proche du résultat attendu $g_\infty^*(\alpha) = \frac{1}{2}(\frac{2}{3} - \alpha)$ (cf. Fig. 2.11). Plus précisément, nous avons utilisé la forme fonctionnelle suivante pour obtenir l'extrapolation à $t_w \rightarrow \infty$:

$$g^*(\alpha, t_w) = g_\infty^*(\alpha) + \frac{b}{\ln t_w} + c(\alpha)t^{-\gamma(\alpha)} \quad (2.67)$$

où $g_\infty^*(\alpha)$, $c(\alpha)$ et $\gamma(\alpha)$ sont des paramètres libres, ajustés pour chaque valeur de α , et b est un coefficient indépendant de α , car la correction en $1/\ln t_w$ est censée provenir du préfacteur de $(t/t_w^\nu)^{1-\mu}$ dans le développement à temps court de $\Pi(t_w, t_w + t)$. Ainsi, la valeur de b a été fixée par un ajustement direct de la loi de puissance dans le régime de temps court de $1 - \Pi$.

On peut désormais appliquer la même procédure à $C(t_w, t_w + t)$. Les résultats sont présentés sur la Fig. 2.11 (droite), en utilisant les mêmes conventions que pour $\Pi(t_w, t_w + t)$; $g(\alpha, t_w)$ est représenté pour les mêmes temps d'attente t_w que $g^*(\alpha, t_w)$. On constate que, même si les corrections de temps fini sont plus fortes que pour Π , les résultats extrapolés sont en bon accord avec notre prédiction analytique pour le régime $t/t_w \ll 1$, à savoir $g_\infty(\alpha) = \lambda(1 - \alpha)$, avec $\lambda = (1 - \mu)/(1 + \mu) = 1/3$, au moins pour $\alpha \in [0.2, 0.8]$. Ceci suggère qu'il n'y a qu'un seul régime temporel pertinent, $t \sim t_w$, pour $C(t_w, t_w + t)$, bien que nous sachions que l'échelle de temps $t_w^\nu \ll t_w$ gouverne l'évolution de $\Pi(t_w, t_w + t)$. Notons que les corrections du type $1/\ln t_w$ sont plus faibles que dans le cas précédent, et que l'on est principalement dominé par des corrections en loi de puissance. Cela s'explique par le fait que le préfacteur de $(t/t_w)^\lambda$ dans le régime de temps court se trouve être proche de 1 dans ce cas précis (et le paramètre b est donc petit) alors que ce même préfacteur vaut environ 0.57 dans le cas de Π .

Bien que la situation ait finalement l'air simple, puisque chaque fonction de corrélation ne fait apparaître qu'une seule échelle de temps caractéristique, il est tout de même paradoxal que l'échelle de temps t_w^ν disparaisse complètement dans la corrélation C . Pour mieux comprendre ce point, examinons ce qui arrive aux particules qui ont quitté le piège initial au bout d'un temps d'ordre t_w^ν , et qui ont mis un temps très long pour revenir, car c'est de ce point précis que naît le paradoxe. La probabilité qu'une particule quitte le site après un temps t' vaut $\partial[1 - \Pi(t_w, t_w + t')]/\partial t' \sim t'^{-\mu}/t_w^{\nu(1-\mu)}$. Si le système n'était pas désordonné, la

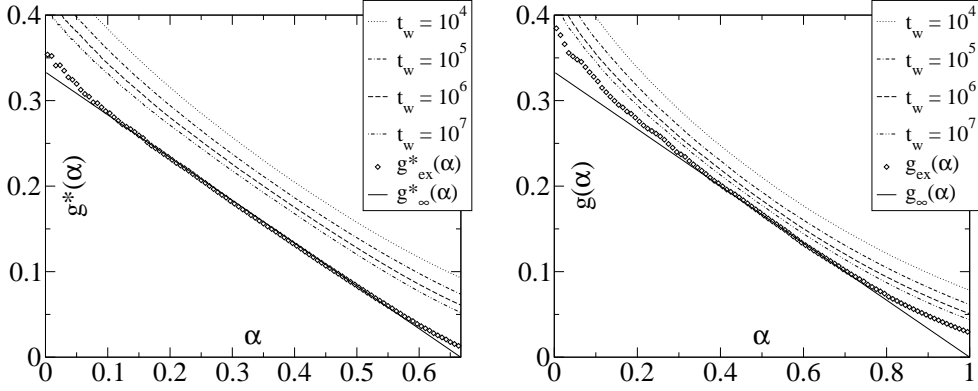


FIG. 2.11 – *A gauche* : fonction $g^*(\alpha, t_w)$ associée à Π , pour $\mu = 1/2$ et $t_w = 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 . L'extrapolation à $t_w \rightarrow \infty$, $g_{ex}^*(\alpha)$ (\diamond) est en bon accord avec la prédiction $g_\infty^*(\alpha) = \frac{1}{2}(\frac{2}{3} - \alpha)$. *A droite* : fonction $g(\alpha, t_w)$ associée à C , pour les mêmes paramètres que $g^*(\alpha, t_w)$. Bien que les corrections soient plus importantes, l'extrapolation $g_{ex}(\alpha)$ (\diamond) est néanmoins en bon accord avec la prédiction $g_\infty(\alpha) = \frac{1}{3}(1 - \alpha)$, au moins pour $0.2 < \alpha < 0.8$.

probabilité qu'elle ne soit pas retournée à son point de départ après un temps $t - t'$ se comporterait comme $(t - t')^{-1/2}$. A cause de la présence de grands temps de piégeage, cette probabilité décroît en fait plus lentement, comme $(t - t')^{-\mu/(1+\mu)}$. La contribution Δ de ces marcheurs à $1 - C$ est ainsi d'ordre :

$$\Delta \sim \int_0^t dt' \frac{t'^{-\mu}}{t_w^{\nu(1-\mu)}} (t - t')^{-\mu/(1+\mu)}. \quad (2.68)$$

En prenant $t = t_w^\alpha$, on trouve que Δ est inférieur à la contribution principale calculée plus haut – laquelle est d'ordre $(t/t_w)^{\nu(1-\mu)}$, cf. Eq. (2.62) – par un facteur $t_w^{-\alpha\nu\mu^2}$; Δ est donc négligeable dans la limite des grands t_w . Cette estimation simple permet néanmoins d'éclairer plusieurs points importants : d'une part, on comprend pourquoi les corrections de temps fini deviennent grandes quand $\alpha \rightarrow 0$; ensuite, cela montre que les corrections à $g(\alpha, t_w)$ en loi de puissance, telles que celles utilisées pour notre extrapolation, sont en fait naturelles, et finalement cela justifie que l'échelle de temps t_w^ν n'apparaisse pas dans $C(t_w, t_w + t)$.

En conclusion, on voit que le modèle de pièges unidimensionnel présente de manière générique du sous-vieillessement, au moins en ce qui concerne certaines fonctions de corrélation. Ceci peut suggérer que les systèmes expérimentaux dans lesquels du sous-vieillessement est effectivement observé possèdent une organisation quasi-unidimensionnelle des minima les plus profonds [13]. Même si une telle structure n'est peut-être pas nécessairement la seule manière de générer du sous-vieillessement (une telle propriété est quand même assez rare dans les modèle vitreux, car le vieillissement simple semble très "robuste"), cette suggestion mériterait certainement d'être testée plus avant. Par ailleurs, un point important serait

de savoir si la présence simultanée de vieillissement simple et de sous-vieillissement (suivant la fonction de corrélation choisie) peut se retrouver dans des quantités éventuellement mesurables sur des systèmes réels, en particulier si l'on interprète le modèle en termes de diffusion de particules. En effet, les fonctions de corrélation que nous avons introduites ici ne sont pas *a priori* aisément mesurables, à supposer que l'on puisse trouver un système expérimental dont la modélisation en termes de modèle de pièges unidimensionnel serait pertinente, et ces fonctions présentent également un certain degré d'arbitraire dans leur définition, même si ces dernières sont motivées par des considérations physiques. Par conséquent, il serait intéressant de voir si une fonction de réponse, dont la définition laisse moins de place à l'arbitraire, et qui pourrait être mesurée expérimentalement, peut refléter ces comportements de vieillissement et de sous-vieillissement. Ce sera l'objet de la partie suivante.

2.5 Réponse linéaire et non linéaire à un biais

Nous avons jusqu'à présent considéré le modèle non biaisé pour lequel les probabilités de transition vers la droite et vers la gauche sont identiques : $q_+ = q_- = 1/2$. Nous allons maintenant aborder le cas de la marche faiblement biaisée en présence de désordre, en introduisant un biais h , indépendant du site, tel que $q_{\pm} = (1 \pm h)/2$ [33]. Ce problème de la réponse à un biais a d'ailleurs été étudié très récemment par des procédures de renormalisation [128, 127]. On peut noter que cette procédure est équivalente, tant que $h \ll 1$, à l'introduction d'un champ de force uniforme F , de faible intensité, qui transforme les taux de transition q_{\pm}^0 en $q_{\pm} = q_{\pm}^0 \exp(\pm Fa/2kT)$. Ici, a est le pas du réseau, qui est pris comme unité de longueur dans la suite ; la correspondance est ainsi $h = F/2kT$. Physiquement, cette force peut être due à un champ électrique externe dans le cas de matériaux conducteurs [143], ou à l'asymétrie de la composition de la chaîne d'ADN dans le modèle considéré en Réf. [96].

2.5.1 Réponse en déplacement et en courant

En ce qui concerne la définition de la fonction de réponse, les deux choix naturels sont d'une part la position moyenne de la marche une fois que le biais est appliqué, et d'autre part le courant de probabilité moyen (qui n'est rien d'autre que le courant électrique dans le cas d'un conducteur). En fait, il existe une relation formelle entre ces deux quantités, à savoir que le courant est la dérivée temporelle de la position moyenne. En appliquant un faible biais h à partir du temps t_w , et en mesurant les grandeurs à un temps ultérieur $t_w + t$, on peut définir pour un échantillon donné (une réalisation particulière du désordre) la position moyenne $x_h(t, t_w)$ et le courant de probabilité total $J_h(t, t_w)$ comme :

$$x_h(t, t_w) = \sum_n n P_n(t, t_w) \quad (2.69)$$

$$J_h(t, t_w) = \sum_n \phi_{n-1, n}(t, t_w) \quad (2.70)$$

où $\phi_{n-1, n} \equiv W_{n-1 \rightarrow n}^h P_{n-1} - W_{n \rightarrow n-1}^h P_n$ est le courant local. En dérivant $x_h(t, t_w)$ par rapport à t , on obtient :

$$\frac{\partial x_h}{\partial t} = \sum_n n \frac{\partial P_n}{\partial t} = \sum_n n [\phi_{n-1, n} - \phi_{n, n+1}] \quad (2.71)$$

En choisissant des conditions aux limites périodiques sur un réseau de taille L , dont la taille tendra vers l'infini à la fin du calcul, on peut montrer que la somme se réduit à $\sum_n \phi_{n-1, n}$, ce qui conduit à :

$$\frac{\partial x_h}{\partial t}(t, t_w) = J_h(t, t_w) \quad (2.72)$$

Notons que dans le modèle de pièges unidimensionnel, les taux de transition $W_{n \rightarrow n \pm 1}^h$ dépendent seulement de n (plus précisément de τ_n), de telle sorte que $J_h(t, t_w) = 0$ pour $h = 0$, ce qui implique que $x(t, t_w)$ est constant, et égal à $x(0, 0)$, pour toute réalisation du désordre. En moyennant sur le désordre, il est clair que l'Eq. (2.72) est également valide pour les quantités moyennes $\langle x \rangle_h(t, t_w)$ et $\langle J \rangle_h(t, t_w)$. Par conséquent, nous allons nous concentrer dans la suite uniquement sur l'étude du déplacement moyen en présence de biais, le comportement du courant pouvant s'en déduire aisément.

2.5.2 Arguments d'échelle et résultats numériques

Dans cette partie, nous donnons quelques arguments d'échelle simples afin de prédire le comportement de $\langle x \rangle_h(t, t_w)$ en fonction des trois variables t , t_w et h . Il est intéressant de constater que des régimes non triviaux apparaissent en raison du fait que les limites $h \rightarrow 0$ et $t, t_w \rightarrow \infty$ ne peuvent être permutées. Le cas particulier $t_w = 0$ a déjà été étudié dans la Réf. [44], où il a été montré qu'une ligne de transition apparaissait dans le plan $h, 1/t$. Rappelons brièvement ces arguments, car cela sera utile pour la suite. Il est commode d'introduire le nombre de pas typique N de la marche au bout d'un temps t , et d'exprimer à la fois $\langle x \rangle_h$ et t en fonction de N . Il est clair que $\langle x \rangle_h \simeq Nh$; en considérant maintenant le nombre typique de sites, \mathcal{N}_s , visités par la marche, \mathcal{N}_s peut s'écrire approximativement comme la somme d'un terme de dérive et d'un terme de diffusion :

$$\mathcal{N}_s \sim Nh + \sqrt{N} \quad (2.73)$$

Considérons tout d'abord le cas $Nh \gg \sqrt{N}$, qui correspond à $\mathcal{N}_s \sim Nh$. Etant donné que les temps de piégeage τ_i sont distribués selon $\psi(\tau) = \mu/\tau^{1+\mu}$, la somme

de M variables indépendantes τ_k se comporte comme $\sum_{k=1}^M \tau_k \sim M^{1/\mu}$. Comme chaque site est visité de l'ordre de N/\mathcal{N}_s fois, t peut s'exprimer de la manière suivante :

$$t \sim \frac{N}{\mathcal{N}_s} \sum_{i=-\mathcal{N}_s/2}^{\mathcal{N}_s/2} \tau_i \sim N \mathcal{N}_s^{\frac{1-\mu}{\mu}} \quad (2.74)$$

ce qui se réécrit $N \sim t^\mu h^{\mu-1}$. Finalement, on obtient pour $\langle x \rangle_h$:

$$\langle x \rangle_h \sim h^\mu t^\mu \quad (2.75)$$

Le critère $Nh \gg \sqrt{N}$ se traduit par $h^\mu t^\mu \gg h^{(\mu-1)/2} t^{\mu/2}$, ou de manière équivalente $t \gg t_h \sim h^{-(1+\mu)/(\mu)}$. Au contraire, si $Nh \ll \sqrt{N}$ alors $\mathcal{N}_s \sim \sqrt{N}$, et N et t sont reliés par $N \sim t^{2\mu\nu}$, de sorte que :

$$\langle x \rangle_h \sim h t^{2\mu\nu} \quad (2.76)$$

avec $\nu \equiv 1/(1+\mu)$ comme précédemment. Par conséquent, la réponse est linéaire en h , mais non linéaire en t pour $t \ll t_h$, et non linéaire à la fois en h et t pour $t \gg t_h$.

Considérons maintenant le régime de vieillissement, en supposant $t_w \gg 1$. Dans ce cas, si t est suffisamment petit (ce que nous préciserons par la suite), la marche évoluera essentiellement dans la région de l'espace de taille $\xi(t_w)$ qu'elle a déjà visité par diffusion avant t_w . Le temps de piégeage moyen $\bar{\tau}(t_w)$ à l'intérieur de cette région peut être estimé comme suit :

$$\bar{\tau}(t_w) \sim \int_1^{t_w^\nu} \frac{\mu d\tau}{\tau^{1+\mu}} \sim t_w^{\nu(1-\mu)} \quad (2.77)$$

en considérant la valeur moyenne de τ calculée à partir de la distribution $\psi(\tau)$, et en tenant compte de la coupure naturelle t_w^ν induite par la dynamique (on pourrait remplacer la borne supérieure par une pondération exponentielle, mais cela ne changerait pas l'argument d'échelle). Par conséquent, tant que la particule ne s'échappe pas de la région initiale, la position moyenne devrait dériver avec une vitesse constante égale à $h/\bar{\tau}(t_w)$ (rappelons que le pas du réseau est pris comme unité de longueur), ce qui conduit à :

$$\langle x \rangle_h \sim h t / t_w^{\nu(1-\mu)} \quad (2.78)$$

Ce régime de temps court est limité par deux conditions : tout d'abord, $|\xi(t_w+t) - \xi(t_w)| \ll \xi(t_w)$, ce qui implique $t \ll t_w$, et aussi $|\langle x \rangle_h| \ll \xi(t_w)$, ce qui nécessite $t \ll t^*$, où t^* est une nouvelle échelle de temps définie par $t^* \equiv t_w^\nu / h$. Il faut cependant remarquer que cette échelle de temps n'est physiquement pertinente que si $t^* < t_w$. Si on est dans la limite opposée $t \gg t_w$, alors t_w ne joue plus aucun rôle et on retrouve les résultats correspondant au cas $t_w = 0$. On doit donc distinguer entre plusieurs régimes, selon les valeurs relatives de t , t_w et t^* :

- $t^* \gg t_w$ (ou $h \ll h^* \sim t_w^{-\mu\nu}$). Dans ce cas, trois régimes différents apparaissent :

$$\langle x \rangle_h \sim h t / t_w^{\nu(1-\mu)} \quad t \ll t_w \quad (2.79)$$

$$\langle x \rangle_h \sim h t^{2\mu\nu} \quad t_w \ll t \ll t_h \quad (2.80)$$

$$\langle x \rangle_h \sim h^\mu t^\mu \quad t \gg t_h \quad (2.81)$$

avec $t_h \sim h^{-(1+\mu)/\mu}$ comme précédemment.

- $t^* \ll t_w$ (ou $h \gg h^*$). Le comportement de $\langle x \rangle_h$ peut être résumé comme suit :

$$\langle x \rangle_h \sim h t / t_w^{\nu(1-\mu)} \quad t \ll t^* \quad (2.82)$$

$$\langle x \rangle_h \sim h^\mu t^\mu \quad t \gg t^* \quad (2.83)$$

Il est intéressant de reformuler les équations précédentes en termes de fonctions d'échelle :

$$\langle x \rangle_h = h t_w^{2\mu\nu} f_1(t/t_w) \quad h \ll h^* \quad (2.84)$$

$$\langle x \rangle_h = t_w^{\mu\nu} f_2(ht/t_w^\nu) \quad h \gg h^* \quad (2.85)$$

les fonctions d'échelle $f_1(z)$ et $f_2(z)$ se comportant asymptotiquement comme :

$$f_1(z) \sim z \quad (z \ll 1), \quad f_1(z) \sim z^{2\mu\nu} \quad (z \gg 1) \quad (2.86)$$

$$f_2(z) \sim z \quad (z \ll 1), \quad f_2(z) \sim z^\mu \quad (z \gg 1) \quad (2.87)$$

Il faut noter que la fonction d'échelle $f_1(z)$ ne rend compte que du régime de temps décrit par les Eqs. (2.79,2.80), autrement dit pour $t \ll t_h$. Toutefois, comme nous sommes dans le cas d'un biais très faible $h \ll t_w^{-\mu\nu}$, t_h est donc beaucoup plus grand que t_w , de sorte que cette échelle de croisement est difficile à mettre en évidence numériquement. Il faut néanmoins garder à l'esprit que la réponse devient toujours non linéaire à temps suffisamment long, quelle que soit la valeur de h . Notons également que nous n'avons pas trouvé la façon d'inclure tous les régimes en t , t_w et h dans une seule fonction d'échelle.

Nous présentons maintenant les résultats numériques concernant la fonction de réponse, et nous les comparons avec les prédictions du paragraphe précédent. Dans le régime de très faible biais $h \ll h^*(t_w)$, la loi d'échelle prédite par l'Eq. (2.84) est bien vérifiée. La Fig. 2.12 (gauche) montre la remise à l'échelle des données pour trois valeurs de h ($h = 2.10^{-3}$, 5.10^{-3} et 8.10^{-3}) et trois valeurs de t_w ($t_w = 10^3$, 10^4 et 10^5), à la température $\mu = 1/2$.

Dans le régime opposé, $h^*(t_w) \ll h \ll 1$, l'Eq. (2.85) est également bien satisfaite, comme le montre la Fig. 2.12 (droite) pour des biais $h = 0.1$, 0.2 , 0.3 et des temps d'attente $t_w = 10^4$, 10^5 , 10^6 , 10^7 , toujours pour $\mu = \frac{1}{2}$. Pour ne pas surcharger la figure, les données correspondant à $h = 0.2$ et 0.3 sont présentées

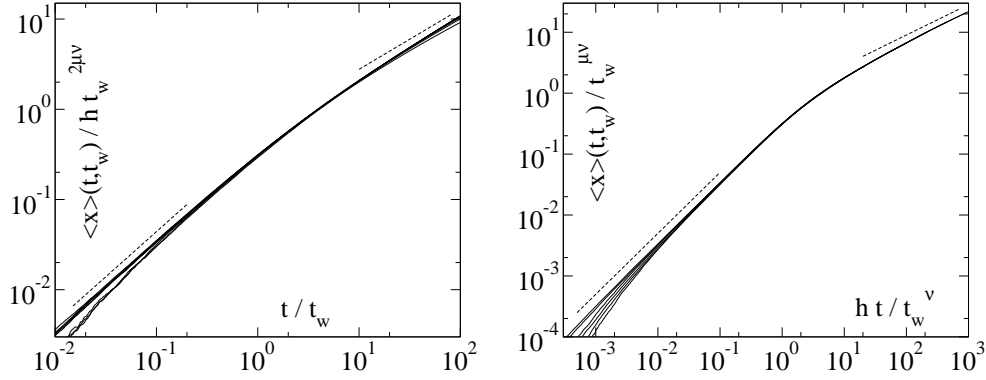


FIG. 2.12 – *A gauche* : réponse remise à l'échelle selon l'Eq. (2.84), pour $h = 2.10^{-3}, 5.10^{-3}, 8.10^{-3}$ et $t_w = 10^3, 10^4, 10^5$ ($\mu = 1/2$). La superposition des courbes est bonne, même si des déviations apparaissent à temps court et à temps long. Le comportement prédit pour la fonction d'échelle est bien satisfait (pointillés). *A droite* : même procédure pour le régime $h \gg h^*(t_w)$, en utilisant l'Eq. (2.85), pour $h = 0.1, 0.2, 0.3$, $t_w = 10^4, 10^5, 10^6, 10^7$ (cf. texte) et $\mu = 1/2$, montrant une excellente remise à l'échelle des données, sauf pour les temps courts où les effets de temps fini deviennent notables.

pour $t_w = 10^5$ seulement. Nous avons vérifié par ailleurs pour différentes valeurs de μ que les comportements à temps court et à temps long des fonctions d'échelle $f_1(z)$ et $f_2(z)$ était bien conformes aux prédictions des Eqs. (2.86,2.87) – cf. Fig. 2.12 pour le cas $\mu = 1/2$.

Si l'on souhaite établir un lien avec les fonctions de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ et $\Pi(t_w, t_w + t)$ définies dans la partie précédente, on peut raisonnablement associer $\langle x \rangle_h(t, t_w)$ avec $C(t_w, t_w + t)$, en raison de la loi d'échelle en t/t_w qui apparaît dans l'Eq. (2.84). Cependant, ceci reste limité au cas des très faibles biais. Dans le régime opposé $h \gg h^*(t_w)$, $\langle x \rangle_h(t, t_w)$ est une fonction de t/t^* ($t^* \sim t_w^\nu/h$), à un préfacteur près, ce dernier dépendant de t_w . Ainsi à h fixé, $\langle x \rangle_h(t, t_w)$ se comporte en t/t_w^ν , tout comme $\Pi(t_w, t_w + t)$. Cette relation n'est pas purement formelle, mais elle correspond en fait à la physique sous-jacente. Pendant l'intervalle de temps non biaisé $[0, t_w]$, la marche visite typiquement des pièges de profondeur $\sim t_w^\nu$. Une fois que le biais est appliqué, l'évolution est dominée par ces pièges profonds, avant d'atteindre finalement un régime de temps long dans lequel la mémoire du vieillissement jusqu'à t_w a été perdue. Si le biais est très faible, la marche va visiter ces pièges un grand nombre de fois, d'ordre $t_w^{\mu\nu}$, et la dynamique de vieillissement ressemble alors beaucoup à celle de $C(t_w, t_w + t)$ en l'absence de biais. Au contraire, si h est suffisamment grand (tout en restant petit devant 1), la marche visitera un nombre fini de fois (quand $t_w \rightarrow \infty$), d'ordre $1/h$, les pièges les plus profonds occupés au temps t_w , de sorte que le vieillissement est cette fois dominé par le temps nécessaire pour sortir de ces pièges pour la première fois, en étroite analogie

avec $\Pi(t_w, t_w + t)$. De plus, il est intéressant de mentionner que si on applique le biais à partir de l'instant initial au lieu d'attendre jusqu'à t_w , mais que l'on regarde néanmoins le déplacement entre les deux temps t_w et $t_w + t$, on observe des lois d'échelle différentes. Pour h très petit, on retrouve $\langle x \rangle(t, t_w) = ht_w^{2\mu\nu} f_1(t/t_w)$ comme précédemment, mais pour des valeurs plus grandes de h , on trouve une loi d'échelle de la forme $\langle x \rangle(t, t_w) = t_w^\mu f_3(ht/t_w)$. Dans ce cas, un comportement en t/t_w apparaît également, mais pour une raison différente : à cause du biais, les temps de piégeage typiques atteints après un temps t_w sont maintenant d'ordre t_w et non plus d'ordre t_w^ν , et la marche visite ces pièges un nombre fini de fois, d'ordre $1/h$, après t_w .

2.5.3 Autocorrélation et relation de fluctuation dissipation

Au-delà des fonctions de corrélation C et Π considérées ci-dessus, l'autocorrélation naturelle associée à $\langle x \rangle_h$ est le déplacement quadratique moyen restreint à l'intervalle de temps $[t_w, t_w + t]$, en l'absence de biais :

$$\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w) \equiv \langle [x(t_w + t) - x(t_w)]^2 \rangle_0 \quad (2.88)$$

où les crochets $\langle \dots \rangle$ désignent à la fois une moyenne thermique (sur les marcheurs), et une moyenne sur le désordre gelé. En utilisant le temps de piégeage effectif $\bar{\tau}(t_w)$, on peut aussi estimer $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w)$ dans le régime diffusif de temps court comme $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w) \sim t/\bar{\tau}(t_w)$. Cette expression ne peut être valide que si $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w) \ll \xi(t_w)^2$, ce qui implique $t \ll t_w$. Dans le régime opposé, $t \gg t_w$, on retrouve asymptotiquement le même résultat que pour $t_w = 0$, à savoir $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w) \sim \xi(t_w + t)^2 \sim \xi(t)^2$. En résumé :

$$\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w) \sim t/t_w^{\nu(1-\mu)} \quad t \ll t_w \quad (2.89)$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w) \sim t^{2\mu\nu} \quad t \gg t_w \quad (2.90)$$

Cela signifie que $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w)$ peut s'écrire sous la forme d'échelle :

$$\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w) = t_w^{2\mu\nu} g(t/t_w) \quad (2.91)$$

La Fig. 2.13 présente les données numériques obtenues pour $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w)$, avec des temps d'attente t_w allant de 10^3 à 10^7 , en utilisant l'Eq. (2.91). On constate que la remise à l'échelle est parfaite, les différentes courbes ne pouvant être distinguées à l'œil.

Etant donné les quantités que nous venons de calculer, il est maintenant naturel de tester la relation de Fluctuation-Dissipation (RFD), ou relation d'Einstein. C'est ce que nous faisons en encart de la Fig. 2.13, qui montre $\langle x \rangle_h(t, t_w)/h$ en fonction de $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w)$ en échelle logarithmique, pour $h = 5.10^{-3}$, $t_w = 10^3$ et $\mu = 1/2$. Cette relation s'avère bien vérifiée sur l'ensemble du domaine temporel où la réponse est linéaire (c'est-à-dire pour $t \ll t_h$), bien que ce système soit

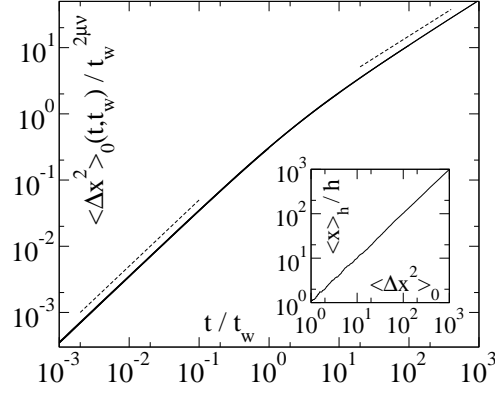


FIG. 2.13 – *A gauche* : autocorrélation $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w)$ en l’absence de biais, remise à l’échelle selon l’Eq. (2.91), pour $t_w = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 , et $\mu = 1/2$. Les différentes courbes ne sont pas distinguables à l’œil. Les pointillés indiquent les pentes 1 et $2/3$ respectivement. Pour des raisons de temps de calcul, t est limité à 10^7 . *Encart* : tracé de la RFD $\langle x \rangle_h(t, t_w)/h$ en fonction de $\langle \Delta x^2 \rangle_0(t, t_w)$, pour $t_w = 10^3$, $h = 5 \cdot 10^{-3}$ et $\mu = 1/2$. La RFD est clairement vérifiée dans tout le régime temporel où la réponse reste linéaire ($t \ll t_h \approx 10^7$).

fortement hors d’équilibre. Ce résultat diffère notablement de ceux obtenus dans de nombreux modèles désordonnés pour lesquels la RFD est modifiée même dans le régime linéaire [58].

Nous proposons maintenant un argument général afin de démontrer la validité de cette RFD pour le modèle de piège unidimensionnel en régime de vieillissement. Il a été montré dans la Réf. [44] que pour une réalisation *donnée* du désordre, et une position initiale $x(t_w)$ donnée, la relation de fluctuation dissipation suivante était valide, dans la limite $h \rightarrow 0$ et dans le régime temporel où la réponse reste linéaire en h :

$$\langle \Delta x \rangle_h = \langle \Delta x \rangle_0 + h[\langle \Delta x^2 \rangle_0 - \langle \Delta x \rangle_0^2] \quad (2.92)$$

avec $\Delta x \equiv x(t_w + t) - x(t_w)$, et t fini. Pour des raisons de clarté, nous distinguons ici la moyenne sur les histoires thermiques *après* t_w , notée $\langle \dots \rangle$, et la moyenne sur les histoires thermiques *avant* t_w – donc sur $x(t_w)$ – et sur le désordre $\langle \dots \rangle$. En appliquant maintenant cette deuxième moyenne à l’équation précédente, on obtient :

$$\overline{\langle x \rangle}_h(t, t_w) = \frac{F}{2kT} \overline{\langle \Delta x^2 \rangle}_0(t, t_w) \quad (2.93)$$

dans laquelle nous avons utilisé le fait que pour le modèle de pièges, $\langle \Delta x \rangle_0 = 0$ – cf. Eq. (2.72) – et h a été remplacé par son expression “physique” $F/2kT$. Nous en concluons donc que la RFD est bien valide dans ce régime hors d’équilibre et désordonné, tant que la réponse reste linéaire, et avec une température égale à

celle du bain thermique T . En particulier, cela implique que les fonctions d'échelle $f_1(\cdot)$ et $g(\cdot)$ sont identiques. Remarquons aussi qu'une telle relation d'Einstein en régime de vieillissement a déjà été trouvée dans la version "recuite" du modèle [11].

En conclusion, on peut noter que l'influence d'un biais extérieur sur des systèmes désordonnés peut se révéler hautement non triviale. Dans le modèle de pièges unidimensionnel présenté ici, nous avons déjà trouvé plusieurs régimes à l'intérieur du "cube" t, t_w, h . Un des résultats les plus intéressants est que la réponse devient non linéaire à temps long, même dans la limite où le biais tend vers 0. On peut s'attendre à ce que cet effet soit assez générique, et il a déjà été observé, de manière directe ou indirecte, dans des travaux théoriques et expérimentaux sur le rôle du champ magnétique dans la dynamique des verres de spins [59, 158].

Il est également possible d'étendre les arguments précédents au cas du modèle de Sinai en présence d'un biais externe [116]. Déjà dans le cas d'une faible force extérieure F , avec $t_w = 0$, on trouve en général quatre régimes distincts pour le déplacement moyen $\langle x \rangle$: il apparaît en particulier un régime où $\langle x \rangle$ croît comme $\ln^2 t$, mais avec un préfacteur indépendant de F , avant d'atteindre le régime asymptotique dans lequel $\langle x \rangle \sim t^{\alpha F}$. Dans d'autres exemples, comme les marches aléatoires sur un réseau de percolation, la réponse peut même devenir non monotone avec F [44, 45].

Chapitre 3

Dynamique vitreuse dans l'espace réel

3.1 De l'espace des phases à l'espace réel

La compréhension de la dynamique vitreuse a nettement progressé dès lors que les physiciens se sont mis à interpréter cette dynamique en termes d'espace des phases (voir par exemple [88]), c'est-à-dire l'espace abstrait dont chaque dimension correspond à un degré de liberté du système physique. Une telle approche a permis de comprendre que les systèmes vitreux possèdent de très nombreux minima locaux dans leur espace des phases, et que cette propriété impliquait un fort ralentissement de la relaxation à basse température, c'est-à-dire lorsque l'énergie cinétique devient faible et que les barrières d'énergie potentielle se font sentir. Bien que déjà ancienne, cette approche a connu un fort regain d'intérêt ces dernières années, d'une part grâce à la puissance croissante des moyens de calcul numérique, et d'autre part en raison du fait que les théories dynamiques de champ moyen ont validé ce scénario du paysage d'énergie.

L'importance de la notion de paysage d'énergie peut maintenant être considérée comme assez bien établie (même si quelques voix discordantes se font entendre [26]). Nous avons dans la première partie de cette thèse tenté de mieux comprendre ces notions de dynamique dans l'espace des phases à l'aide de modèles simples. Toutefois, une question demeure : quelle est la nature, dans l'espace réel, des structures impliquées dans le vieillissement, comme les nombreux minima locaux dans l'espace des phases ? Bien entendu, le fait de ramener la dynamique d'un système à N corps à l'évolution d'un point dans l'espace des phases n'est pas en soi une approximation. La simplification vient ensuite lorsque l'on suppose que l'espace des phases possède une structure simple, par exemple que tous les minima sont connectés, autrement dit que des transitions directes entre tous les minima sont possibles. Or on s'attend à ce que la structure de l'espace des phases d'un système de dimension finie soit en fait extrêmement complexe, et on peut s'en convaincre par la remarque suivante. Un système de dimension d finie peut *a priori*, s'il est de taille assez grande, être décomposé en sous-systèmes essentiel-

lement indépendants. En d'autres termes, l'évolution du système en deux points éloignés est indépendante. Cette remarque suggère donc qu'il existe une échelle de longueur ℓ caractéristique telle que des sous-systèmes de taille supérieure à ℓ sont (presque) indépendants, au moins en ce qui concerne leur comportement dynamique.

Dans ce chapitre, nous allons tenter de mieux cerner les caractéristiques en termes d'espace réel de la dynamique vitreuse, en accordant une attention particulière à la notion d'échelle de longueur. Nous ferons appel à deux modèles sur réseau de nature assez différente : le premier modèle possède une énergie, et sa dynamique à basse température consiste donc à abaisser progressivement cette énergie, alors que le second modèle est athermique et évolue grâce à des réarrangements locaux. Comme précédemment, nous utiliserons largement les simulations numériques dans cette étude, mais nous pourrons également obtenir dans le deuxième modèle mentionné ci-dessus un certain nombre de résultats analytiques.

3.2 Deux échelles de longueur pour les systèmes désordonnés

L'existence d'une échelle de longueur croissante associée avec la transition vitreuse a fait l'objet de nombreuses études au cours de la dernière décennie, car cela signifierait que la transition vitreuse appartient dans un certain sens à la famille des phénomènes critiques pour laquelle des méthodes d'étude génériques ont été développées. Une telle échelle de longueur permettrait également de mieux comprendre pourquoi le temps de relaxation augmente fortement en baissant la température, car il serait alors associé à l'évolution de structures de plus en plus grandes. Ce thème a engendré des débats pendant longtemps du fait de la présence de désordre à l'échelle microscopique, qu'il soit gelé ou "auto-induit", ce qui rend inapplicables la plupart des outils comme les fonctions de corrélation spatiales à deux points, ou les facteurs de structure. Même si la situation commence seulement à s'éclaircir pour les systèmes sans désordre, il faut reconnaître que des méthodes efficaces ont été développées depuis plusieurs années maintenant pour étudier la structure spatiale des systèmes désordonnés en dimension finie, grâce à la notion de répliques (réelles) : en comparant l'évolution, avec des histoires thermiques indépendantes, de deux copies d'un même système (c'est-à-dire avec les mêmes réalisations du désordre), on parvient à identifier sans ambiguïté une échelle de longueur, qui caractérise des fonctions de corrélation à quatre points (deux sites et deux répliques). Les études portant sur l'existence d'une échelle de longueur dans les modèles de verres de spins, par simulations numériques pour l'essentiel, se sont intéressées d'une part à la longueur de corrélation d'équilibre [123, 122], et d'autre part à la longueur de cohérence dans le régime hors d'équilibre [104, 121], dont il a été constaté qu'elle croissait au cours du temps comme une loi de puissance avec un exposant faible. Remarquons également que

la croissance de cette échelle de longueur semble avoir un lien important avec les propriétés d'échelle des grandeurs physiques que l'on peut mesurer par ailleurs [107, 108, 109], et que cette longueur a pu être mise en évidence de manière indirecte dans des verres de spins expérimentaux, en testant l'effet d'un champ magnétique [97].

D'autre part, de nombreux travaux se sont également intéressés à la notion de structure inhérente dans les systèmes vitreux, désordonnés ou non, ce qui constitue une approche en termes d'espace des phases. Cette notion est apparue très intéressante pour la compréhension de la dynamique vitreuse. Ce n'est que très récemment que la question des propriétés dans l'espace réel de ces structures inhérentes a été clairement posée, principalement dans le cadre des systèmes sans désordre. Il a été montré en particulier que les modèles définis par un Hamiltonien trivial, mais avec des contraintes cinétiques, peuvent être décrits (à une dimension d'espace en tout cas) en termes de trajectoires d'espace-temps des parois de domaines associées à la structure inhérente visitée à l'instant t , sans devoir faire référence à des notions d'espace des phases [25].

Par ailleurs, il est clair que le vieillissement dans les systèmes possédant un hamiltonien devrait être associé avec une lente et irréversible décroissance de l'énergie totale. C'est en effet ce qui se produit dans les modèles avec contraintes cinétiques que nous venons de mentionner : dans ce cas, l'énergie est contenue dans les défauts, et elle décroît par annihilation de ces défauts lorsqu'ils se rencontrent en diffusant [25]. Cependant, si ce scénario basé sur l'évolution de défauts peut sembler générique dans le contexte des modèles sans désordre à contraintes cinétiques, il paraît difficilement transposable à des modèles avec désordre gelé, pour lesquels il existe des corrélations statiques complexes. Il apparaît donc particulièrement intéressant de tenter de donner une caractérisation spatiale des structures inhérentes dans des systèmes possédant un hamiltonien non trivial.

Dans ce chapitre, nous introduisons un modèle sur réseau avec désordre gelé, qui peut être considéré comme une sorte de description générique effective, à une échelle intermédiaire, des systèmes désordonnés. Nous nous limitons ici à l'étude du cas unidimensionnel, qui est déjà très riche. Nous calculons d'abord numériquement les grandeurs thermodynamiques d'équilibre telles que l'énergie libre et l'entropie, ce qui permet de conclure qu'il n'y a pas de transition vitreuse stricte à température finie dans ce modèle, au sens où l'entropie par degrés de liberté reste finie (non nulle) pour tout $T > 0$. Mais à température suffisamment basse, les temps de relaxation deviennent très grands, de sorte qu'un régime de vieillissement apparaît sur une large fenêtre temporelle. Ces propriétés de vieillissement sont mises en évidence grâce à une fonction de corrélation à deux temps, qui se remet à l'échelle en t/t_w . Nous étudions alors une fonction de corrélation spatiale à deux répliques, ce qui permet de définir une première échelle de longueur caractérisant la dynamique. Nous analysons ensuite les propriétés spatiales des minima locaux de l'énergie dans l'espace des phases (que l'on appelle dans ce contexte des structures inhérentes), en introduisant un ingrédient clé qui consiste à tester si une structure inhérente minimise localement son énergie, en fixant des

conditions aux limites dont on varie la géométrie. Ceci permet de montrer, au moins en $d = 1$, que les structures inhérentes s'organisent en domaines ayant un faible recouvrement, et dont la taille est distribuée exponentiellement. La taille typique de ces domaines croît en fonction du temps. En comparant avec l'échelle de longueur dynamique obtenue à partir d'une fonction de corrélation à deux répliques, on peut conclure que l'échelle de longueur caractérisant les structures inhérentes est indépendante de celle issue des répliques suggérant un scénario à deux échelles de longueurs pour le vieillissement dans l'espace réel des systèmes désordonnés. Nous mentionnerons également le lien entre énergie et échelle de longueur dans ces structures inhérentes, ainsi qu'une généralisation aux systèmes sans désordre spatial.

3.2.1 Modèle sur réseau avec interactions aléatoires

Nous allons introduire un modèle sur réseau qui correspond à une vision à une échelle intermédiaire des systèmes vitreux présentant du désordre gelé. Si l'on regroupe par blocs les degrés de libertés élémentaires du système (par exemple des spins) comme on le ferait dans la première étape d'une procédure de renormalisation dans l'espace réel, chaque bloc peut prendre un certain nombre d'états, ce nombre pouvant être éventuellement grand devant 1 selon la taille des blocs. L'énergie du système se décompose alors en deux contributions, un terme correspondant à l'énergie propre de la configuration du bloc, et un terme d'interaction avec les blocs voisins. Il est raisonnable de penser que les propriétés non triviales de la dynamique, si elles existent, vont provenir essentiellement des termes d'interactions entre blocs (pensons par exemple au modèle d'Ising pour s'en convaincre). Nous ne prendrons donc en compte que les termes d'interactions dans le modèle que nous allons maintenant présenter, et ces énergies seront de plus considérées comme des variables aléatoires gelées indépendantes, ce qui correspond à l'hypothèse la plus simple. La définition du modèle dans le cas général est la suivante : sur chaque site i d'un réseau de dimension d , on introduit une variable entière $q_i = 1 \dots M$ qui caractérise l'état local du système. On supposera le réseau de taille finie, avec un nombre de sites N , et on utilisera des conditions aux limites périodiques. Un hamiltonien H est ensuite défini par la relation $H = \sum_{\langle i,j \rangle} V_{i,j}(q_i, q_j)$, où la somme porte sur les plus proches voisins uniquement. Le potentiel d'interaction $V_{i,j}(q_i, q_j)$ est une variable aléatoire gelée, tirée pour chaque lien (i, j) et chaque valeur de q_i et q_j à partir d'une distribution $\rho(V)$. Ce modèle est en quelque sorte une généralisation du modèle de Potts désordonné à M états, puisque dans ce dernier cas on suppose que $V_{i,j}$ peut prendre seulement deux valeurs distinctes, une pour $q_i = q_j$ et l'autre pour $q_i \neq q_j$. Au contraire, dans le modèle que nous proposons ici, $V_{i,j}$ peut prendre M^2 valeurs distinctes. En outre, ce modèle pourrait être défini de manière plus générale en incluant un terme d'énergie sur chaque site, en plus des interactions de liens, ce qui permettrait notamment de définir un champ extérieur. Nous allons cependant nous concentrer sur le cas le plus simple, pour lequel seule l'énergie de lien est prise

en compte (comme cela a été discuté plus haut), et pour la dimension d'espace $d = 1$.

Nous avons étudié numériquement les propriétés thermodynamiques de ce modèle, à savoir l'énergie libre par degré de liberté $F(T)$ et l'entropie par degré de liberté $S(T)$, en fonction de la température T . A une dimension, ces quantités peuvent être calculées exactement en utilisant des méthodes de matrices de transfert. Il est commode d'introduire pour chaque site i la matrice R_i de taille $M \times M$, définie par :

$$R_i(q, q') = \exp \left[-\frac{1}{T} V_{i,i+1}(q, q') \right] \quad (3.1)$$

Le terme $R_i(q, q')$ est bien entendu le poids de Boltzmann associé au lien $(i, i+1)$ lorsque les sites i et $i+1$ sont dans les états q et q' respectivement. La fonction de partition $Z(T)$ s'exprime comme la trace du produit des matrices R_i :

$$Z(T) = \text{Tr} \prod_{i=1}^N R_i \quad 1 \leq q, q' \leq M \quad (3.2)$$

Par conséquent, Z peut se calculer numériquement avec une grande précision. On en déduit $F(T)$ et $S(T)$ par les relations usuelles :

$$F(T) = -\frac{T}{N} \ln Z(T) \quad S(T) = -\frac{\partial F}{\partial T} \quad (3.3)$$

Notons que dans la limite $T \rightarrow \infty$, le calcul de Z se simplifie beaucoup puisque $R_i(q, q') \rightarrow 1$, d'où l'on déduit que $Z = M^N$. On obtient ainsi $F_\infty(T) \simeq -T \ln M$ et $S_\infty = \ln M$, cette dernière valeur étant confirmée par les calculs numériques. Les calculs présentés ci-dessus correspondent en fait aux propriétés thermodynamiques d'une réalisation particulière, et devraient en principe être moyennés sur le désordre. Néanmoins, on sait que pour des systèmes de grande taille N dont la fonction de partition se factorise, les quantités thermodynamiques sont automoyennantes [57], et on constate bien numériquement que les valeurs obtenues sur un échantillon de grande taille convergent vers les valeurs moyennes sur le désordre. Ceci se justifie aisément, puisqu'on peut décomposer le système en sous-systèmes quasi-indépendants, et que l'énergie libre d'un grand échantillon peut donc être considérée comme la moyenne de l'énergie libre des sous-échantillons.

Les résultats sont présentés sur la Fig. 3.1, montrant à la fois l'énergie libre $F(T)$ et l'entropie $S(T)$ en fonction de la température pour différentes valeurs de M , à savoir $M = 5, 10$ et 20 . On voit que l'entropie reste finie pour toute valeur de température T non nulle, ce qui montre qu'il n'y a pas de transition vitreuse statique dans ce modèle à température finie. Cependant, on peut s'attendre à ce que le temps d'équilibration $\tau(T)$ devienne grand à basse température et que des effets vitreux apparaissent dans une certaine fenêtre temporelle. Nous allons introduire une fonction de corrélation temporelle afin de caractériser quantitativement ce temps de relaxation.

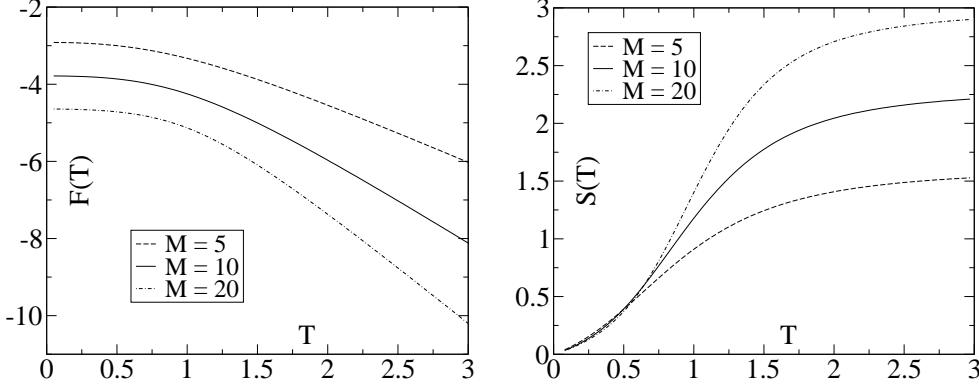


FIG. 3.1 – *A gauche : énergie libre du modèle en fonction de la température, pour $M = 5$, $M = 10$ et $M = 20$. A droite : entropie en fonction de la température, pour les mêmes valeurs de M . La décroissance pour T tendant vers 0 est régulière, et ne présente pas de trace d'une transition vitreuse thermodynamique à température finie.*

3.2.2 Dynamique de vieillissement

En considérant maintenant la dynamique, il est tout d'abord nécessaire de définir les règles d'évolution du modèle. Nous choisissons une dynamique locale, qui satisfait le bilan détaillé : tous les sites évoluent indépendamment les uns des autres avec un taux de transition w_i qui dépend de la configuration du site et de celle des sites voisins. Par simplicité, nous choisissons des taux de transition activés :

$$w_i(\{q\} \rightarrow \{q'\}) = \frac{\Gamma_0}{M} e^{U_i(\{q\})/T} \quad (3.4)$$

où Γ_0 est une échelle de fréquence microscopique, et U_i peut être considérée comme l'énergie potentielle locale du site i :

$$U_i(\{q\}) = \sum_{j \in \mathcal{V}(i)} V_{i,j}(q_i, q_j) \quad (3.5)$$

$\mathcal{V}(i)$ étant le plus proche voisinage du site i . Lorsqu'un site change de configuration q , il choisit aléatoirement parmi les M états possibles avec une probabilité uniforme (il peut ainsi arriver que la nouvelle configuration q' choisie soit la même que l'ancienne). Naturellement, d'autres dynamiques peuvent être utilisées dans ce modèle, mais nous avons vérifié (cf. paragraphe 3.2.4) que les résultats que nous présentons dans ce chapitre ne dépendent pas, pour l'essentiel, du choix de la dynamique, dans la mesure où celle-ci respecte le bilan détaillé.

Afin de mettre en évidence la dynamique de vieillissement qui apparaît pour des temps inférieurs au temps d'équilibration $\tau(T)$ quand ce dernier devient très grand, nous introduisons une fonction de corrélation temporelle simple $C(t_w, t_w +$

t) définie comme le recouvrement moyen entre les configurations occupées aux instants t_w et $t_w + t$:

$$C(t_w, t_w + t) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \delta_{q_i(t_w), q_i(t_w+t)} \right\rangle \quad (3.6)$$

Nous avons calculé numériquement cette fonction de corrélation en utilisant un algorithme de Monte-Carlo, et les résultats sont présentés sur la Fig. 3.2, pour un nombre d'états locaux $M = 10$. A la température $T = 0.2$, on observe pour des temps d'attente compris entre $t_w = 10^4$ et 10^7 un régime de vieillissement, qui est bien mis en évidence par la superposition des courbes une fois tracées en fonction de t/t_w , ce qui signifie que l'on est en présence de vieillissement simple. Néanmoins, on sait que ce régime de vieillissement ne peut exister que pour des temps inférieurs au temps d'équilibration $\tau_{erg}(T)$, et qu'une transition doit s'opérer entre une dynamique de vieillissement pour $t_w \ll \tau_{erg}(T)$ (avec cependant $t_w \gg \Gamma_0^{-1}$), et le régime d'équilibre pour $t_w \gg \tau_{erg}(T)$. Pour visualiser ce changement de régime, nous avons également tracé sur la Fig. 3.2 la fonction de corrélation pour une température plus élevée, $T = 0.4$. L'approche de l'équilibre se traduit par la saturation du temps de relaxation de $C(t_w, t_w + t)$ à mesure que t_w augmente, et par l'apparition d'un plateau de hauteur croissante dans la fonction de corrélation (même s'il faudrait atteindre des temps plus longs pour l'identifier clairement). Ce plateau s'explique par le fait que pour des valeurs finies de M , la probabilité de se trouver localement dans le même état q à t_w et à $t_w + t$ reste finie, et devient très grande à l'équilibre, puisqu'à basse température, la mesure de Gibbs est alors concentrée sur les états de plus basse énergie. Cela signifie d'ailleurs que même en régime de vieillissement, la fonction de corrélation doit converger pour $t \rightarrow \infty$ vers une valeur non nulle, mais cette valeur reste sans doute très petite tant que $t_w \ll \tau_{erg}(T)$. On peut de ce fait s'attendre à ce qu'il existe dans ce dernier cas de légers écarts à la loi d'échelle en t/t_w pour $t \gg t_w$.

Il est possible d'estimer la valeur de $\tau_{erg}(T)$ en fonction de la température, en regardant au bout de quel temps t_w les courbes commencent à se superposer. Bien qu'*a priori* assez grossière (les barres d'erreurs valent environ une demie décade), cette estimation permet tout de même de constater que $\tau_{erg}(T)$ se comporte pour l'essentiel comme une loi d'Arrhénius, $\tau_{erg}(T) \sim \exp(\Delta/T)$ – cf. encart de la Fig. 3.2 (droite). Un ajustement donne la valeur $\Delta = 7.24$.

3.2.3 Corrélation spatiale à deux répliques

Comme rappelé dans l'introduction, une manière désormais classique de déterminer une longueur de cohérence dans les systèmes désordonnés est d'introduire une fonction de corrélation à quatre points, qui associe deux sites i et j du réseau et deux répliques a et b du système, c'est-à-dire deux copies d'un même système, avec le même désordre gelé, mais qui évoluent à partir de conditions initiales distinctes et avec des histoires thermiques différentes. En introduisant

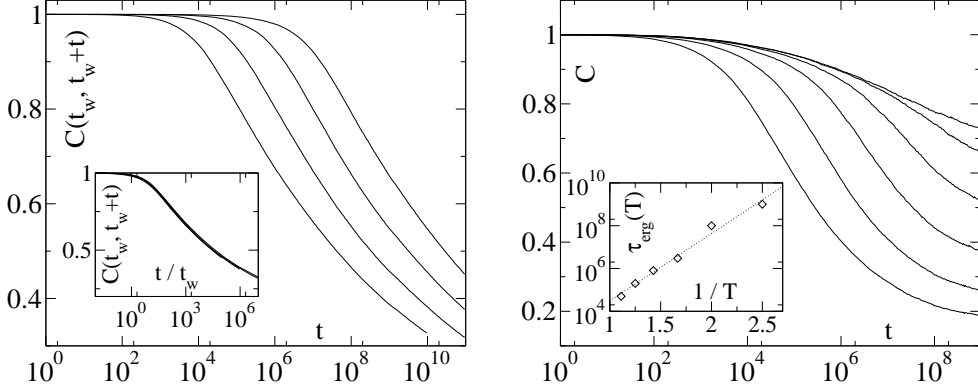


FIG. 3.2 – Fonction de corrélation temporelle $C(t_w, t_w + t)$. A gauche : en régime de vieillissement pour $T = 0.2$, avec $t_w = 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 . Les courbes se superposent une fois tracées en fonction de t/t_w (encart). A droite : transition entre le régime de vieillissement et le régime d'équilibre ($T = 0.4$, t_w varie de 10^4 à 10^9). Le temps de relaxation sature lorsque t_w atteint le temps d'équilibre $\tau_{erg}(T)$, et un plateau dont la valeur augmente avec t_w apparaît; $\tau_{erg}(T)$ se comporte essentiellement en loi d'Arrhénius $\tau_{erg}(T) \sim e^{\Delta/T}$ avec la température (encart). Les barres d'erreur sont d'environ une demie décade. Pointillés : ajustement avec $\Delta = 7.24$.

pour simplifier les notations une variable $S_i(t)$ égale à :

$$S_i(t) = \delta_{q_i^a(t), q_i^b(t)} \quad (3.7)$$

qui compare, à un instant t donné, l'état des deux répliques a et b , la fonction de corrélation $C_{a,b}(r, t)$ est définie comme une covariance normalisée des variables $S_i(t)$ et $S_{i+r}(t)$:

$$C_{a,b}(r, t) = \frac{\langle S_i(t) S_{i+r}(t) \rangle_i - \langle S_i(t) \rangle_i^2}{\langle S_i(t)^2 \rangle_i - \langle S_i(t) \rangle_i^2} \quad (3.8)$$

où $\langle \dots \rangle_i$ indique simultanément une moyenne sur les sites i , sur les histoires thermiques et sur le désordre. La Fig. 3.3 (gauche) montre les résultats numériques obtenus pour cette fonction de corrélation à la température $T = 0.4$, pour différents temps t . On voit nettement que la longueur caractéristique de la décroissance de $C_{a,b}(r, t)$ augmente avec t , tout en restant à des valeurs assez faibles de quelques pas du réseau, comme on le constate habituellement dans les modèles où cette procédure a été appliquée [121, 104]. La longueur $\xi(t, T)$ a été déterminée par un ajustement exponentiel des données. Même si nous ne sommes pas certains que la décroissance soit purement exponentielle, et que cette détermination peut donc s'avérer discutable, il s'agit de la méthode la plus fiable que nous ayons

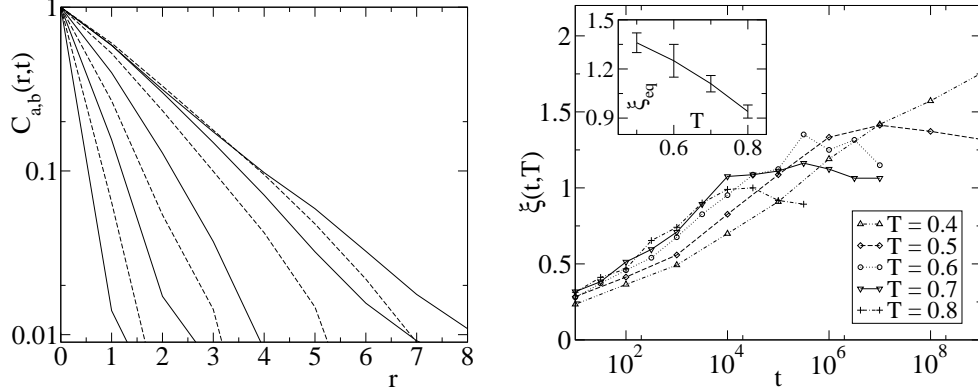


FIG. 3.3 – *A gauche* : fonction de corrélation spatiale à deux répliques $C_{a,b}(r,t)$ en fonction de r pour différents temps t allant de $t = 10$ à $t = 10^9$, par incrément d'une décade, et pour une température $T = 0.4$. *A droite* : comportement temporel de l'échelle de longueur caractéristique $\xi(t,T)$ de la corrélation $C_{a,b}(r,t)$, pour différentes températures allant de $T = 0.4$ à $T = 0.8$. La valeur d'équilibre $\xi_{eq}(T)$ déduite de la saturation à temps long est présentée en encart.

trouvée. En particulier, une détermination par la relation :

$$\xi = \frac{\sum_r r C_{a,b}(r,t)}{\sum_r C_{a,b}(r,t)} \quad (3.9)$$

se révèle très sensible aux fluctuations autour de 0 de $C_{a,b}(r,t)$ à grand r .

L'évolution temporelle de $\xi(t,T)$ est présentée sur la Fig. 3.3 (droite), pour différentes températures. Pour chaque température, cette longueur croît au cours du temps, en partant d'une valeur initiale très faible, jusqu'à atteindre la valeur d'équilibre $\xi_{eq}(T)$. La dépendance de ξ_{eq} avec la température est tracée en encart.

Notons à ce stade qu'une autre manière assez classique de déterminer une longueur de corrélation à l'équilibre est de considérer la convergence de l'énergie libre (par site) vers sa limite $F(T)$ en fonction de la taille N du système. En effet, si l'on considère l'énergie libre d'un système de taille finie $F(T,N)$ (moyennée sur le désordre), on peut montrer dans les systèmes sans désordre que la convergence avec N se produit justement sur l'échelle caractéristique $\xi_{eq}(T)$:

$$F(T,N) = F(T) + a e^{-N/\xi_{eq}(T)} \quad (3.10)$$

En étudiant cette convergence en fonction de N dans le modèle qui nous intéresse ici, nous avons constaté que la décroissance ne semble pas exponentielle, mais plutôt assez proche d'une loi de puissance en $1/N^3$, ce qui n'a pas permis de définir précisément une échelle de longueur associée. Nous ne pouvons cependant pas conclure avec certitude sur la dépendance fonctionnelle en N car les données sont encore trop bruitées, et il n'est pas exclu que pour des écarts relatifs entre

$F(T, N)$ et $F(T)$ inférieurs à 10^{-3} (ce qui correspond à $N \gtrsim 10$), la dépendance puisse devenir exponentielle. Quoi qu'il en soit, l'échelle de longueur que l'on peut raisonnablement déduire par inspection visuelle de la décroissance de $F(T, N)$ est de l'ordre de 1 à 2 pas du réseau, ce qui est cohérent avec les résultats obtenus pour la corrélation à deux répliques $C_{a,b}(r, t)$.

3.2.4 Etude des structures inhérentes

Méthode de détermination

Nous arrivons maintenant au cœur de cette étude, à savoir la caractérisation des propriétés spatiales des structures inhérentes, ou minima locaux de l'énergie potentielle. Dans ce but, nous commençons par définir précisément ces structures inhérentes (SI) dans le contexte de ce modèle : une SI est définie comme une configuration du système à partir de laquelle il n'est pas possible d'abaisser l'énergie globale en changeant l'état d'un seul site. D'autres définitions seraient possibles, comme le fait de ne pas pouvoir abaisser l'énergie en changeant l'état de k sites, pour un k donné ou même pour tout k fini. Nous nous contenterons cependant de la définition la moins restrictive, c'est-à-dire $k = 1$. Une SI peut être associée de manière non ambiguë à chaque configuration instantanée, par un algorithme déterministe : en partant d'une configuration donnée, on peut chercher à chaque pas quel est le mouvement, ne faisant intervenir qu'un seul site, qui abaisse le plus possible l'énergie globale. Cette procédure est répétée jusqu'à ce qu'une SI soit atteinte et qu'on ne puisse donc plus diminuer l'énergie de cette manière.

Propriétés spatiales des structures inhérentes

Une fois qu'une SI a été déterminée, comment peut-on caractériser sa structure spatiale ? Nous voudrions préciser quantitativement, et du point de vue de l'espace réel (par opposition à l'espace des phases) le fait que des SI avec des énergies de plus en plus basses sont visitées à mesure que le temps s'écoule. De plus, dans un espace de dimension finie, on peut imaginer que les propriétés locales des SI en deux points très éloignés deviennent indépendantes les unes des autres, et qu'une échelle de longueur doit probablement apparaître pour quantifier la portée de ces corrélations.

Nous proposons ainsi l'analyse suivante, valable en dimension $d = 1$, mais que l'on peut conceptuellement généraliser à une dimension d quelconque. Partant d'une SI caractérisée par les configurations $(q_k)_{1 \leq k \leq N}$, on choisit deux sites i et $j = i + r$ et on cherche les configurations locales $q_{i+1}^*, \dots, q_{j-1}^*$ qui minimisent l'énergie sur le segment $i + 1, \dots, j - 1$ en ayant fixé comme conditions aux limites les configurations locales q_i et q_j sur les sites i et j . On teste ensuite si les configurations q_{i+1}, \dots, q_{j-1} sont identiques à $q_{i+1}^*, \dots, q_{j-1}^*$, auquel cas on dira que la SI minimise l'énergie localement entre i et j . En fixant i , on peut augmenter progressivement r jusqu'à trouver une valeur maximale au-delà de laquelle la condition de minimum de l'énergie n'est plus vérifiée. Un balayage sur les valeurs

de i permet enfin de décomposer les SI en un ensemble de “régions”⁶, délimitées à chaque fois par les sites i et j les plus espacés sur lesquels il a été possible de minimiser l’énergie. Il s’avère que ces régions ne se recouvrent que faiblement, puisque leur recouvrement moyen varie entre 0.1 et 0.2 environ. En regardant plus en détail, on constate que la plupart des régions voisines ne se recouvrent pas sur plus d’un site, mais que certaines se recouvrent presque entièrement. Dans ce dernier cas, on peut dire qu’il existe une quasi-dégénérescence et que la région n’est pas parfaitement définie, autrement dit qu’il subsiste un léger flou sur les frontières.

La Fig. 3.4 (gauche) présente les résultats obtenus numériquement concernant la distribution $P_{\text{SI}}(\ell, t)$ de la taille ℓ de ces régions pour différents instants t , obtenue en recherchant la structure inhérente associée à la configuration dynamique à l’instant t , puis en appliquant la procédure de décomposition spatiale décrite ci-dessus. De manière plus précise, la taille ℓ correspond au nombre de sites sur lesquels l’énergie est minimisée, en excluant ceux dont la valeur est fixée. Autrement dit, en reprenant les notations introduites plus haut, $j = i + \ell + 1$. Les distributions sont ensuite moyennées sur 10^3 réalisations du désordre. On voit clairement que ces distributions sont exponentielles pour $\ell \gtrsim 4$. Cependant, compte tenu du fait que la distribution est non exponentielle à petit ℓ , nous définissons l’échelle de longueur caractéristique de la distribution comme sa valeur moyenne plutôt que comme le paramètre obtenu grâce à un ajustement exponentiel. Ces deux procédés deviennent bien entendu équivalents dès lors que la moyenne de la distribution devient grande par rapport à la maille du réseau. On en déduit ainsi une échelle de longueur $\ell_{\text{SI}}(t, T)$, fonction du temps t et de la température T , qui caractérise la structure spatiale des SI.⁷ La dépendance temporelle de cette longueur est présentée sur la Fig. 3.4 (droite), et on constate que cette longueur augmente avec le temps avant de saturer. Plus précisément, on voit que dans une première étape, $\ell_{\text{SI}}(t, T)$ reste constante, égale à une longueur ℓ_0 , ce qui peut s’interpréter en supposant que le système explore dans un premier régime la SI où il se trouve initialement. Puis d’autres SI sont explorées, caractérisées par des échelles de longueur de plus en plus grandes, et des énergies de plus en plus basses, avant d’atteindre le régime d’équilibre et une longueur $\ell_{\text{eq}}(T)$. On constate également que $P(\ell, t)$ possède des propriétés d’échelle intéressantes, à savoir :

$$\ell_{\text{SI}}(t, T) = [\ell_{\text{eq}}(T) - \ell_0] f(T \ln t) \quad (3.11)$$

comme on le voit sur l’encart de la Fig. 3.4 (droite), avec cependant de légers

⁶Nous éviterons le terme “domaine”, car la notion introduite ici diffère significativement de la notion habituelle de domaines, et ce terme risquerait de prêter à confusion.

⁷En dimension $d > 1$, un tel algorithme est cependant très difficile à mettre en œuvre, car il faudrait explorer toutes les formes possibles des frontières sur lesquelles les conditions aux limites sont imposées. On peut alors plus simplement choisir une frontière simple, par exemple une sphère de rayon ℓ , et étudier en fonction de ℓ le recouvrement entre la structure inhérente considérée et l’état minimisant l’énergie à l’intérieur de la sphère. On s’attend à ce que ce recouvrement décroisse sur une échelle caractéristique ℓ_{SI} .

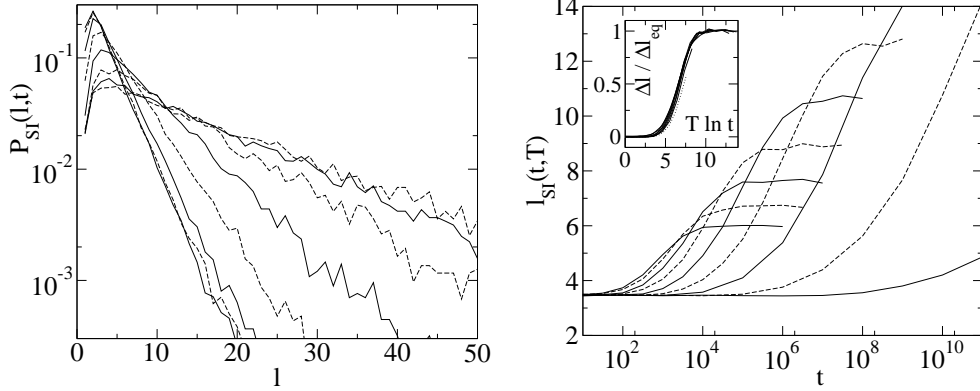


FIG. 3.4 – A gauche : distribution $P_{SI}(\ell, t)$ des tailles ℓ des “régions”, pour différents temps allant de $t = 10^3$ à $t = 10^{10}$, par incrément d’une décade, et pour une température $T = 0.4$. A droite : taille moyenne de ces régions $l_{SI}(\ell, t)$ en fonction du temps t , pour différentes températures allant de $T = 1$ à $T = 0.2$ par pas de 0.1, de gauche à droite. Encart : mêmes données remises à l’échelle (cf. texte), représentées en fonction de $T \ln t$. La superposition est bonne, mais des écarts à la loi d’échelle apparaissent pour $T < 0.4$.

écarts à cette loi pour $T < 0.4$. Ceci confirme que la dynamique est contrôlée par les phénomènes activés, comme on pouvait s’y attendre, compte tenu des règles dynamiques choisies. Par ailleurs, la longueur d’équilibre $\ell_{eq}(T)$ est tracée en fonction de la température sur la Fig. 3.5 (gauche), et on constate que $\ell_{eq}(T)$ est bien ajustée par une fonction affine de $1/T$ (encart), au moins pour $0.5 \leq T \leq 1$. Par un ajustement, on trouve :

$$\ell_{eq}(T) = \frac{a}{T} - b \quad (3.12)$$

avec $a = 6.77$ et $b = 0.79$.

Lien entre longueur et énergie

Après avoir identifié les structures inhérentes et analysé leurs propriétés spatiales, il est intéressant de faire le lien entre échelle de longueur et énergie. Pour ce faire, nous avons repris l’analyse détaillée plus haut, qui permet de décomposer les structures inhérentes en une collection de régions quasiment disjointes, sur lesquelles l’énergie est minimum. On peut dès lors calculer l’énergie moyenne $E(\ell)$ de ces régions, à taille ℓ fixée, ainsi que la variance $\sigma^2(\ell)$ de cette énergie. La Fig. 3.5 (droite) présente la densité d’énergie $\varepsilon(\ell)$:

$$\varepsilon(\ell) = \frac{E(\ell)}{\ell + 1} \quad (3.13)$$

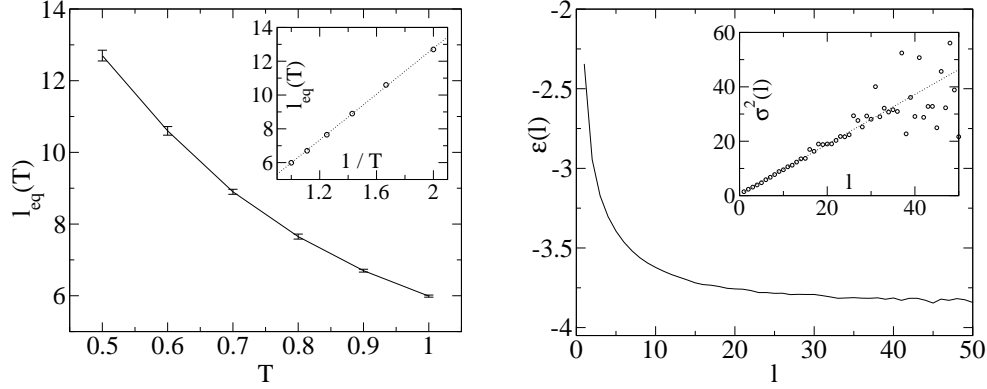


FIG. 3.5 – *A gauche* : longueur $l_{eq}(T)$ caractérisant les structures inhérentes en fonction de la température T . On constate que cette longueur est une fonction affine de $1/T$ (encart). *A droite* : densité d'énergie $\varepsilon(l)$ des régions composant les structures inhérentes, en fonction de leur taille l . Encart : variance $\sigma^2(l)$ de l'énergie des régions de taille l ; cette variance croît linéairement avec l .

en fonction de l , ainsi que la variance $\sigma^2(l)$ (encart). La densité d'énergie est calculée en divisant $E(l)$ par $l + 1$ plutôt que l car $E(l)$ correspond à l'énergie de $l + 1$ liens. On constate que la densité d'énergie $\varepsilon(l)$ converge vers une limite ε_∞ à grands l , qui peut être déterminée par une extrapolation à $l \rightarrow \infty$ des données. Cette valeur de ε_∞ devrait correspondre à la limite de température nulle de l'énergie libre, et on constate en comparant avec la Fig. 3.1 que l'accord est assez bon (rappelons que toutes les études numériques présentées ici ont été effectuées pour $M = 10$). En retranchant cette limite, on peut essayer de tester la forme fonctionnelle de la décroissance de l'énergie. Celle-ci semble compatible avec une dépendance exponentielle, mais compte-tenu de la barre d'erreur sur la valeur de ε_∞ , on ne peut exclure totalement un comportement en loi de puissance. Une étude plus précise de ce point serait donc nécessaire pour caractériser sans ambiguïté la forme fonctionnelle de cette dépendance. Par ailleurs, la variance $\sigma^2(l)$ apparaît linéaire en l , même si les données sont très bruitées pour $l > 30$.

Pertinence du choix de la dynamique

Nous avons choisi pour étudier la dynamique de ce modèle d'utiliser des taux de transition purement activés, assez semblables à ceux du modèle de pièges. On peut dès lors se demander dans quelle mesure les résultats que nous avons obtenus dépendent du choix des taux de transition. Une partie de la réponse est immédiate, puisque l'état d'équilibre du système ne dépend pas du choix des taux de transition tant que ceux-ci respectent le bilan détaillé. Les résultats d'équilibre, tels que les longueurs $\xi_{eq}(T)$ et $l_{eq}(T)$, ne dépendent donc pas de ce choix. Comme l'état initial n'en dépend pas non plus, l'effet d'un changement

de taux de transition ne peut être que de modifier la dépendance temporelle des grandeurs considérées, entre des valeurs initiales et finales imposées.

Afin de tester ce point, nous avons effectué des simulations avec deux autres types de taux de transitions qui respectent le bilan détaillé, à savoir les taux de transition de Glauber :

$$w_i^{gl}(\{q\} \rightarrow \{q'\}) = \frac{\Gamma'_0}{1 + e^{[U_i(\{q'\}) - U_i(\{q\})]/T}} \quad (3.14)$$

et les taux de transition de type “descente de gradient à température finie”, définis par :

$$w_i^{gr}(\{q\} \rightarrow \{q'\}) = \Gamma''_0 e^{-[U_i(\{q'\}) - U_i(\{q\})]/2T} \quad (3.15)$$

les notations ayant été précisées en Eq. (3.4). Les échelles de fréquence Γ'_0 et Γ''_0 ne sont pas nécessairement égales à Γ_0 et pourraient dépendre de M .

La Fig. 3.6 (gauche) présente la taille caractéristique $\ell_{SI}(t, T)$ obtenue avec les trois types de dynamiques étudiées, en ayant pris $\Gamma_0 = \Gamma'_0 = \Gamma''_0 = 1$, et pour une température $T = 0.5$. L'encart montre les données brutes, alors que la figure principale représente les courbes remises à l'échelle sur l'axe temporel, en les traçant en fonction de $t/\tau_{1/2}$, où $\tau_{1/2}$ est le temps caractéristique à mi-hauteur. Bien que la forme des trois courbes ne soit pas exactement la même, on voit qu'elle dépend tout de même assez peu de la dynamique choisie. Le principal effet d'un changement de dynamique est ainsi de modifier, de manière éventuellement très forte, l'échelle de temps typique de l'évolution du système, comme on le constate sur l'encart. En particulier, pour des transitions telles que $U_i(\{q'\}) \simeq U_i(\{q\})$, le taux de transition sera d'ordre 1 pour des dynamiques de Glauber ou de “gradient”, alors qu'il vaudra $e^{-U_i(\{q\})/T}$ pour la dynamique activée, cette dernière valeur pouvant devenir très petite devant 1 à basse température et lorsque des états profonds sont visités.

Remarquons que la procédure employée plus haut pour déterminer les structures inhérentes correspond à la limite de température nulle des taux de transition w_i^{gr} . Par conséquent, ce n'est que pour ce choix particulier de dynamique que les structures inhérentes sont obtenues par une trempe à température nulle, ce qui correspond bien à la conception intuitive des structures inhérentes. Toutefois, comme on vient de le voir, l'essentiel des résultats ne dépend que faiblement du choix de la dynamique, qui n'est principalement affectée que par la modification de l'échelle de temps élémentaire de la dynamique.

3.2.5 Extension au cas sans désordre spatial

Nous avons présenté plus haut ce modèle comme une sorte de description effective des systèmes désordonnés (c'est-à-dire présentant du désordre gelé). Il semble naturel de tenter de l'étendre au cas des systèmes sans désordre gelé dans lesquels le désordre est “auto-induit” par la dynamique. En effet, une des motivations physiques de ce modèle était d'interpréter les états q_i comme des configurations atomiques ou moléculaires locales dans un verre structural par exemple. Dans ce

cas, les énergies d'interaction ne dépendent pas de la position, mais seulement des configurations q_i et q_j d'une manière qui peut d'ailleurs être très complexe, en raison notamment de la frustration. On peut donc proposer une version du modèle sans désordre spatial, avec des énergies d'interaction $V(q, q')$ indépendantes du site, mais en supposant que ces interactions restent des variables aléatoires pour prendre en compte (de manière simplifiée) la complexité de l'espace des configurations locales. L'important est de restaurer les symétries de l'espace physique, à savoir l'invariance par translation d'espace ($x \mapsto x + a$), et l'invariance par renversement d'espace ($x \mapsto -x$). Pour tenir compte de cette dernière symétrie, nous supposons en outre que la matrice $V(q, q')$ est symétrique, autrement dit que $V(q, q') = V(q', q)$.

Nous avons appliqué les mêmes procédures que précédemment pour déterminer les structures inhérentes et la distribution $P_{\text{SI}}(\ell, t)$ des tailles de domaines, ainsi que la longueur $\ell_{\text{SI}}(t, T)$ associée, sans toutefois étudier de manière systématique la dépendance en température de ces grandeurs. La Fig. 3.6 (droite) présente les résultats obtenus pour $\ell_{\text{SI}}(t, T)$ en les comparant avec ceux du modèle désordonné, pour une température $T = 0.6$. Là encore, on constate que cette échelle croît au cours du temps, et que le comportement est qualitativement le même dans les deux cas. Il faut cependant faire deux remarques importantes à ce stade. D'une part, la distribution $P_{\text{SI}}(\ell, t)$ (cf. encart) présente des oscillations assez importantes de pseudo-période $\Delta\ell = 2$, de sorte que les valeurs paires de ℓ sont moins probables que les valeurs impaires. D'autre part, dans le cas sans désordre spatial, l'algorithme de détermination des structures inhérentes ne permet plus d'associer de manière univoque une structure inhérente à une configuration de départ, car de nombreuses transitions conduisent aux mêmes variations d'énergie. Le code de calcul que nous avons utilisé dans cette étude préliminaire procède donc à des choix non contrôlés, et ce point nécessiterait des approfondissements. Il faut remarquer que ces problèmes ne s'étaient pas posés auparavant, car l'introduction de désordre spatial permet justement de lever cette dégénérescence.

3.2.6 Bilan : un scénario à deux échelles de longueur

Nous avons vu dans cette étude que deux types d'échelles de longueur apparaissent naturellement dans ce modèle. D'une part, une première longueur $\xi(t, T)$ caractérise l'état dynamique du système, et la façon dont les configurations locales q_i se corrélient entre les différents sites. Cette longueur est mise en évidence à l'aide d'une fonction de corrélation $C_{a,b}(r, t)$ à quatre points, deux sites et deux répliques (des copies d'un système avec le même désordre, mais des histoires thermiques différentes). Ce type de fonction de corrélation et l'échelle de longueur associée sont maintenant bien documentés dans la littérature. Notons que la plupart de ces études ont été menées sur des modèles de verres de spins comme le modèle d'Edwards-Anderson.

D'autre part, nous avons introduit un deuxième type d'échelle de longueur, qui ne caractérise plus directement l'état dynamique du système, mais plutôt les

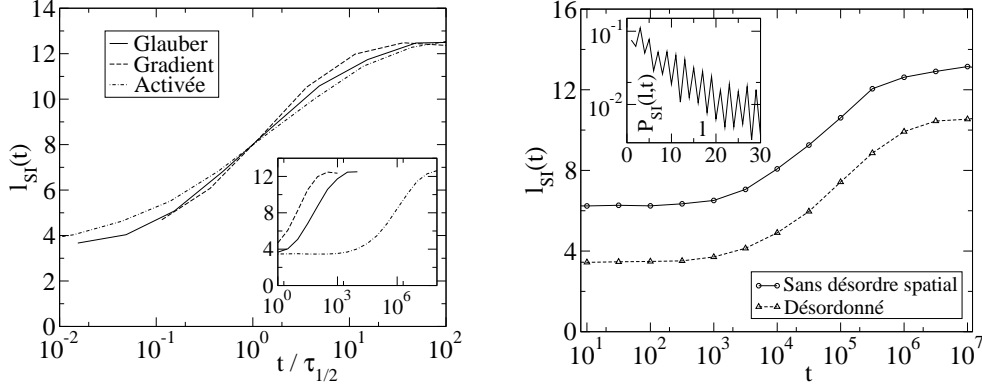


FIG. 3.6 – *A gauche* : longueur caractéristique $\ell_{\text{SI}}(t, T)$ pour trois types de dynamiques (Glauber, gradient à température finie, et activée standard), en fonction du temps adimensionné par le temps typique de l'évolution $\tau_{1/2}$, pour $T = 0.5$ (données brutes en encart). La forme des courbes dépend assez peu de la dynamique. *A droite* : $\ell_{\text{SI}}(t, T)$ dans une version du modèle sans désordre spatial, et comparaison avec la version désordonnée standard ($T = 0.6$). Encart : distribution $P_{\text{SI}}(\ell, t)$ dans le cas sans désordre spatial, montrant de fortes oscillations ($t = 10^7$).

structures inhérentes visitées au cours de l'évolution du système. Ces structures inhérentes sont définies, en partant d'une configuration quelconque, par un algorithme de "descente de gradient" à température nulle, dans l'espace des phases. Une fois qu'une structure inhérente a été trouvée, nous avons montré qu'il est possible de la décomposer en différentes "régions" quasiment disjointes sur lesquelles l'énergie est minimisée localement, sous la contrainte que les valeurs des q_i aux frontières de la région soient fixées. Nous avons montré que la distribution des tailles ℓ de ces régions était exponentielle pour $\ell > 4$ environ (les petites valeurs de ℓ telles que $\ell = 1$ ou 2 sont en fait peu probables). La taille moyenne de ces régions permet donc de définir une deuxième échelle de longueur $\ell_{\text{SI}}(t, T)$, dont la valeur est significativement supérieure à celle de $\xi(t, T)$. Ceci s'explique par le fait que ξ prend en compte les fluctuations thermiques à petite échelle, qui ont tendance à décorrélérer le système sur de courtes distances.

Nous sommes ainsi passés d'une description en termes d'espace des phases, avec la notion de structures inhérentes, à une description en termes d'espace réel, avec une décomposition spatiale de ces structures inhérentes et l'apparition d'une échelle de longueur caractéristique. Il est particulièrement intéressant de constater que minimiser l'énergie localement dans l'espace des phases correspond à minimiser l'énergie sur une certaine distance dans l'espace réel. Bien que cela puisse sembler naturel d'un point de vue intuitif, l'équivalence entre les deux n'est cependant pas évidente *a priori*. De plus, il serait tentant de dire que ces différentes régions que nous avons mises en évidence évoluent de manière presque

indépendante, et que l'on pourrait donc découper le système en sous-systèmes de taille ℓ_{SI} (en supprimant les interactions entre les sous-systèmes) sans affecter la dynamique globale. Mais ce point reste pour l'instant une conjecture, dont nous n'avons pas encore testé la validité.

Le point central de cette discussion est de savoir si les deux longueurs $\ell_{SI}(t, T)$ et $\xi(t, T)$ définies à partir de grandeurs différentes, constituent bien deux échelles de longueur réellement indépendantes, ou si elles sont proportionnelles. Pour cela, nous avons tracé sur la Fig. 3.7 le rapport de ces deux longueurs, $\ell_{SI}(t, T)/\xi(t, T)$ en fonction du temps pour différentes températures ($T = 0.4, 0.5$ et 0.7). On voit clairement que ce rapport n'est pas constant, puisqu'il commence par décroître avant d'augmenter de nouveau à temps plus long (il doit cependant tendre vers une constante pour $t \rightarrow \infty$ lorsque les valeurs d'équilibre sont atteintes). Ce comportement peut s'interpréter de la manière suivante. A temps court, le système commence par s'équilibrer dans les structures inhérentes où il se trouvait à l'instant initial, ce qui se traduit par une augmentation de $\xi(t, T)$ alors que $\ell_{SI}(t, T)$ reste constante. Ensuite, les structures inhérentes visitées vont être de plus en plus profondes, d'où la croissance de $\ell_{SI}(t, T)$, mais le système a le temps de s'équilibrer dans ces structures inhérentes, et $\xi(t, T)$ est donc proche de sa valeur d'équilibre dans ce régime.

Par conséquent, il se dégage de cette étude un scénario à deux échelles de longueur pour la dynamique des systèmes désordonnés. On comprend dès lors toute la richesse que l'on peut attendre du comportement de ces systèmes. A titre de comparaison, dans un système ferromagnétique sans désordre (disons un modèle d'Ising pour fixer les idées), les seules structures inhérentes sont les deux états complètement ordonnés, de sorte que $\ell_{SI}(t, T) = \infty$ pour tout instant t et toute température T . On retrouve bien ainsi le scénario habituel de la croissance de domaines, caractérisé par une unique échelle de longueur. Comme on le sait depuis longtemps, la complexité des systèmes vitreux vient de la présence de très nombreux états métastables (les structures inhérentes) dans l'espace des phases, et les résultats obtenus ici dans le cas particulier de ce modèle unidimensionnel suggèrent qu'une deuxième échelle de longueur pourrait apparaître dans les systèmes vitreux pour caractériser ces états métastables.

Bien que nous ne sachions pas très clairement si ce scénario pourrait s'appliquer également aux verres de spin, ou s'il correspond seulement aux systèmes ayant un comportement de type "verres structuraux", on peut espérer qu'un tel scénario (ou une généralisation de celui-ci) pourrait aider à mieux comprendre les phénomènes de rajeunissement et de mémoire observés dans les verres de spin. En effet, ceux-ci peuvent s'expliquer dans une vision de type espace des phases par une structure hiérarchique des états métastables [41], impliquant des barrières d'énergie de toutes tailles, et par la dynamique de vieillissement qui s'y déroule. Même si la contrepartie de cette structure hiérarchique n'apparaît pas pour l'instant de manière évidente dans le scénario que nous proposons, il est clair qu'une description en termes d'espace réel de la dynamique des verres de spins doit inclure une (ou plusieurs) échelle(s) de longueur associée(s) aux états

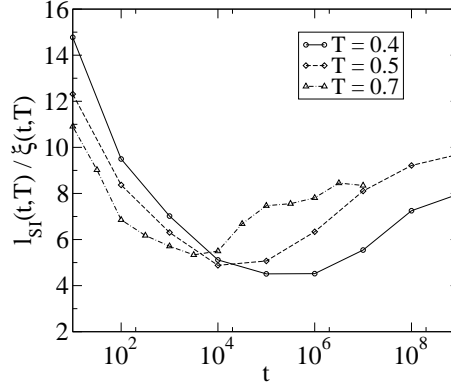


FIG. 3.7 – Rapport des deux longueurs caractéristiques $l_{SI}(t, T)/\xi(t, T)$ en fonction du temps pour différentes températures ($T = 0.4, 0.5$ et 0.7). On voit que ce rapport varie nettement au cours du temps, ce qui indique que les deux longueurs sont bien indépendantes. En particulier, $\xi(t, T)$ augmente à temps court alors que $l_{SI}(t, T)$ est quasiment constante (le rapport diminue), ce qui indique que le système commence par explorer les structures inhérentes les moins profondes. La dynamique change ensuite, puisque $l_{SI}(t, T)$ augmente et que $\xi(t, T)$ commence à saturer (le rapport croît de nouveau après un minimum), suggérant que le système explore des structures inhérentes de plus en plus profondes, en étant quasiment équilibré à l'intérieur de ces structures inhérentes.

métastables. Le fait d'associer des échelles de longueur aux états métastables n'est d'ailleurs pas une idée nouvelle en soi, puisque cela a déjà été proposé pour traduire dans l'espace réel le modèle de pièges hiérarchique [43, 40]. L'originalité (à notre connaissance) du présent travail réside dans le fait d'introduire une définition précise de cette échelle de longueur, et d'en offrir une interprétation claire.

En outre, cette idée de minimisation d'énergie sur une échelle de longueur caractéristique est également réminiscente du scénario de "croissance de domaines limitée par la frustration" proposé en Réf. [105] pour les verres structuraux (donc pour des systèmes sans désordre). Dans ce scénario, on suppose que le système souhaite s'ordonner localement suivant une "configuration préférée", à savoir celle qui minimise l'énergie localement, et que l'expansion de cet ordre local est bloquée par la frustration géométrique, qui impose un coût énergétique superextensif. La compétition des deux effets conduit alors à une taille caractéristique pour ces domaines. Toutefois, même si nous avons vu que l'on peut dans une certaine mesure généraliser les méthodes développées dans ce chapitre aux systèmes sans désordre spatial, le lien entre les deux approches n'est pour l'instant pas clairement établi. Il faudrait notamment pour cela que ces domaines frustrés correspondent aux structures inhérentes du système.

Bien entendu, il serait maintenant nécessaire de valider ce scénario en di-

mension $d > 1$, ainsi que dans d'autres modèles (désordonnés ou non) afin d'en tester la généralité et les limites. Enfin, un point important que nous n'avons pas pu explorer faute de temps est de comparer nos résultats avec une approche en termes d'inhomogénéités dynamiques, dont il a été montré récemment qu'elles permettraient aussi d'accéder à une échelle de longueur dans les systèmes vitreux [19].

3.3 Un modèle sans désordre avec contraintes cinétiques

Comme nous venons de le voir dans les chapitres précédents, une vision classique de la dynamique vitreuse consiste à dire que le système atteint progressivement des états d'énergie de plus en plus profonds, ce qui engendre un fort ralentissement de la dynamique. Ceci suppose que l'on puisse définir une énergie dans le système, ce qui n'est pas nécessairement le cas pour un système réel (par exemple pour un matériau granulaire soumis à un cisaillement oscillant sur une table horizontale). Une autre vision possible de la dynamique vitreuse consiste à introduire des modèles dépourvus d'énergie, ou avec un hamiltonien extrêmement simple, et à prendre en compte les interactions au travers de contraintes cinétiques, c'est-à-dire en interdisant certaines transitions entre configurations. Ceci peut s'interpréter soit comme une modélisation naturelle de certains systèmes sans hamiltonien (dans les matériaux granulaires denses, la gêne stérique empêche de passer d'une configuration locale à une autre sans réarrangement collectif), soit comme une binarisation des barrières d'énergie dans les systèmes ayant un hamiltonien, en une valeur finie et une valeur infinie qui conduit à des transitions interdites. Plusieurs modèles simples avec contraintes cinétiques ont été étudiés en détail dans la littérature ; il s'agit le plus souvent de modèles de "spins", c'est-à-dire des modèles où la variable locale n_i est binaire, $n_i = 0$ ou 1 , et s'interprètent respectivement comme l'absence ou la présence d'une particule sur le site. On peut citer en particulier le modèle de Kob-Andersen [106], ou le modèle de Fredrickson-Andersen [85, 84].

Dans cette section, nous étudions un modèle proposé par F. Lequeux [118], et dont les motivations physiques sont similaires à celles des modèles que nous venons de citer, mais qui utilise des variables continues pour décrire la densité locale, plutôt que des variables binaires traduisant la présence ou l'absence d'une particule. Nous verrons d'ailleurs que la présence d'une loi de conservation (la masse totale est conservée) joue un rôle important. Il s'agit donc d'une description à une échelle plus grande que la taille des particules. Nous verrons que ce modèle possède des propriétés très intéressantes, puisqu'on peut notamment obtenir analytiquement la distribution stationnaire à N corps des densités, et en déduire plusieurs grandeurs intéressantes, comme la distribution locale de la densité. On pourra constater que la dynamique de ce modèle est très riche, et que même en l'absence d'énergie, on peut mettre en évidence une échelle de longueur

qui croît lorsque l'on augmente la densité, traduisant ainsi la présence d'hétérogénéités dynamiques.

3.3.1 Définition du modèle

Le modèle est défini sur un réseau, que l'on peut supposer de dimension d quelconque. Sur chaque site du réseau, on introduit une variable ρ_i , à valeurs réelles positives, qui peut s'interpréter comme une densité locale. Autrement dit, si l'on imagine que le réseau représente un découpage de l'espace continu en cellules, dont le centre correspond à un site, alors ρ_i est la masse contenue dans la cellule élémentaire centrée sur le site i . Nous devons maintenant introduire des règles d'évolution dynamiques. Nous choisissons ici encore une dynamique locale, en veillant à ce qu'elle respecte la conservation de la masse totale. L'évolution correspond donc à une redistribution des masses entre deux sites connectés. Plus précisément, en considérant un réseau de taille finie possédant N sites, dans un espace de dimension d , on tire aléatoirement des liens du réseau en attendant un temps Δt entre deux tirages. Une fois qu'un lien (i, j) a été choisi, on redistribue les masses ρ_i et ρ_j en ρ'_i et ρ'_j , de la manière suivante :

$$\rho'_i = q(\rho_i + \rho_j) \quad (3.16)$$

$$\rho'_j = (1 - q)(\rho_i + \rho_j) \quad (3.17)$$

Le facteur de redistribution q est une variable aléatoire comprise entre 0 et 1, et distribuée suivant $\psi(q)$. Pour respecter la symétrie du problème, on suppose que la distribution $\psi(q)$ est symétrique autour de $q = \frac{1}{2}$, c'est-à-dire que $\psi(1 - q) = \psi(q)$. L'intervalle de temps Δt introduit ci-dessus est lui aussi une variable aléatoire, tirée à partir d'une distribution exponentielle de moyenne τ_0/N :

$$p(\Delta t) = \frac{N}{\tau_0} e^{-N\Delta t/\tau_0} \quad (3.18)$$

où τ_0 est l'échelle de temps microscopique du système. Autrement dit, même à la limite thermodynamique, chaque lien garde une probabilité d'ordre 1 d'être choisi pendant une durée τ_0 . Ceci définit la version la plus élémentaire du modèle, qui traduit une redistribution de la masse d'une cellule à une autre, suivant une distribution $\psi(q)$ dont on peut supposer qu'elle devrait dépendre de la température du système physique réel ainsi modélisé. Le présent modèle ne possède cependant pas de température, ni d'énergie. Compte-tenu de la dynamique choisie, on peut s'attendre à ce qu'un tel modèle se comporte de manière essentiellement diffusive. Pour lui conférer des propriétés vitreuses qui rendraient son comportement plus riche, une manière de procéder est d'introduire des contraintes cinétiques qui traduisent la gêne stérique, c'est-à-dire le fait qu'une configuration localement trop dense est bloquée.

Pour mettre en œuvre quantitativement cette idée, nous allons supposer que pour qu'une redistribution le long d'un lien (i, j) soit possible, il est nécessaire

que la masse totale $\rho_i + \rho_j$ soit inférieure à $2\rho_s$, où ρ_s est une densité seuil. Ainsi, lorsque qu'un lien est tiré au hasard, ρ_i et ρ_j ne seront modifiés que si le critère précédent est vérifié. On conçoit dès lors que si la densité globale est élevée, il sera de plus en plus difficile pour un lien donné de vérifier ce critère, d'où l'on peut attendre des propriétés de dynamique lente. Dans la suite, nous choisirons ρ_s comme unité de densité, compte-tenu du fait que cette quantité joue un rôle central dans ce problème. En outre, si l'on part d'une condition initiale telle que tous les ρ_i sont inférieurs à 2, les règles d'évolution ne pourront pas engendrer de valeurs de ρ_i supérieures à 2, de telle sorte que la distribution $P(\rho)$ ne sera non nulle que sur l'intervalle $[0, 2]$.

3.3.2 Approche de type champ moyen

Nous allons maintenant étudier la distribution d'équilibre des densités $P(\rho)$, par une approche de type champ moyen, dont on verra par la suite qu'elle conduit au résultat exact. Ce terme de champ moyen peut avoir de nombreuses acceptations différentes, comme le fait de considérer un système totalement connecté, ou encore de supposer que la distribution à N corps est complètement factorisée, cette liste n'étant pas exhaustive. Nous choisirons ici la deuxième solution, c'est-à-dire la méthode d'approximation la plus simple, mais non contrôlée. Nous ne chercherons pas ici à justifier cette approximation dans le cas d'un modèle de dimension infinie par exemple.

Ce paragraphe se contente de résumer les principales étapes du calcul, pour permettre une première lecture plus aisée ; les détails sont reportés en Annexe C. On commence par considérer un lien isolé, avec des sites dénotés par 1 et 2. Le taux de transition s'écrit, en choisissant les unités de temps de manière à avoir un préfacteur égal à 1 devant l'intégrale (ce préfacteur ne dépend pas de N d'après la définition de la dynamique) :

$$W(\rho_1, \rho_2 \rightarrow \rho'_1, \rho'_2) = \int_0^1 dq \psi(q) \delta[\rho'_1 - qS] \delta[\rho'_2 - (1-q)S] \theta(2-S) \quad (3.19)$$

où la variable $S \equiv \rho_1 + \rho_2$ a été introduite pour simplifier les notations. L'évolution de la distribution de probabilité jointe $Q(\rho_1, \rho_2, t)$ est décrite par l'équation maîtresse suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial t}(\rho_1, \rho_2, t) &= -Q(\rho_1, \rho_2, t) \int_0^\infty d\rho'_1 \int_0^\infty d\rho'_2 W(\rho_1, \rho_2 \rightarrow \rho'_1, \rho'_2) \\ &+ \int_0^\infty d\rho'_1 \int_0^\infty d\rho'_2 W(\rho'_1, \rho'_2 \rightarrow \rho_1, \rho_2) Q(\rho'_1, \rho'_2, t) \end{aligned} \quad (3.20)$$

L'hypothèse de champ moyen consiste alors à supposer que la distribution jointe est factorisée :

$$Q(\rho_1, \rho_2, t) = P(\rho_1, t) P(\rho_2, t) \quad (3.21)$$

Pour aller plus avant, il est nécessaire de spécifier une forme fonctionnelle pour la distribution $\psi(q)$. Pour garder une certaine généralité, tout en profitant d'une

forme analytique commode, nous choisissons pour $\psi(q)$ une distribution bêta symétrique, de paramètre μ :

$$\psi(q) = \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} [q(1-q)]^{\mu-1} \quad (3.22)$$

Nous allons maintenant rechercher les solutions stationnaires pour la distribution $P(\rho)$, dans le cadre de cette approximation de champ moyen, sous la forme :

$$P(\rho) = C \rho^\alpha e^{\beta\rho} \quad (3.23)$$

avec deux paramètres libres α et β , la constante C étant fixée par normalisation. Le fait d'inclure deux paramètres libres permet d'espérer trouver l'ensemble des solutions du problème (même s'il n'y a au départ aucune garantie pour cela), car celui-ci possède deux paramètres de contrôle, la densité globale $\bar{\rho}$ et l'exposant μ qui décrit de quelle manière s'opère la redistribution. Si des solutions existent sous la forme proposée, on peut s'attendre à ce α et β s'expriment en fonction de $\bar{\rho}$ et μ . Après quelques lignes de calcul,

$$\bar{\rho} = \frac{\int_0^2 d\rho \rho^\mu e^{\beta\rho}}{\int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{\beta\rho}} \quad (3.24)$$

On peut remarquer la similitude avec le formalisme habituel de la physique statistique, puisque l'on peut écrire :

$$\bar{\rho} = \frac{\partial}{\partial\beta} \ln \int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{\beta\rho} \quad (3.25)$$

Cette dernière intégrale joue donc le rôle d'une fonction de partition (à un corps). Il n'est malheureusement pas possible d'exprimer explicitement β en fonction de $\bar{\rho}$ et de μ , mis à part au voisinage de certains points particuliers. À titre d'illustration, la distribution $P(\rho)$ s'écrit dans le cas $\mu = 1$, qui correspond à une distribution $\psi(q)$ uniforme :

$$P(\rho) = \frac{\beta}{e^{2\beta} - 1} e^{\beta\rho} \quad (3.26)$$

et la relation liant $\bar{\rho}$ à β est assez simple :

$$\bar{\rho} = \frac{2 e^{2\beta}}{e^{2\beta} - 1} - \frac{1}{\beta} \quad (3.27)$$

qui reste cependant une équation implicite.

3.3.3 Calculs exacts en dimension quelconque

Nous allons maintenant présenter un calcul exact de la distribution $P(\rho)$ pour un espace de dimension d quelconque. Le déroulement en est le suivant : dans une

première étape, nous écrivons une équation maîtresse décrivant exactement, sans approximation de champ moyen, l'évolution de la distribution de probabilité à N corps. Nous en chercherons ensuite les solutions stationnaires, avant de revenir à la distribution de probabilité à un site, et de comparer les résultats obtenus avec ceux trouvés au paragraphe précédent dans le cadre d'une approximation de champ moyen. Comme précédemment, les détails sont reportés en Annexe C, et seul le fil conducteur du calcul est présenté ici, ainsi que les points importants pour les discussions ultérieures.

Taux de transition d'un système à N sites

Il faut tout d'abord écrire les taux de transition globaux pour le problème à N corps. Ceux-ci s'expriment de la manière suivante :

$$W(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) = \sum_{\langle i,j \rangle} \prod_{k \neq i,j} \delta(\rho_k - \rho'_k) \delta(\rho'_i + \rho'_j - \rho_i - \rho_j) \times \int_0^1 dq \psi(q) \delta[\rho'_i - q(\rho_i + \rho_j)] \theta(2 - \rho_i - \rho_j) \quad (3.28)$$

où la notation $\sum_{\langle i,j \rangle}$ signifie une somme sur les liens du réseau. Les différents facteurs s'interprètent comme suit : $\prod_{k \neq i,j} \delta(\rho_k - \rho'_k)$ traduit le fait qu'une fois un lien (i, j) choisi, les autres sites ne sont pas affectés par la transition ; $\delta(\rho'_i + \rho'_j - \rho_i - \rho_j)$ assure la conservation de la masse sur le lien ; $\theta(2 - \rho_i - \rho_j)$ correspond à la contrainte cinétique qui interdit la transition si la somme des deux masses est supérieure à 2 ; enfin, l'intégrale sur q rend compte de la redistribution aléatoire des masses sur le lien. Ces taux de transition se réécrivent sous la forme suivante, plus facilement utilisable :

$$W(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\prod_{k \neq i,j} \delta(\rho_k - \rho'_k) \right] \times \delta(\rho'_i + \rho'_j - \rho_i - \rho_j) \frac{\theta(2 - \rho_i - \rho_j)}{\rho_i + \rho_j} \psi \left(\frac{\rho'_i}{\rho_i + \rho_j} \right) \quad (3.29)$$

Une fois ces taux de transition écrits, on peut obtenir l'équation maîtresse, comme cela est détaillé en Annexe C.

Solutions stationnaires et maximum d'entropie

Maintenant que l'équation maîtresse est écrite en détail, il faut bien entendu en trouver les solutions. Une méthode intéressante dans ce contexte consiste à introduire une entropie, et à voir si cette entropie augmente au cours de l'évolution gouvernée par l'équation maîtresse. Nous allons tout d'abord étudier de manière un peu plus générale comment déterminer l'entropie qui est maximisée au cours de l'évolution (sous certaines hypothèses) en partant d'une équation maîtresse générique.

Partons donc d'un système décrit par les taux de transition $W(\alpha \rightarrow \beta)$ de la configuration α vers la configuration β . L'évolution de la probabilité $P_\alpha(t)$ de se trouver dans l'état α à l'instant t est gouvernée par l'équation :

$$\frac{dP_\alpha}{dt} = \sum_{\beta} [W(\beta \rightarrow \alpha)P_\beta - W(\alpha \rightarrow \beta)P_\alpha] \quad (3.30)$$

En introduisant l'entropie usuelle :

$$S(t) = - \sum_{\alpha} P_\alpha(t) \ln P_\alpha(t) \quad (3.31)$$

on peut montrer aisément que son évolution est régie par la relation suivante, déduite de l'équation maîtresse et valable en toute généralité :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} [W(\beta \rightarrow \alpha)P_\beta - W(\alpha \rightarrow \beta)P_\alpha] [\ln P_\beta - \ln P_\alpha] \quad (3.32)$$

Si on suppose maintenant que les taux de transition obéissent à une relation de bilan détaillé élémentaire (micro-réversibilité) :

$$W(\alpha \rightarrow \beta) = W(\beta \rightarrow \alpha) \quad (3.33)$$

on voit que l'entropie devient une fonction croissante du temps :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} W(\alpha \rightarrow \beta) [P_\beta - P_\alpha] [\ln P_\beta - \ln P_\alpha] \geq 0 \quad (3.34)$$

ce qui est bien entendu un résultat classique. La dérivée de l'entropie ne peut être nulle que si tous les termes sont nuls, ce qui impose :

$$\forall(\alpha, \beta), P_\alpha = P_\beta \quad \text{si } W(\alpha \rightarrow \beta) > 0 \quad (3.35)$$

Autrement dit, tous les états mutuellement accessibles sont équiprobables. On peut cependant imaginer des formes plus générales de bilan détaillé, du type :

$$W(\alpha \rightarrow \beta) f_\alpha = W(\beta \rightarrow \alpha) f_\beta \quad (3.36)$$

Nous désignerons par $\tilde{W}_{\alpha, \beta}$ la valeur commune. Si le système possède une énergie E_α , et que f_α est donné par :

$$f_\alpha = e^{-E_\alpha/T} \quad (3.37)$$

on retrouve le cas du bilan détaillé canonique. Mais nous nous plaçons ici dans un cadre plus général, sans faire l'hypothèse qu'il existe une énergie. En repartant de l'Eq. (3.32), et en définissant $\tilde{P}_\alpha = P_\alpha/f_\alpha$, on peut écrire :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \tilde{W}_{\alpha, \beta} [\tilde{P}_\alpha - \tilde{P}_\beta] [\ln \tilde{P}_\alpha - \ln \tilde{P}_\beta] + \sum_{\alpha, \beta} \ln f_\alpha [W(\alpha \rightarrow \beta)P_\alpha - W(\beta \rightarrow \alpha)P_\beta] \quad (3.38)$$

Le dernier terme peut se réécrire :

$$\sum_{\alpha,\beta} \ln f_\alpha [W(\alpha \rightarrow \beta)P_\alpha - W(\beta \rightarrow \alpha)P_\beta] = - \sum_{\alpha} \ln f_\alpha \frac{dP_\alpha}{dt} \quad (3.39)$$

$$= - \frac{d}{dt} \sum_{\alpha} P_\alpha \ln f_\alpha \quad (3.40)$$

On en déduit donc qu'une "entropie généralisée" (ou fonction de Lyapounov) \tilde{S} est maximisée par l'évolution :

$$\frac{d\tilde{S}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \tilde{W}_{\alpha,\beta} [\tilde{P}_\alpha - \tilde{P}_\beta] [\ln \tilde{P}_\alpha - \ln \tilde{P}_\beta] \geq 0 \quad (3.41)$$

avec $\tilde{S} = S + \sum_{\alpha} P_\alpha \ln f_\alpha$. Il en résulte que la distribution stationnaire, obtenue en maximisant \tilde{S} , vaut :

$$P_\alpha = \frac{1}{Z} f_\alpha \quad \alpha \in \mathcal{C} \quad (3.42)$$

avec :

$$Z = \sum_{\alpha \in \mathcal{C}} f_\alpha \quad (3.43)$$

où \mathcal{C} désigne une composante ergodique, c'est-à-dire un ensemble d'états mutuellement accessibles. Il n'y a donc pas nécessairement une unique solution stationnaire, mais plutôt une solution associée à chaque composante ergodique.

Dans le cas mentionné plus haut où $f_\alpha = \exp(-E_\alpha/T)$, l'entropie \tilde{S} est bien sûr équivalente à l'énergie libre F usuelle (on a dans ce cas $F = -T\tilde{S}$), mais ce résultat est valable dans un cadre plus général. Il est en particulier intéressant car il met l'accent sur l'importance des relations de bilan détaillé. On voit en effet que \tilde{S} , et la distribution stationnaire qui s'en déduit, ne dépendent pas de la forme exacte de taux de transitions $W(\alpha \rightarrow \beta)$, mais seulement des facteurs f_α qui apparaissent dans les relations de bilan détaillé.

Revenons maintenant au modèle qui nous intéresse ici. Compte tenu de la discussion précédente, on peut chercher s'il existe une relation de bilan détaillé (généralisée) dans ce modèle. En revenant aux taux de transition donnés par l'Eq. (3.30), on voit que ces taux s'écrivent comme une somme de termes relatifs à chaque lien :

$$W(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) = \sum_{\langle i,j \rangle} W_{ij}(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) \quad (3.44)$$

avec :

$$W_{ij}(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) = \left[\prod_{k \neq i,j} \delta(\rho_k - \rho'_k) \right] \times \quad (3.45)$$

$$\delta(\rho'_i + \rho'_j - \rho_i - \rho_j) \frac{\theta(2 - \rho_i - \rho_j)}{\rho_i + \rho_j} \psi \left(\frac{\rho'_i}{\rho_i + \rho_j} \right)$$

Si l'on choisit, comme précédemment, une distribution bêta pour $\psi(q)$, on a :

$$\psi\left(\frac{\rho'_i}{S_{ij}}\right) = \frac{(\rho'_i \rho'_j)^{\mu-1}}{S_{ij}^{2(\mu-1)}} \quad (3.46)$$

ce qui implique que la quantité :

$$\psi\left(\frac{\rho'_i}{S_{ij}}\right) \rho_i^{\mu-1} \rho_j^{\mu-1} \quad (3.47)$$

est symétrique en permutant (ρ_i, ρ_j) avec (ρ'_i, ρ'_j) . Comme de plus $\rho'_k = \rho_k$ pour k différent de i et j , et que $S_{ij} = S'_{ij}$, on peut écrire :

$$W_{ij}(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) \left(\prod_{k=1}^N \rho_k\right)^{\mu-1} = W_{ij}(\{\rho'_k\} \rightarrow \{\rho_k\}) \left(\prod_{k=1}^N \rho'_k\right)^{\mu-1} \quad (3.48)$$

En sommant sur les liens (i, j) , on en déduit que la même relation est valable pour les taux de transition $W(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\})$. Autrement dit, le facteur f_α introduit plus haut avec des notations discrètes vaut dans ce cas $(\prod_k \rho_k)^{\mu-1}$. Il en résulte finalement que la distribution stationnaire à N corps vaut dans ce problème, indépendamment de la dimension d de l'espace :

$$P(\{\rho_k\}) = \frac{1}{Z_N(\bar{\rho})} \prod_{k=1}^N [\rho_k^{\mu-1} \theta(2 - \rho_k)] \delta\left(\sum_{k=1}^N \rho_k - N\bar{\rho}\right) \quad (3.49)$$

En effet, cette distribution stationnaire est proportionnelle au facteur f_α comme nous l'avons vu plus haut, mais elle doit aussi tenir compte des contraintes cinétiques, et du fait que seuls les états ayant la même masse totale $\sum_k \rho_k$ sont mutuellement accessibles. Nous reviendrons au paragraphe 3.3.4 sur les hypothèses qui sous-tendent ce résultat.

Ce dernier est particulièrement intéressant car il généralise la distribution microcanonique usuelle $\delta(\sum_k \rho_k - N\bar{\rho})$, en la pondérant par un facteur $\prod_k [\rho_k^{\mu-1} \theta(2 - \rho_k)]$. On voit donc que la présence d'une loi de conservation ne suffit pas à assurer l'uniformité de la probabilité sur l'hypersurface associée à la quantité conservée, ce qui fournit un contre-exemple explicite à l'hypothèse la plus simple d'équiprobabilité que l'on formule souvent en première approche. L'intérêt de ce résultat est qu'il ne se borne pas à fournir un contre-exemple, mais qu'il suggère aussi les ingrédients de base nécessaires pour déterminer la solution stationnaire de manière plus générale, à savoir lorsqu'elles existent : la loi de conservation globale, les contraintes cinétiques, et la relation de bilan détaillé (éventuellement généralisée).

Distribution stationnaire en un site

En partant de la distribution stationnaire à N variables obtenue en Eq. (3.49), on peut chercher à en déduire la distribution de densité en un site, car c'est

une quantité plus facilement exploitable en pratique, et que l'on peut en outre comparer aux prédictions de champ moyen. En ayant défini la fonction $Z_N(x)$ qui intervient dans la normalisation de la distribution à N corps :

$$Z_N(x) = \int dP_N \delta \left(\sum_{k=1}^N \rho_k - Nx \right) \quad (3.50)$$

où la notation dP_N représente :

$$dP_N = \prod_{k=1}^N [\rho_k^{\mu-1} \theta(2 - \rho_k) d\rho_k] \quad (3.51)$$

La distribution à un site est obtenue en intégrant $P(\{\rho_k\})$ sur $N - 1$ variables :

$$P_1(\rho) = \frac{1}{Z_N(\bar{\rho})} \int dP_{N-1} \delta \left[\sum_{k=1}^{N-1} \rho_k - (N\bar{\rho} - \rho) \right] \rho^{\mu-1} \theta(2 - \rho) \quad (3.52)$$

$$= \frac{\rho^{\mu-1} \theta(2 - \rho)}{Z_N(\bar{\rho})} Z_{N-1} \left(\frac{N\bar{\rho} - \rho}{N-1} \right) \quad (3.53)$$

En supposant que $Z_N(x)$ se met sous la forme générique :

$$Z_N(x) = f(N) e^{NS(x)} \quad (3.54)$$

où $f(N)$ dépend de N de manière "sous-exponentielle", on trouve :

$$P_1(\rho) = \rho^{\mu-1} \theta(2 - \rho) \exp \left[(N-1) S \left(\bar{\rho} - \frac{\rho - \bar{\rho}}{N-1} \right) - NS(\bar{\rho}) \right] \quad (3.55)$$

$$= \rho^{\mu-1} \theta(2 - \rho) \exp \left[(N-1) \left(S(\bar{\rho}) - \frac{\rho - \bar{\rho}}{N-1} S'(\bar{\rho}) \right) - NS(\bar{\rho}) \right]$$

soit finalement :

$$P_1(\rho) = \rho^{\mu-1} e^{\bar{\rho} S'(\bar{\rho}) - S(\bar{\rho})} e^{-\rho S'(\bar{\rho})} \theta(2 - \rho) \quad (3.56)$$

On peut montrer en utilisant les propriétés de $Z_N(x)$ (cf. Annexe C) que cette distribution est bien normalisée, et que sa valeur moyenne vaut $\bar{\rho}$. On obtient ainsi que la distribution de probabilité à un site $P_1(\rho)$ vaut, dans le cadre d'un calcul exact en dimension d quelconque, et à la limite thermodynamique :

$$P_1(\rho) = C \rho^{\mu-1} e^{\beta \rho} \quad (3.57)$$

En d'autres termes, on retrouve les résultats obtenus grâce à une approximation de champ moyen, ce qui signifie que pour des systèmes de grande taille, la distribution à N corps est (quasiment) factorisée. C'est ce qu'on constate sur l'Eq. (3.49), qui montre qu'en dehors du facteur $\delta(\sum_k \rho_k - N\bar{\rho})$ qui traduit la conservation globale de la masse, la distribution est factorisée.

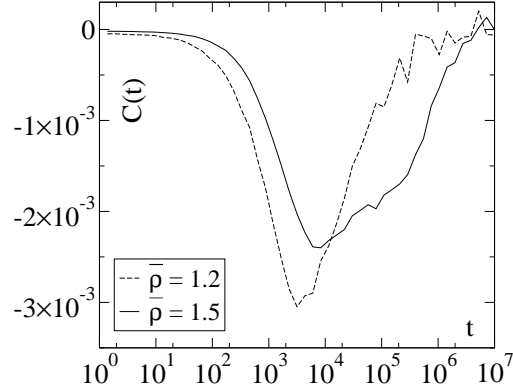


FIG. 3.8 – Covariance des densités prises sur des sites voisins au cours du temps, pour deux valeurs de la densité moyenne $\bar{\rho} = 1.2$ (tirets) et $\bar{\rho} = 1.5$ (trait plein), obtenues par simulations numériques avec une distribution $\psi(q)$ uniforme. Dans l'état initial, les densités locales sont décorréelées, puis elles ont tendance à s'anticorréler au cours de l'évolution avant de revenir à un état décorrélé lorsque l'équilibre est atteint.

Remarquons au passage qu'en dimension $d = 1$, ce modèle est équivalent au “q-modèle” introduit dans le contexte de la matière granulaire pour décrire la transmission des forces dans un milieu granulaire bidimensionnel. Dans notre cas, c'est le temps que joue le rôle de la direction verticale, et la correspondance entre les deux modèles n'est effective que si l'on suppose que le poids des grains est nul dans le q-modèle, ou que les forces transmises sont très grandes devant ce poids. Dans la version la plus simple du q-modèle, on s'intéresse habituellement à la statistique des forces transmises par un grain aux deux grains situés en-dessous de lui. Ces forces sont distribuées de manière aléatoire entre les deux grains, avec une fraction q pour l'un et $1 - q$ pour l'autre, q étant une variable aléatoire distribuée suivant $\psi(q)$. Les ingrédients de base sont donc assez similaires à ceux introduits dans le présent modèle. Des résultats récents sur l'étude du q-modèle avec une distribution $\psi(q)$ en loi bêta ont montré que l'on trouvait le même type de solutions que celles que nous présentons ici [145].

Ces solutions se comportent en loi de puissance à petite force, avec un exposant qui dépend de μ , et qui pourrait être ajusté sur des données expérimentales. On sait en effet que les distributions de forces obtenues expérimentalement présentent une queue exponentielle de manière assez universelle, mais le comportement à petit argument dépend du système considéré. Ceci est bien en accord avec nos résultats, puisque nous obtenons une loi de puissance dépendant de μ à petit argument, et une queue exponentielle indépendante de μ .

Pour mettre en évidence la décorrélation entre sites voisins que l'on constate à partir de la distribution à N corps, nous avons simulé la relaxation vers l'équilibre de ce modèle en dimension $d = 2$, et mesuré la covariance des densités prises

sur des sites voisins au cours du temps. Plus précisément, nous avons calculé la quantité :

$$C(t) = \left\langle \frac{1}{2N} \sum_{\langle i,j \rangle} \rho_i(t) \rho_j(t) \right\rangle - \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \rho_i(t) \right\rangle^2 \quad (3.58)$$

Les résultats sont présentés sur la Fig. 3.8, pour différentes densités. Comme la condition initiale est tirée aléatoirement sur chaque site, la covariance $C(t)$ est nulle pour $t = 0$. Il est intéressant de constater que $C(t)$ décroît ensuite avant de revenir à 0 lorsque l'équilibre est atteint. Pendant la phase de relaxation vers l'équilibre, les densités sur les sites voisins ont donc tendance à être anticorrélées. Ceci peut sans doute s'expliquer par le fait que la simulation a été effectuée avec une distribution $\psi(q)$ uniforme, ce qui entraîne de fortes inhomogénéités sur les liens : la masse est en effet redistribuée de manière très inégale entre les deux sites avec une probabilité importante.

3.3.4 Fraction de liens mobiles et comportement vitreux

Nous allons maintenant tenter de caractériser un peu mieux les propriétés vitreuses de ce modèle. Une quantité intéressante à considérer dans ce contexte est la fraction η de liens mobiles, c'est-à-dire de liens dont la somme des masses $\rho_1 + \rho_2$ reste inférieure à 2. Il est d'ailleurs assez naturel d'interpréter η comme une sorte de paramètre d'ordre pour tester s'il existe une transition vitreuse dans ce modèle. A l'équilibre, η se calcule par la relation :

$$\eta = \int_0^2 d\rho_1 \int_0^2 d\rho_2 P_1(\rho_1) P_1(\rho_2) \theta(2 - \rho_1 - \rho_2) \quad (3.59)$$

En remplaçant par l'expression Eq. (3.57) de $P_1(\rho)$, on trouve après quelques lignes de calculs :

$$\eta = C^2 \frac{\Gamma(\mu)^2}{\Gamma(2\mu)} \int_0^2 dS S^{2\mu-1} e^{\beta S} \quad (3.60)$$

avec, rappelons-le, l'expression suivante pour le coefficient C :

$$C = \left[\int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{\beta \rho} \right]^{-1} \quad (3.61)$$

De plus, le paramètre de contrôle est *a priori* $\bar{\rho}$ plutôt que β , la relation entre les deux étant donnée par l'Eq. (3.24).

On peut montrer facilement que $\eta \rightarrow 1$ pour $\bar{\rho} \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow -\infty$), ce qui est le cas trivial où la contrainte cinétique $\rho_i + \rho_j < 2$ ne joue plus aucun rôle. En revanche, le cas inverse $\bar{\rho} \rightarrow 2$ est plus intéressant car le système devient quasiment bloqué. On peut obtenir dans ce cas une expression analytique explicite de η en fonction de $\bar{\rho}$:

$$\eta \simeq \frac{\Gamma(\mu)^2}{\Gamma(2\mu)} \frac{2}{2 - \bar{\rho}} e^{-2/(2-\bar{\rho})} \quad (3.62)$$

Ainsi, la fraction de liens mobiles tend vers 0 très rapidement lorsque $\bar{\rho} \rightarrow 2$, sans toutefois s'annuler. La situation est donc assez similaire à celle du modèle de Kob-Andersen [106], pour lequel il a été montré récemment [155] que le coefficient de diffusion tend vers zéro également comme $D \sim \exp[-1/(1-\rho)]$ (en dimension $d = 2$). On constate ainsi qu'il existe une densité critique $\bar{\rho}_c = 2$ dans ce modèle, telle que le temps de relaxation (dont on peut supposer qu'il est inversement proportionnel à η) croît plus vite que toute loi de puissance de $(\bar{\rho}_c - \bar{\rho})$, une propriété caractéristique des systèmes vitreux.

Pour mieux comprendre la signification de cette densité critique $\bar{\rho}_c = 2$, nous allons revenir sur la distribution de probabilité $P(\{\rho_k\})$ donnée en Eq. (3.49), qui appelle quelques commentaires. Commençons par voir sous quelles conditions cette distribution stationnaire peut être atteinte à temps long, en partant d'une condition initiale donnée. Comme la solution stationnaire est ergodique, elle suppose donc que les masses ont été redistribuées un grand nombre de fois sur tous les liens. Par conséquent, tous les ρ_i doivent être inférieurs à 2, car à l'issue d'une redistribution sur un lien (i, j) , on a bien entendu ρ_i et $\rho_j < 2$. Cela implique que la solution stationnaire Eq. (3.49) ne peut être atteinte que si la condition initiale $\{\rho_k^0\}$ vérifie :

$$\forall k, \quad \rho_k^0 < 2 \quad (3.63)$$

$$\exists(i, j), \quad \rho_i^0 + \rho_j^0 < 2 \quad (3.64)$$

La deuxième condition signifie qu'il doit exister à l'instant initial au moins un lien mobile pour que le système puisse évoluer vers l'état stationnaire (rappelons que nous avons défini les liens mobiles comme les liens (i, j) tels que $\rho_i + \rho_j < 2$). Il n'est pas totalement clair que cette dernière condition soit suffisante (on pourrait imaginer qu'il faille un nombre minimum $n_0 > 1$ de liens mobiles dans l'état initial), mais elle est en tout cas nécessaire. On peut néanmoins proposer l'argument suivant en faveur de ce critère. Dans le régime de forte densité, les liens mobiles sont rares et isolés pour la plupart ; leur évolution correspond alors à un processus de création et annihilation. En effet, il faut d'abord remarquer qu'un lien mobile ne peut devenir immobile au cours d'une redistribution sur ce même lien, puisque la somme des masses associées au lien est conservée. Par contre, un lien peut changer d'état (mobile ou immobile) lorsqu'un lien voisin (c'est-à-dire qui partage un site avec le lien considéré) subit une redistribution. En nous restreignant au cas $d = 1$ pour simplifier la discussion, le processus peut donc être schématisé par les trois "réactions" suivantes, où M symbolise un lien mobile : $M \rightarrow M$ (pas de modification), $M \rightarrow 2M$ (création d'un nouveau lien mobile), $2M \rightarrow M$ (annihilation d'un lien mobile lors de la rencontre de deux liens mobiles). D'après les propriétés de conservation évoquées plus haut, on voit que la réaction $M \rightarrow \emptyset$ n'est pas permise. De même, une réaction du type $M \rightarrow 3M$ n'est pas possible non plus : si l'on a trois liens $(1, 2)$, $(2, 3)$ et $(3, 4)$, et que $(2, 3)$ est le seul lien mobile au départ, la redistribution de $(2, 3)$ peut par exemple diminuer ρ_2 et rendre ainsi $(1, 2)$ mobile, mais dans ce cas ρ_3

aura augmenté et le lien (3, 4) restera immobile. On voit qu'en dimension $d > 1$, la discussion reste qualitativement identique, mais le nombre de processus de création et d'annihilation devient plus important : lorsqu'un site voit sa densité diminuer au cours d'une redistribution, cela peut créer entre 0 et $z - 1$ liens mobiles, où z est la coordinence du réseau. Par ailleurs, il faut insister sur le fait que cette description en termes de liens mobiles est intuitivement parlante et qualitativement correcte, mais elle ne rend pas compte de la totalité de la dynamique des ρ_i . Enfin, notons qu'il serait intéressant de considérer une version généralisée du modèle dans laquelle la densité totale ne serait pas exactement conservée, pour traduire un effet de compaction lente. Dans ce cas, la réaction $M \rightarrow \emptyset$ pourrait être présente avec une faible probabilité.

Si l'on en reste au stade de cette description simplifiée en termes de processus de création et annihilation, on peut introduire des taux de transition pour chacune des réactions $M \rightarrow M$, $M \rightarrow 2M$ et $2M \rightarrow M$, qui peuvent en principe se calculer à partir de la distribution $P_1(\rho)$. En première approximation, la densité ϕ de liens mobiles évolue alors suivant l'équation :

$$\frac{d\phi}{dt} = \alpha\phi - \gamma\phi^2 \quad (3.65)$$

le premier terme du membre de droite correspondant à la création de liens mobiles, et le second à l'annihilation. On voit ainsi que si l'on part d'une condition initiale $\{\rho_k^0\}$ dans laquelle tous les ρ_k^0 sont inférieurs à 2, mais avec une très faible fraction de liens mobiles, la création de liens mobiles sera *a priori* prépondérante sur l'annihilation, ce qui suggère que des liens mobiles vont se créer jusqu'à atteindre la distribution stationnaire Eq. (3.49). Il faut noter également que les liens mobiles sont capables de diffuser grâce à l'enchaînement des réactions $M \rightarrow 2M$ et $2M \rightarrow M$, si le lien mobile final n'est pas le même que le lien initial. C'est grâce à ce processus de diffusion des liens mobiles que le système parvient à rester ergodique à forte densité.

Bien entendu, si l'on part d'une condition initiale telle que $\rho_i^0 + \rho_j^0 > 2$ pour tous les liens (i, j) , tous les liens sont immobiles et le système est dans un état bloqué : aucune évolution ne peut se produire. En revanche, que se passe-t-il si l'on part d'une condition initiale telle que certains sites aient une densité $\rho_i^0 > 2$, mais qu'il existe par ailleurs des liens mobiles ? Il est clair que les sites ayant un $\rho_i^0 > 2$ ne pourront jamais évoluer, puisque quelle que soit la densité des voisins j , on aura toujours $\rho_i^0 + \rho_j > 2$, et nous qualifierons donc ces sites i de "sites bloqués". Il est alors naturel de séparer le réseau global en deux sous-ensembles, l'ensemble des sites bloqués et son complémentaire.⁸ On peut s'attendre à ce que les sites non bloqués évoluent jusqu'à atteindre l'équilibre, par diffusion des liens mobiles. Cet équilibre (ou état stationnaire) est régi non pas par la densité

⁸Notons qu'il faut bien distinguer les notions de site bloqué et de lien immobile : un site bloqué n'évoluera jamais, alors qu'un lien immobile est temporairement dans l'impossibilité d'évoluer, mais il pourra peut-être redevenir mobile à la faveur du réarrangement d'un lien voisin.

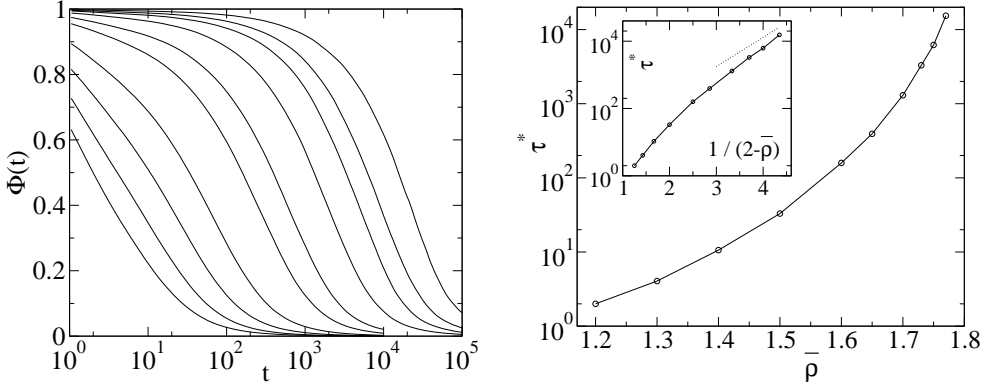


FIG. 3.9 – *A gauche : fonction de corrélation temporelle $\Phi(t)$, en régime stationnaire, pour des densités moyennes $\bar{\rho} = 1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 1.6, 1.65, 1.7, 1.73, 1.75$ et 1.77 (de gauche à droite), calculée sur un système bidimensionnel de taille linéaire $L = 50$. A droite : temps de décroissance τ^* de $\Phi(t)$ (défini par $\Phi(\tau^*) = \frac{1}{2}$) en fonction de $\bar{\rho}$. L'encart montre que les données semblent compatibles avec une dépendance en $\exp[2/(2 - \bar{\rho})]$ (pointillés) pour $\bar{\rho}$ proche de 2.*

moyenne globale, mais par la densité moyenne des sites non bloqués, qui est par définition inférieure à 2. Néanmoins, si la proportion de sites bloqués devient trop forte, alors l'ensemble de sites bloqués va percoler, et les sites non bloqués vont se retrouver séparés en un grand nombre de petits amas non connectés. Par conséquent, on constate qu'il y a deux paramètres de contrôle pertinents dans ce modèle : d'une part, la densité moyenne $\bar{\rho}$ des sites non bloqués, et d'autre part la fraction ω de sites bloqués. L'étude analytique présentée plus haut a permis de bien comprendre le comportement du système dans le cas $\omega = 0$. Il faudrait maintenant généraliser cette étude au cas $\omega > 0$, en faisant sans doute davantage appel aux simulations numériques, pour mieux appréhender l'effet des amas de sites bloqués (et leur percolation éventuelle) sur la dynamique des liens mobiles.

3.3.5 Hétérogénéités dynamiques et échelle de longueur

Pour conclure cette étude (encore relativement préliminaire) de ce modèle avec contraintes cinétiques, il est important d'aborder la question des échelles de longueur apparaissant dans ce problème. Comme cela a été montré récemment, l'apparition d'échelles de longueur dans les systèmes sans désordre est intimement liée à la question des hétérogénéités dynamiques [19, 25], autrement dit à la coexistence de régions mobiles et de régions immobiles. Dans la mesure où ce modèle permet de définir à tout instant si un lien est mobile ou immobile, on pourrait se contenter de mesurer une fonction de corrélation spatiales des liens mobiles. Cependant, cette approche souffrirait d'un certain manque de généralité, dans la mesure où la possibilité de définir de manière instantanée si un lien (ou

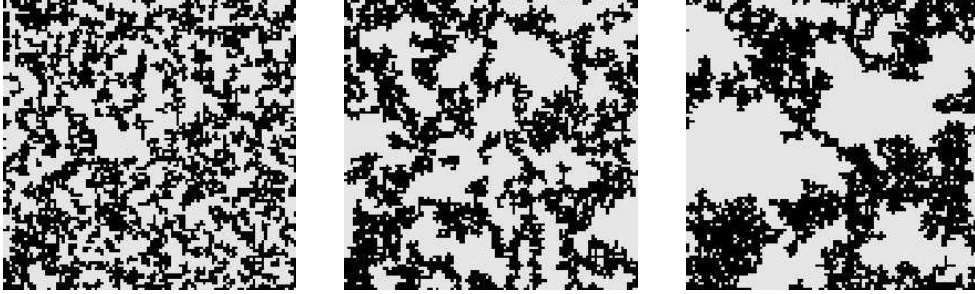


FIG. 3.10 – Visualisation directe des hétérogénéités dynamiques grâce aux variables ϕ_i^* (cf. texte), sur une réalisation donnée de la dynamique, pour trois valeurs différentes de la densité moyenne : de gauche à droite, $\bar{\rho} = 1.5, 1.65, 1.75$ (taille linéaire du système : $L = 100$). Les sites n’ayant pas changé d’état dans l’intervalle de temps $[0, \tau^*]$, ce qui correspond donc à $\phi_i^* = 1$, apparaissent en gris clair. On constate nettement que la taille typique des régions mobiles et immobiles croît avec la densité moyenne.

une zone) est mobile ou non reste très spécifique à ce modèle. En particulier, il suffirait que l’on remplace la contrainte cinétique stricte par une contrainte “adoucie” (de nature probabiliste) pour que cette définition ne soit plus possible. Par conséquent, il est préférable d’adopter d’emblée une approche générale du type de celle proposée notamment en Réfs. [19, 25]⁹. Commençons par définir en chaque site i une fonction de corrélation temporelle $\phi_i(t)$ (qui n’est donc pas moyennée), en supposant pour simplifier qu’elle prend des valeurs entre 0 et 1. On peut en déduire la fonction de corrélation temporelle globale $\Phi(t)$ en moyennant sur les sites et sur les réalisations :

$$\Phi(t) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \phi_i(t) \right\rangle \quad (3.66)$$

Le temps caractéristique de décroissance de $\Phi(t)$, que nous notons τ^* , permet alors de définir une variable locale $\phi_i^* \equiv \phi_i(\tau^*)$. Ceci permet de définir de manière générique les sites immobiles, qui se sont décorrélés moins vite que la moyenne, et pour lesquels $\phi_i^* \simeq 1$, et les sites mobiles qui se sont décorrélés plus vite que la moyenne, et qui vérifient donc $\phi_i^* \simeq 0$. Le choix spécifique de $t = \tau^*$ assure en outre que les sites mobiles et immobiles ainsi définis sont en nombre comparable. On peut alors calculer la fonction de corrélation spatiale $C(r)$ des variables ϕ_i^* :

$$C(r) = \left\langle \frac{1}{2N} \sum_{|i-j|=r} \phi_i^* \phi_j^* - \left(\frac{1}{N} \sum_i \phi_i^* \right)^2 \right\rangle \quad (3.67)$$

⁹Précisons que nous nous plaçons en régime stationnaire, et que nous n’étudions pas ici les effets de vieillissement éventuels.

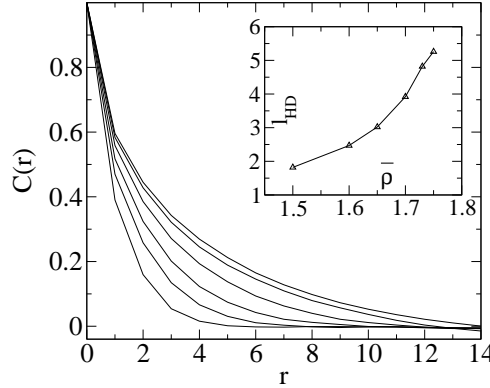


FIG. 3.11 – *Fonction de corrélation spatiale $C(r)$ des variables ϕ_i^* pour différentes densités $\bar{\rho} = 1.5, 1.6, 1.65, 1.7, 1.73$ et 1.75 . La longueur ℓ_{HD} caractérisant la taille des régions mobiles et immobiles, déduite de la décroissance de $C(r)$, est représentée en encart en fonction de la densité moyenne $\bar{\rho}$.*

Le facteur $1/2N$ vient du fait que pour simplifier, nous n'avons pris en compte que les sites i et j situés à une distance r le long des deux axes du réseau. La décroissance de cette fonction de corrélation fournit alors une échelle de longueur qui caractérise la taille typique des régions mobiles et immobiles, dont on peut d'ailleurs s'attendre à ce qu'elles aient des tailles similaires de par la symétrie de leur définition. Insistons également sur le fait que la notion de mobilité que nous utilisons ici est différente de celle employée au paragraphe précédent : elle se rapporte ici à une échelle de temps τ^* , alors que c'était auparavant une notion instantanée et spécifique au modèle.

Nous allons maintenant mettre en œuvre numériquement dans le présent modèle cette méthode de caractérisation des hétérogénéités dynamiques. Les simulations sont effectuées sur un système bidimensionnel de taille $L \times L = 50^2$, avec $\mu = 1$ et différentes valeurs de la densité moyenne $\bar{\rho}$. Nous choisissons de définir les $\phi_i(t)$ de la manière la plus simple possible : en partant d'une condition initiale équilibrée à la densité moyenne $\bar{\rho}$, $\phi_i(t)$ est pris égal à 1 si aucune redistribution de masse mettant en jeu le site i n'est intervenue dans l'intervalle de temps $[0, t]$, et égal à 0 sinon.

La fonction de corrélation temporelle $\Phi(t)$ est présentée sur la Fig. 3.9 (gauche) pour différentes valeurs de $\bar{\rho}$ comprises entre 1.2 et 1.77. On en déduit ainsi la valeur de τ^* en fonction de la densité moyenne – cf. Fig. 3.9 (droite) – en ayant défini τ^* par la relation $\Phi(\tau^*) = \frac{1}{2}$. Ce temps de relaxation τ^* croît fortement lorsque $\bar{\rho}$ approche de la valeur 2, et cette croissance est compatible avec une dépendance en $\exp[2/(2 - \bar{\rho})]$, comme suggéré par l'expression (3.62) de η .

On peut dès lors calculer les variables ϕ_i^* , qui ne sont finalement que des variables de spin, et les représenter graphiquement pour visualiser les hétérogénéités dynamiques. C'est ce qui est fait sur la Fig. 3.10, pour trois valeurs de la densité

moyenne $\bar{\rho} = 1.5, 1.65$ et 1.75 , où les sites ayant changé d'état entre 0 et t (donc mobiles d'après la définition précédente) sont représentés en noir. On voit clairement que la taille typique des régions mobiles et immobiles augmente lorsque $\bar{\rho}$ tend vers 2 .

On quantifie ensuite cette échelle de longueur en calculant la corrélation spatiale $C(r)$. Les résultats sont représentés sur la Fig. 3.11, et on retrouve bien le fait que la longueur caractérisant la décroissance augmente avec $\bar{\rho}$. En représentant les données en échelle semi-logarithmique, on observe que la décroissance est notablement non exponentielle, et la détermination de l'échelle de longueur associée n'est donc pas immédiate. Faute de mieux, nous avons défini arbitrairement cette longueur ℓ_{HD} par la relation $C(\ell_{\text{HD}}) = 0.2$. L'encart de la Fig. 3.11 présente les valeurs de ℓ_{HD} ainsi obtenues en fonction de $\bar{\rho}$, et confirme que cette échelle de longueur ℓ_{HD} augmente nettement au voisinage de $\bar{\rho} = 2$. Une étude plus approfondie du comportement de ℓ_{HD} pour $\bar{\rho} \rightarrow 2$ serait nécessaire afin de confirmer ces résultats préliminaires et de tester si cette échelle de longueur diverge ou non en $\bar{\rho} = 2$. Dans l'affirmative, une telle divergence serait du plus grand intérêt puisqu'elle laisserait penser que l'on peut employer pour certains systèmes vitreux les techniques développées dans le cadre des systèmes critiques, comme le groupe de renormalisation.

Chapitre 4

Effet Kovacs dans les modèles vitreux

4.1 Introduction

Nous avons vu au cours des chapitres précédents différentes manières d'aborder la dynamique vitreuse, soit en termes de dynamique dans l'espace des phases, soit en termes de dynamique de croissance de domaines dans l'espace réel. Nous allons dans ce chapitre comparer ces concepts en les appliquant au cas d'un effet observé expérimentalement, et dont on souhaiterait savoir s'il permet de discriminer entre différentes approches de la dynamique vitreuse.

Les systèmes ayant une dynamique lente ou vitreuse présentent souvent un comportement non trivial lorsque des changements de température sont appliqués au sein de la phase vitreuse. Puisque le système se trouve hors d'équilibre, on s'attend à ce que ses propriétés dépendent en général de l'histoire du système, un effet que l'on appelle souvent "mémoire". Cependant, ce terme générique recouvre des effets assez différents. Dans la littérature récente concernant les verres de spin, la mémoire est associée à une observable à deux temps, telle que la susceptibilité alternative (qui dépend à la fois de la fréquence et de l'âge du système) ou d'autres fonctions de réponse. Il a été montré qu'après un cycle négatif en température, la susceptibilité alternative retrouvait lors du retour à la première température la valeur exacte qu'elle avait avant que la température ne soit abaissée, d'où le nom de mémoire. Cet effet serait trivial si la dynamique était totalement gelée à basse température, mais les expériences montrent de manière très claire qu'une évolution significative s'y déroule [117, 98, 43]. Le même effet qualitatif, bien que moins marqué, a été observé dans de nombreux autres matériaux vitreux (polymères, colloïdes, ferro-électriques, etc.) [15, 42, 103, 136, 135].

Il existe cependant un autre effet mémoire, bien connu dans les verres structuraux et polymériques, qui fut étudié expérimentalement par Kovacs il y a quarante ans. Cet effet concerne les observables à un temps, telles que le volume spécifique ou la densité d'énergie, et montre clairement que l'état hors d'équilibre du système ne peut pas être complètement caractérisé par la valeur (fonction du temps)

de quelques variables thermodynamiques. La procédure suivie par Kovacs était la suivante [110, 111] : tout d’abord, une courbe de référence est obtenue en trempant l’échantillon depuis une température T_0 suffisamment élevée jusqu’à une basse température T_2 , et en mesurant le volume $V(t)$ au cours du temps jusqu’à un temps t_{eq} pour lequel le système peut être considéré comme en équilibre. Cela définit un volume $V_{eq}(T_2) = V(t_{eq})$. Dans une deuxième étape, l’échantillon est trempé depuis T_0 jusqu’à une température $T_1 < T_2$, jusqu’à un temps t_1 . La température est alors brusquement remontée de T_1 à T_2 . Le temps t_1 est précisément choisi de sorte que le volume atteint juste après le saut en température (c’est-à-dire une fois que les processus les plus rapides ont relaxé) prenne la valeur $V(t_1^+) = V_{eq}(T_2)$, sachant qu’à l’équilibre on aurait $V_{eq}(T_1) < V_{eq}(T_2)$. On pourrait s’attendre naïvement à ce que l’évolution soit stoppée, puisque le volume a déjà atteint sa valeur d’équilibre à la nouvelle température. Pourtant, le volume $V(t)$ montre en fait un comportement *non monotone* pour $t > t_1$, en augmentant d’abord pour relaxer ensuite vers sa valeur d’équilibre $V_{eq}(T_2)$:

$$V(t) = V_{eq}(T_2) + \Delta V(t), \quad (4.1)$$

où $\Delta V \geq 0$ est la “bosse de Kovacs”, telle que $\Delta V(t = t_1^+) = 0$ et $\Delta V(t \rightarrow \infty) = 0$. Il faut noter que la condition $V(t_1^+) = V_{eq}(T_2)$ (et non pas $V(t_1^-) = V_{eq}(T_2)$, qui serait pourtant plus facile à imposer) a été choisie de façon à éliminer la partie “triviale” de cet effet, liée à l’expansion thermique des degrés de liberté rapides. La présence d’un effet non trivial signale alors l’existence de réarrangements structuraux, qui se déroulent sur des échelles de temps nettement plus longues. Cette distinction étant basée sur une séparation des échelles de temps entre différents processus de relaxation, on voit d’emblée qu’elle ne sera pas toujours évidente à opérer, et qu’il est difficile de la définir en toute généralité.

La Fig. 4.1 reproduit les résultats originaux publiés par Kovacs en 1963 [110], obtenus sur de l’acétate de polyvinyle. Cet effet montre sans ambiguïté que d’autres variables “internes”, outre le volume, sont nécessaires pour caractériser l’état hors d’équilibre du système, et que ces variables n’ont pas atteint leur valeur d’équilibre à T_2 à la fin de la première étape. La mémoire dans ce cas réfère au fait que ces variables internes gardent une trace, dans une certaine mesure, de l’histoire du système. Pour éviter la confusion entre les différents types d’effets mémoire, nous suivrons la Réf. [27] et appellerons ce phénomène “l’effet Kovacs”, même si cette dénomination est pour l’instant assez peu répandue. La bosse de Kovacs est caractérisée par sa hauteur ΔV_K , et par le temps τ_K au bout duquel le maximum est atteint : $\Delta V(t = t_1 + \tau_K) = \Delta V_K$. Qualitativement, la hauteur ΔV_K augmente avec la différence de température $T_2 - T_1$ (elle doit de manière évidente s’annuler pour $T_1 = T_2$), alors que le temps τ_K décroît lorsque $T_2 - T_1$ augmente.

Un effet similaire a été rapporté récemment dans le contexte de la matière granulaire [99], pour laquelle la température thermodynamique n’est plus pertinente compte-tenu de la taille déjà macroscopique des grains. On remplace donc la température par une vibration mécanique extérieure, dont l’amplitude sert de

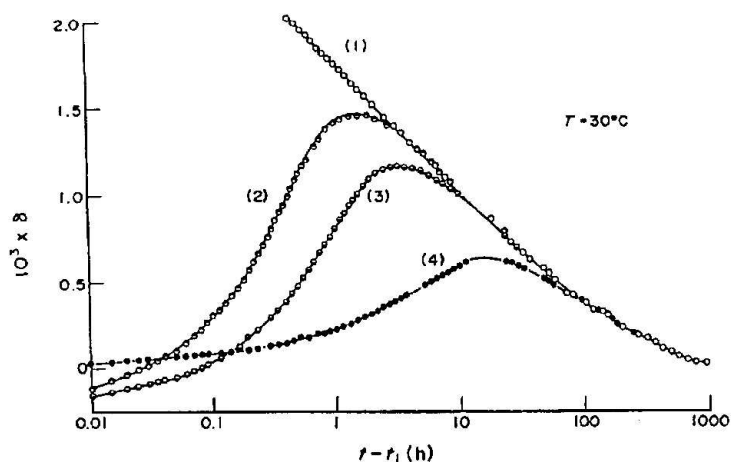


FIG. 4.1 – Evolution isotherme à $T_2 = 30^\circ\text{C}$ de la variation relative du volume ($\times 10^3$) d'un échantillon d'acétate de polyvinyle : après une trempe directe depuis $T_0 = 40^\circ\text{C}$ à $T_2 = 30^\circ\text{C}$ (1); après une trempe de $T_0 = 40^\circ\text{C}$ à $T_1 = 10^\circ\text{C}$ (2), 15°C (3), ou 25°C (4) suivie d'une remontée à la température $T_2 = 30^\circ\text{C}$. D'après A. J. Kovacs, *Adv. Polym. Sci.* **3**, 394 (1963).

paramètre de contrôle. Dans la première étape de cette expérience, on agite le système avec trois amplitudes de vibration différentes (disons faible, modérée et forte pour fixer les idées) pendant un temps t_1 choisi de manière à atteindre une densité donnée, la même dans les trois cas. Dans la deuxième étape de l'expérience, on applique l'amplitude de vibration modérée dans tous les cas, et on enregistre la densité au cours du temps. Si l'état du système était seulement décrit par sa densité, alors l'évolution de la densité après t_1 serait la même dans les trois situations, et devrait suivre la courbe de référence correspondant à l'amplitude modérée, qui n'a pas subi de variation du paramètre de contrôle. On constate expérimentalement que cela n'est pas le cas : comme pour les verres polymériques, le système faiblement vibré doit d'abord se dilater avant d'être capable de reprendre sa compaction, alors que le système fortement vibré se compacte plus vite juste après le saut d'amplitude que dans l'expérience de référence [99].

Enfin, le même effet a été récemment observé dans des simulations numériques de verres de spins tridimensionnels [24] ainsi que dans des simulations d'un modèle réaliste de liquide moléculaire [131]. Dans les verres de spin, la densité d'énergie présente la bosse caractéristique de Kovacs lorsque la température est augmentée ; la hauteur de la bosse et le temps du maximum se comportent qualitativement comme dans les verres polymériques. Des propriétés similaires à l'effet Kovacs ont été aussi identifiées expérimentalement dans des verres dipolaires [3] et dans les verres de spins [140]. Puisque l'effet Kovacs semble être très générique, une question naturelle serait de savoir si la physique sous-jacente est la même dans

tous ces systèmes. Formulé différemment, est-ce que l'effet peut *sélectionner* entre différents modèles microscopiques de dynamique vitreuse ?

Le but de ce chapitre est de discuter quelques modèles simples qui permettent d'éclairer les questions précédentes. Les travaux qui y sont présentés sont le fruit d'une collaboration avec J.-M. Drouffe et C. Godrèche [34]. Dans ces modèles, les variables internes auxquelles il a été fait référence plus haut sont en fait des fonctions de distribution (de tailles de domaines, ou de temps de relaxation) dont seule la *moyenne* est fixée par le protocole expérimental, alors que la forme de la distribution garde une trace de l'histoire du système. Nous montrons que l'effet Kovacs est bien générique d'un point de vue qualitatif, mais que la forme détaillée de la bosse de Kovacs peut révéler certaines informations microscopiques intéressantes sur les mécanismes vitreux en jeu (voir aussi à ce sujet la discussion en Réf. [29]). Nous discutons d'abord les modèles dans lesquels la dynamique vitreuse est due à un phénomène de croissance de domaines, en rappelant et généralisant les principaux résultats des Réfs. [49, 27]. Nous étudions ensuite l'effet Kovacs dans le modèle de pièges, où des calculs détaillés peuvent être effectués. Nous terminerons avec quelques suggestions pour analyser les résultats expérimentaux, avec l'espoir que l'effet Kovacs pourrait aider à identifier des distributions de temps de relaxation, et mettre en évidence indirectement une échelle de longueur croissante dans les systèmes vitreux.

4.2 Effet Kovacs et croissance de domaines

Bien que nous ayons montré au chapitre précédent que la croissance d'une échelle de longueur dans les systèmes vitreux pouvait avoir une signification assez différente de celle rencontrée habituellement dans la croissance de domaines usuelle, nous allons considérer dans la suite ce dernier cas, qui est bien mieux compris quantitativement.

Le système hors d'équilibre le plus simple est sans doute le modèle d'Ising unidimensionnel avec une dynamique de Glauber, et nous rappelons tout d'abord les résultats obtenus par Brawer [49] en insistant sur leur interprétation physique. Ce système ne s'ordonne à aucune température non nulle, mais à température suffisamment basse, la taille d'équilibre des domaines devient grande, et pour des temps plus courts que le temps d'équilibration, la dynamique est gouvernée par la croissance de la taille typique des domaines, qui varie comme la racine carrée du temps. L'énergie, qui est simplement reliée à la densité moyenne de parois de domaines, joue dans ce modèle le rôle du volume dans l'expérience de Kovacs. Lorsque le système est préparé à température T_1 pendant une durée t_1 telle que la distance moyenne entre les parois soit égale à la taille d'équilibre à $T_2 > T_1$, la distribution hors d'équilibre des tailles de domaines à T_1 est davantage piquée autour de sa moyenne que la distribution d'équilibre à T_2 (cf. Fig. 4.2). En particulier, les petits domaines sont sous-peuplés par rapport à l'équilibre. En chauffant, le premier effet est que de nouvelles parois de domaines nucléent

à l'intérieur des grands domaines, provoquant une augmentation du nombre de petits domaines (ainsi que de l'énergie). La forme de la bosse de Kovacs peut être calculée exactement dans ce modèle [49], et on trouve qu'elle est linéaire en temps pour $t \ll \tau_K$, avec une pente qui croît avec l'écart de température $T_2 - T_1$, avant d'atteindre la courbe de relaxation exponentielle qui décrit une trempe directe depuis les hautes températures. Notons que le temps de relaxation est fini pour toute température $T > 0$ dans ce modèle; le taux de décroissance lors de la relaxation finale ne dépend que de T_2 , mais pas de T_1 . Comme discuté par Brawer [49], ces propriétés sont qualitativement similaires à ce qui est observé sur les courbes expérimentales reportées sur la Fig. 4.1.

En s'inspirant des résultats précédents sur le modèle d'Ising unidimensionnel, ainsi que sur ceux obtenus dans le modèle XY bidimensionnel à basse température [27], on peut tenter de généraliser ce scénario concernant l'effet Kovacs dans les systèmes de dimension quelconque présentant de la croissance de domaines. Après un temps t_1 passé à température T_1 , le système s'ordonne jusqu'à une longueur $\ell_1 = \ell(t_1, T_1)$. Si la longueur de corrélation d'équilibre $\xi(T_2)$ à la température T_2 est infinie, ou en tout cas très grande comparée à $\ell(t_1, T_1)$, le mécanisme de l'effet Kovacs peut être décrit de la manière suivante [27, 24].¹⁰ A l'instant t_1 , le système possède un excès d'énergie (par rapport à l'énergie d'équilibre) dû à la présence de parois de domaines avec une taille typique ℓ_1 . Cette densité d'énergie en excès se comporte comme $\ell_1^{\Theta-d}$, où Θ est l'exposant donnant la loi d'échelle de l'énergie en excès d'un domaine avec sa taille (par exemple, $\Theta = d - 1$ pour le modèle d'Ising, et $\Theta = d - 2$ pour le modèle XY). Lorsque la température est augmentée jusqu'à T_2 , l'énergie de volume des domaines est soudain trop basse comparée à sa valeur d'équilibre à T_2 . Cette contribution à la densité d'énergie croît alors rapidement en nucléant de nouvelles parois de domaines parmi les grands domaines de taille ℓ_1 qui préexistaient. Cette image physique a été en fait suggérée en Réf. [3] pour interpréter des effets similaires à l'effet Kovacs dans des verres dipôlares.

Pour des temps plus longs, le processus de croissance de domaine initial redémarre et la densité de parois de domaines décroît, ce qui entraîne une baisse de la densité d'énergie totale. On pourrait s'attendre *a priori* à ce que la transition entre les deux effets s'opère lorsque l'échelle de longueur $\ell(t, T_2)$ associée au processus dynamique initié par le changement de température devienne de l'ordre de ℓ_1 , c'est-à-dire après un temps τ^* tel que :

$$\ell(\tau^*, T_2) = \ell_1 \quad (4.2)$$

Toutefois, le temps τ_K correspondant au maximum de la bosse de Kovacs se trouve être, en général, nettement plus petit que τ^* . Plus précisément, l'image suivante

¹⁰Dans le cas opposé pour lequel $\xi(T_2) \ll \ell(t_1, T_1)$, l'effet Kovacs est trivial dans le sens où seuls les degrés de liberté rapides, correspondant à l'énergie de volume des domaines, ont besoin de se rééquilibrer. Ce n'est que dans le cas où la bosse de Kovacs apparaît pour des temps très supérieurs aux échelles de temps microscopiques que l'on peut observer un effet non trivial en suivant le protocole de Kovacs, dans lequel la contribution des degrés de liberté rapides est éliminée en choisissant $E(t_1^+) = E_{eq}(T_2)$, comme cela a été discuté dans l'introduction.

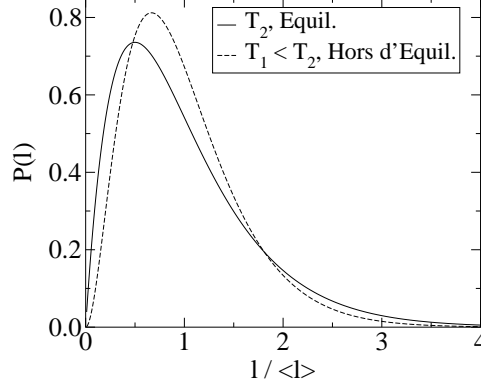


FIG. 4.2 – Distribution des tailles de domaines dans le modèle d’Ising unidimensionnel pour deux températures différentes, de sorte que la taille moyenne des domaines soit identique dans les deux cas. La distribution hors d’équilibre à température $T_1 < T_2$ (tirets) est davantage piquée que la distribution d’équilibre à T_2 (trait plein). En chauffant, les petits domaines, initialement moins nombreux, apparaissent rapidement à l’intérieur des plus grands.

se dégage des calculs effectués en Réf. [27] sur le modèle XY bidimensionnel (dans l’approximation des ondes de spins) :

- Dans la limite où $\ell(t, T_2)$ et ℓ_1 sont bien plus grands que le pas du réseau a , les processus rapides de nucléation ont déjà eu lieu, et on peut s’attendre à ce que la densité d’énergie E prenne la forme d’échelle suivante :

$$\Delta E = E(t_1 + t) - E_{eq}(T_2) = \Delta E_K \mathcal{F}\left(\frac{\ell(t, T_2)}{\ell_1}\right), \quad \ell(t, T_2) \gg a \quad (4.3)$$

où ΔE_K est la hauteur de la bosse de Kovacs, et la fonction d’échelle $\mathcal{F}(u)$ se comporte asymptotiquement comme $\mathcal{F}(u) \sim u^{\Theta-d}$ quand $u \rightarrow \infty$. En utilisant le fait que ΔE ne devrait pas dépendre de t_1 à temps longs, on trouve $\Delta E_K \sim \ell_1^{\Theta-d}$, ce qui signifie que la hauteur maximale de la bosse est de l’ordre de l’énergie d’excès emmagasinée dans les parois de domaines lors de la première étape à température T_1 . Comme cela a été montré en Réf. [27], la forme d’échelle ci-dessus est valable de manière exacte pour le modèle XY bidimensionnel dans sa phase critique ordonnée, pour laquelle $\Theta = d - 2$. On trouve dans ce cas $\mathcal{F}_{XY}(u) = (1 + u^2)^{-1}$.

- A l’inverse, dans la limite de temps court $\ell(t, T_2) \sim a$, on s’attend à une contribution de nucléation à ΔE qui soit responsable de la remontée de l’énergie. En considérant encore le modèle XY sur sa ligne critique, où la longueur de corrélation d’équilibre ξ est infinie, on trouve une contribution

en loi de puissance [27] :

$$\Delta E \approx \Delta E_K \left[1 - \left(\frac{\ell(t, T_2)}{a} \right)^{\ominus-d} \right]. \quad (4.4)$$

Notons que cette contribution s'annule bien pour $t = 0$, car dans ce cas $\ell(t = 0, T_2) = a$, mais elle ne peut pas être écrite sous la forme d'une fonction de ℓ/ℓ_1 , ce qui est à l'origine de la différence entre τ_K et τ^* . De manière plus générale, si la longueur de corrélation ξ est finie, on s'attend à ce que la loi de puissance précédente soit remplacée par une convergence exponentielle, qui ne prenne pas une forme d'échelle non plus.

Dans ce scénario de croissance de domaines, on trouve que l'échelle de longueur ℓ_1 (et par conséquent τ^*) est une fonction décroissante de $T_2 - T_1$. Physiquement, cela vient du fait que l'énergie de volume diminue en abaissant T_1 . La densité d'énergie résiduelle ($\sim \ell_1^{\ominus-d}$), liée au parois de domaines, doit alors être plus grande afin que la somme des deux contributions soit égale à la valeur d'équilibre à T_2 :

$$E(t_1, T_1) = E_{eq}(T_1) + \ell_1^{\ominus-d} = E_{eq}(T_2). \quad (4.5)$$

Pour de petits écarts en température $T_2 - T_1$, on s'attend alors à une relation linéaire $\Delta E_K \sim \ell_1^{\ominus-d} \propto C(T_2 - T_1)$, où C est la chaleur spécifique. Ainsi, la dépendance qualitative de τ^* et $\Delta E_K \sim \ell_1^{\ominus-d}$ avec $T_2 - T_1$ est correctement prédite dans ce cadre.

Si la longueur $\ell(t, T)$ croît comme une loi de puissance du temps, alors à partir de l'Eq. (4.3), $\Delta E/\Delta E_K$ devient une fonction d'échelle de t/τ^* dans la limite des temps longs, pour laquelle la contribution initiale de nucléation (qui ne se remet pas à l'échelle) disparaît. A cause de cette dernière contribution, la fonction d'échelle \mathcal{F} a une valeur non nulle à petit argument : $\mathcal{F}(0^+) > 0$. Par conséquent, dans le scénario de croissance de domaines (qui inclut le cas d'équilibre discuté par Brawer et rappelé plus haut), la bosse de Kovacs ne se remet pas à l'échelle comme une fonction de t/τ_K . Au contraire, il faudrait plutôt adimensionner le temps t par un temps caractéristique τ^* déterminé de sorte que l'amplitude de la bosse ait décré par exemple d'un facteur deux. Pour les mêmes raisons, des déviations systématiques par rapport à la loi d'échelle sont attendues dans le régime $t \ll \tau^*$.

Nous allons comparer dans la suite les résultats de la croissance de domaines avec ceux d'un autre modèle soluble, le modèle de pièges, qui prédit différentes formes pour la bosse de Kovacs selon les régimes. Nous verrons que dans certains cas, les résultats obtenus se trouvent être très similaires à ceux prédits par les modèles de croissance de domaines.

4.3 Effet Kovacs dans le modèle de pièges

Nous présentons maintenant les principales étapes du calcul explicite de l'énergie en fonction du temps dans le modèle de pièges avec distribution exponentielle

des énergies lorsqu'on lui applique le protocole thermique de Kovacs. Comme les degrés de liberté rapides sont absents dans le modèle de pièges (il n'y a pas de dynamique de fond de puits), il n'est pas utile de distinguer entre les temps t_1^- et t_1^+ , alors qu'il est important de le faire à la fois expérimentalement et dans les modèles possédant une dynamique microscopique. Remarquons d'ailleurs que calculer l'évolution de l'énergie des pièges ressemble à la procédure appliquée en Réf. [131], où l'énergie des structures inhérentes a été mesurée en fonction du temps dans des simulations de verres moléculaires.

Le détail des calculs est reporté en annexe. Notons que des résultats numériques concernant l'application d'un protocole thermique impliquant plusieurs sauts en température ont été présentés dans la Réf. [157], mais le protocole utilisé était différent, et seule la fonction de corrélation a été calculée. Les résultats que nous présentons ici sont donc, à notre connaissance, originaux. Nous avons considéré principalement deux cas différents. Dans le premier cas, les températures T_1 et T_2 sont toutes deux supérieures à T_g , mais très proches de cette température de transition, de sorte que le système finit par s'équilibrer, mais avec des temps de relaxation très longs. Dans le second cas, les deux températures sont en-dessous de T_g , si bien que le système est dans le régime de vieillissement où l'équilibre n'est jamais atteint. L'expérience originale de Kovacs correspondrait au premier cas, puisque le volume atteint une valeur d'équilibre à T_2 , prise comme référence pour l'énergie. Dans le deuxième cas, le temps t_1 auquel la température est remontée devient en fait arbitraire, mais des propriétés d'échelle intéressantes apparaissent. En outre, nous mentionnerons brièvement les résultats correspondant au cas $T_1 < T_g < T_2$.

4.3.1 Cas $T > T_g$: relaxation vers l'équilibre

Nous utiliserons une description continue en énergie (cf. [129]), c'est-à-dire que le système est décrit par la probabilité $P_T(E, t)$ d'être dans un état ayant une énergie (de barrière) E au temps t et à la température T , qui évolue selon l'équation maîtresse suivante :

$$\frac{\partial P_T}{\partial t}(E, t) = -e^{-E/T} P_T(E, t) + \omega(t) \rho(E) \quad (4.6)$$

où $\omega(t) = \int_0^\infty dE' e^{-E'/T} P_T(E', t)$ est le taux de transition dynamique moyen. Pour $T > T_g$, $P_T(E, t)$ relaxe vers la distribution d'équilibre $P_T^{eq}(E) = Z^{-1} e^{E/T}$. La quantité intéressante à étudier est alors l'écart à l'équilibre, autrement dit la distribution $p_T(E, t)$ définie comme $p_T(E, t) = P_T(E, t) - P_T^{eq}(E)$. Concentrons-nous d'abord sur une simple trempe isothermale à partir d'une condition initiale donnée $P_0(E) = P_{T_0}^{eq}(E)$. L'évolution de $p_T(E, t)$ peut être calculée en utilisant une transformée de Laplace en temps, et si $T_0 > T$, le comportement asymptotique de la distribution devient indépendant de la condition initiale $P_0(E)$, ce qui donne :

$$\hat{p}(E, s) = \frac{(\beta_g - \beta) e^{-(\beta_g - \beta)E}}{1 + s e^{\beta E}} [\Gamma(\theta) \Gamma(2 - \theta) s^{\theta-2} - e^{\beta E}] \quad (4.7)$$

où $\beta = 1/T$ et $\theta = T/T_g$ est la température réduite, que l'on suppose comprise entre 1 et 2 afin d'observer des effets vitreux. Définissons l'écart en énergie $\varepsilon_T(t) = |E_T(t) - E_T^{eq}|$. Il faut noter que dans la suite, les énergies doivent être entendues comme les vraies énergies physiques, à savoir l'opposé des barrières d'énergie : $\varepsilon_T(t) = -\int_0^\infty dE E p_T(E, t)$. Cette dernière quantité peut se calculer à partir de $\hat{p}(E, s)$, et on obtient :

$$\varepsilon_T(t) = \frac{T}{t^{\theta-1}} [\Gamma(\theta) \ln t - \Gamma'(\theta)]. \quad (4.8)$$

Ainsi, la relaxation de l'énergie au-dessus de T_g est (à une correction logarithmique près) une loi de puissance avec un exposant qui devient petit pour $T \rightarrow T_g$. Le temps t_1 auquel la température doit être remontée de T_1 à T_2 dans la procédure de Kovacs est défini par $E_{T_1}(t_1) = E_{T_2}^{eq}$, ou de manière équivalente $\varepsilon_{T_1}(t_0) = E_{T_2}^{eq} - E_{T_1}^{eq}$. Donc t_1 est déterminé par l'équation :

$$\frac{1}{t_1^{\theta_1-1}} [\Gamma(\theta_1) \ln t_1 - \Gamma'(\theta_1)] \approx \frac{\theta_2 - \theta_1}{(\theta_1 - 1)^2}. \quad (4.9)$$

Afin d'être cohérentes, les équations ci-dessus supposent que $\theta_2 - \theta_1 \ll (\theta_1 - 1)^2 \ll 1$, auquel cas $t_1 \gg \tau_0 (= 1)$.

En utilisant maintenant la distribution $p_{T_2}(E, t_0) = p_{T_1}(E, t_0) + P_{T_1}^{eq}(E) - P_{T_2}^{eq}(E)$ comme condition initiale dans l'équation maîtresse, on peut calculer l'évolution de l'énergie à la température T_2 , au temps $t_1 + t$. Une échelle de temps $\tau^* = t_1^\gamma$ apparaît naturellement (avec $\gamma = \theta_1/\theta_2$). En définissant la variation d'énergie $\Delta E(t) = E(t_1 + t) - E(t_1)$, on trouve dans le régime de temps court $1 \ll t \ll \tau^*$:

$$\Delta E(t) \approx \frac{T_1}{t_1^{\theta_1-1}} \left[\ln t_1 + \frac{1}{\theta_1 - 1} \right] - \left(1 + \frac{1}{t_1^{\theta_1-1}} \right) \frac{T_2}{t^{\theta_2-1/\gamma}} [\ln t + \gamma_E] + \frac{T_2}{t^{\theta_2-1}} [\ln t + \gamma_E] \quad (4.10)$$

où $\gamma_E = -\Gamma'(1)$ est la constante d'Euler. Il est intéressant de constater que ce comportement est très similaire à celui trouvé pour la croissance de domaines. De fait, dans la limite $\theta_2 - \theta_1 \ll (\theta_1 - 1)^2$, les deux exposants des lois de puissance apparaissant dans l'équation précédente, $\theta_2 - 1/\gamma$ et $\theta_2 - 1$, sont très proches l'un de l'autre, et l'expression peut être simplifiée en :

$$\Delta E(t) \approx \frac{T_1}{t_1^{\theta_1-1}} \left(\left[\ln t_1 + \frac{1}{\theta_1 - 1} \right] - \frac{1}{t^{\theta_2-1}} [\ln t + \gamma_E] \right) \quad (4.11)$$

Par conséquent, le maximum de la bosse de Kovacs est donné (dans la limite considérée) par :

$$\Delta E_K \approx \frac{T_1}{t_1^{\theta_1-1}} \ln t_1 \approx \frac{\theta_2 - \theta_1}{(\theta_1 - 1)^2} \quad (4.12)$$

L'approche du maximum est décrite par une loi de puissance du temps avec une correction logarithmique. Ce n'est pas très différent du modèle de croissance de

domaine discuté plus haut. Notons que la hauteur de la bosse est cette fois encore linéaire en $T_2 - T_1$ pour les faibles écarts en température, comme cela était le cas pour la croissance de domaines. De même, $\tau^* = t_1^\gamma$ est une fonction décroissante de $T_2 - T_1$, en accord avec les résultats expérimentaux.

Dans le régime de temps long $t \gg \tau^*$, on retrouve comme attendu le résultat de la trempe isotherme Eq. (4.8) à la température T_2 :

$$\Delta E(t) = \frac{T_2}{t^{\theta_2-1}} [\Gamma(\theta_2) \ln t - \Gamma'(\theta_2)] \quad (4.13)$$

Ce résultat à temps long peut là encore se mettre sous une forme d'échelle :

$$\Delta E(t) = \Delta E_K \mathcal{G} \left(\frac{t}{\tau^*} \right) \quad \tau^* = t_1^\gamma \quad (4.14)$$

mais le régime de temps court Eq. (4.11) ne peut être inclus dans cette fonction d'échelle \mathcal{G} . De manière générale, comme pour la croissance de domaine, on trouve que $\tau_K \ll \tau^*$.

4.3.2 Cas du régime de vieillissement ($T_1, T_2 < T_g$)

Nous considérons maintenant le cas du régime de vieillissement pour lequel les deux températures T_1 et T_2 sont inférieures à T_g . Dans ce cas, le système ne converge jamais vers un état d'équilibre, mais vieillit perpétuellement, de sorte que la situation est différente de celle de l'expérience originale de Kovacs, mais ce cas pourrait aussi être étudié expérimentalement. Puisque l'énergie d'équilibre à T_2 n'existe pas, on peut choisir de changer la température de T_1 (atteinte initialement à $t = 0$) à T_2 après un temps t_w arbitraire, qui joue le rôle du temps t_1 utilisé au paragraphe précédent.

Dans le formalisme continu en énergie, l'équation maîtresse (4.6) n'admet plus de solution stationnaire. On peut néanmoins calculer la distribution dynamique en régime de vieillissement, et le plus commode en vue de ce calcul est d'introduire la transformée de Laplace temporelle $\hat{P}_T(E, s_w)$ de $P_T(E, t_w)$, où t_w est le temps écoulé depuis la trempe initiale. On trouve, dans le régime asymptotique $s_w \rightarrow 0$ (équivalent à $t_w \rightarrow \infty$) :

$$\hat{P}_T(E, s_w) \simeq \hat{\Pi}_T(E, s_w) \equiv \frac{\sin \pi \theta}{\pi} \frac{\beta e^{\beta E}}{(1 + s_w e^{\beta E})(s_w e^{\beta E})^\theta} \quad (4.15)$$

où $\theta \equiv T/T_g$. Etant donné que $s_w \hat{\Pi}_T(E, s_w)$ est une fonction du produit $s_w e^{\beta E}$, $\Pi_T(E, t_w)$ ne dépend que de la variable d'échelle $\xi = e^{\beta E}/t_w$. Ayant calculé cette distribution, on peut dès lors se tourner vers le calcul de la variation d'énergie après un saut en température.

Le calcul détaillé de la variation d'énergie $\Delta E(t_w, t)$ entre le temps t_w (où la température est changée de T_1 à T_2) et $t_w + t$ est reporté en annexe. Nous résumons ici les principales étapes du calcul, en soulignant les interprétations physiques et

les conclusions. D'un point de vue technique, l'outil mathématique adapté pour calculer $\Delta E(t_w, t)$ est la fonction de Green $G_T(E, E_0, t)$ définie comme la probabilité d'avoir l'énergie E au temps $t_w + t$ sachant que l'énergie était E_0 au temps t_w . Cette fonction de Green est calculée, comme pour $P_T(E, t_w)$, en utilisant une transformée de Laplace temporelle. En introduisant la variable de Laplace s conjuguée à t , on trouve pour $s\tau_0 \ll 1$ ($t \gg \tau_0$) l'expression asymptotique suivante :

$$\hat{G}_T(E, E_0, s) = \frac{e^{\beta E_0}}{1 + s e^{\beta E_0}} \delta(E - E_0) + \frac{1}{1 + s e^{\beta E_0}} \hat{\Pi}_T(E, s) \quad (4.16)$$

Grâce aux propriétés markoviennes de la dynamique, la fonction de Green ne dépend pas de t_w , mais seulement de la différence de temps t . On peut ainsi exprimer l'énergie moyenne $\bar{E}(t_w + t)$ au temps $t_w + t$ à l'aide de la fonction de Green :

$$\bar{E}(t_w + t) = - \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE_0 E G_{T_1}(E, E_0, t) P_{T_2}(E_0, t_w) \quad (4.17)$$

où le signe moins rend compte du fait que la variable E (la barrière d'énergie) est en réalité l'opposée de l'énergie. La variation d'énergie $\Delta E(t_w, t)$ est alors :

$$\Delta E(t_w, t) \equiv \bar{E}(t_w + t) - \bar{E}(t_w) \quad (4.18)$$

$$= - \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE_0 (E - E_0) G_{T_1}(E, E_0, t) P_{T_2}(E_0, t_w) \quad (4.19)$$

Après quelques calculs, on peut montrer que $\Delta E(t_w, t)$ présente une loi d'échelle semblable à ce que l'on trouve dans le cas d'un régime de sous-vieillessement (voir aussi la Réf. [142]) :

$$\Delta E(t_w, t) = \psi \left(\frac{t}{t_w^\gamma} \right) \quad (4.20)$$

où $\gamma = T_1/T_2 < 1$. On voit ainsi que l'énergie évolue sur une échelle de temps typique donnée par $\tau_K = \tau^* = t_w^\gamma$, ce qui était d'ailleurs attendu à partir d'arguments simples d'activation thermique. Notons cependant qu'il ne s'agit pas ici de sous-vieillessement au sens strict, puisque la température est changée à l'instant t_w , alors qu'aucune modification ne devrait être apportée aux paramètres de contrôle du système pour pouvoir parler de sous-vieillessement. Il est également possible d'étudier le comportement asymptotique, à temps court et à temps long, de cette fonction d'échelle. En ce qui concerne le comportement à temps court, il s'avère nécessaire de distinguer parmi les deux cas suivants :

- Si $\gamma > 1 - \theta_1$ (petits écarts de température), alors $\Delta E(t_w, t)$ présente une singularité à temps court :

$$\Delta E(t_w, t) \simeq K_{>} \left(\frac{t}{t_w^\gamma} \right)^{(1-\theta_1)/\gamma} \quad t \ll t_w^\gamma \quad (4.21)$$

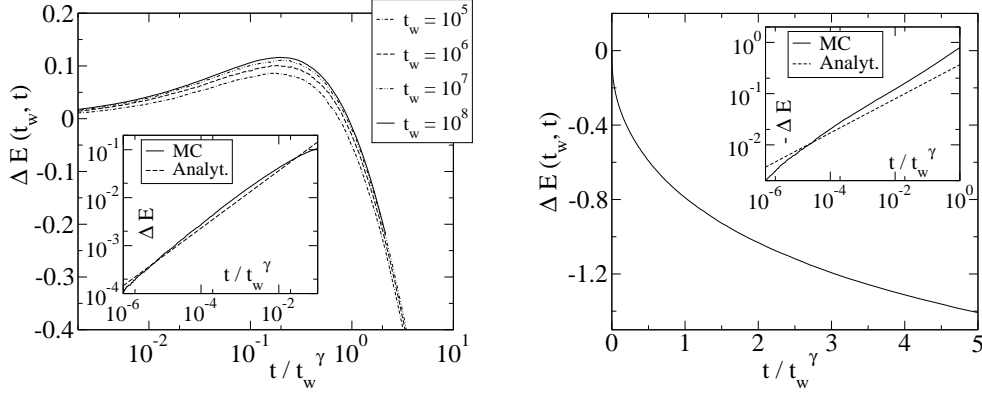


FIG. 4.3 – *A gauche* : variation d'énergie $\Delta E(t_w, t)$ dans le modèle de pièges en fonction de t/t_w^γ pour $t_w = 10^5, 10^6, 10^7$ et 10^8 , $\theta_1 = 0.5$ et $\theta_2 = 0.6$ (données Monte-Carlo). *Encart* : comparaison entre simulations ($t_w = 10^8$, trait plein) et prédiction analytique dans le régime de temps court $t \ll t_w$, pour les mêmes températures. *A droite* : $\Delta E(t_w, t)$ pour $t_w = 10^6$ (Monte-Carlo), dans le cas d'un saut négatif en température : $\theta_1 = 0.6$ et $\theta_2 = 0.5$. *Encart* : singularité à temps court, numérique (trait plein) et analytique (tirets).

- Si au contraire $\gamma < 1 - \theta_1$, on trouve une dépendance linéaire en t dans le régime de temps court, avec cependant des corrections logarithmiques :

$$\Delta E(t_w, t) \simeq K_< \left(\ln \frac{t_w^\gamma}{t} + C \right) \frac{t}{t_w^\gamma} \quad t \ll t_w^\gamma \quad (4.22)$$

Les expressions des coefficients $K_>$, $K_<$ et C – Eqs. (4.21, 4.22) – sont données en annexe dans les Eqs. (D.37, D.43, D.44). Ces coefficients sont tous positifs pour $\theta_1 < \theta_2$, ce qui entraîne que $\Delta E(t_w, t)$ est positif à temps court, autrement dit que l'effet Kovacs a bien le signe attendu.

Notons également que le coefficient $K_>$ s'annule (linéairement) lorsque $\theta_1 \rightarrow \theta_2$. Le calcul est donc bien cohérent : en l'absence de saut de température, la variation d'énergie doit être régulière, c'est-à-dire linéaire en t , et la singularité doit donc disparaître. De plus, si $\theta_1 > \theta_2$ (ce qui correspond à un saut négatif en température), le calcul présenté ci-dessus reste valable, avec cette fois un coefficient $K_>$ négatif et un exposant non trivial $(1 - \theta_1)/\gamma$. La bosse de Kovacs devient alors un "creux de Kovacs". Les données Monte-Carlo sont présentées sur la Fig. 4.3, et montrent un bon accord avec les prédictions analytiques. Il faut remarquer que la loi d'échelle Eq. (4.20) est seulement une approximation pour des temps t_w finis. Une meilleure remise à l'échelle peut être obtenue dans le cas $\theta_1 < \theta_2$ en traçant $\Delta E(t, t_w)/\Delta E_K$ en fonction de t/τ_K , où ΔE_K est la valeur maximale de $\Delta E(t_w, t)$, atteinte pour $t = \tau_K \simeq t_w^\gamma$. L'Eq. (4.20) signifie que ΔE_K devient asymptotiquement indépendant de t_w .

Enfin, le comportement à temps long est plus simple à analyser : on peut montrer que $P_T(E, t_w + t)$ se comporte pour $t \gg t_w$ de la même manière quelle que soit la condition initiale $P_T(E, t_w)$, autrement dit comme si le système avait été trempé directement depuis une haute température – voir Fig. 4.4 (gauche). Cela signifie que dans cette limite $\overline{E}(t_w + t)$ ne dépend plus de t_w , mais seulement de t :

$$\overline{E}(t_w + t) \simeq \overline{E}_{late}(t) \equiv T_2 [\Gamma'(1) - \pi \cot \pi \theta_2] - T_2 \ln t \quad t \gg t_w^\gamma \quad (4.23)$$

où $\overline{E}_{late}(t)$ est l'énergie moyenne au temps t (supposé grand devant τ_0), après une trempe directe depuis une haute température. Ainsi, $\Delta E(t_w, t)$ est simplement donné par :

$$\Delta E(t_w, t) = \overline{E}_{late}(t) - \overline{E}(t_w) \quad t \gg t_w^\gamma \quad (4.24)$$

ce qui redonne bien une loi d'échelle en t/t_w^γ , compte-tenu de la dépendance en $T \ln t$ de l'énergie moyenne.

4.3.3 Cas “mixte” $T_1 < T_g < T_2$

Pour terminer, et dans le but de donner un panorama complet des propriétés du modèle de pièges en ce qui concerne l'effet Kovacs, nous mentionnons les résultats obtenus dans le cas où la température de transition vitreuse T_g est comprise entre T_1 et T_2 . Ce cas est également intéressant, car le système peut finalement s'équilibrer à la température T_2 , avec des temps de relaxation longs (on suppose que T_2 est très proche de T_g), tout en ayant une large plage de température possible pour T_1 . On retrouve les mêmes singularités à temps court que dans le cas du régime de vieillissement étudié plus haut :

$$\Delta E(t_1, t) \sim \left(\frac{t}{t_1^\gamma} \right)^{(1-\theta_1)/\gamma} \quad 1 - \theta_1 < \gamma \quad (4.25)$$

$$\Delta E(t_1, t) \sim \frac{t}{t_1^\gamma} \quad 1 - \theta_1 > \gamma \quad (4.26)$$

avec cependant des préfacteurs et des corrections logarithmiques différentes de celles qui apparaissent lorsque T_1 et T_2 sont inférieures à T_g . Dans le régime de temps long, on retrouve naturellement une convergence de $\Delta E(t, t_1)$ proportionnelle à $t^{-(\theta_2-1)}$, comme dans le cas $T_g < T_1 < T_2$. On constate donc, comme on pouvait s'y attendre, que de manière générale le comportement à temps court est dominé par la manière dont le système a été préparé avant le changement de température, alors que le comportement à temps long ne dépend que de la température finale T_2 .

4.3.4 Discussion : propagation d'un front dans la distribution des énergies

Afin de mieux comprendre les phénomènes en jeu, il s'avère intéressant de discuter comment la distribution des énergies $P(E, t)$ évolue lorsque la température

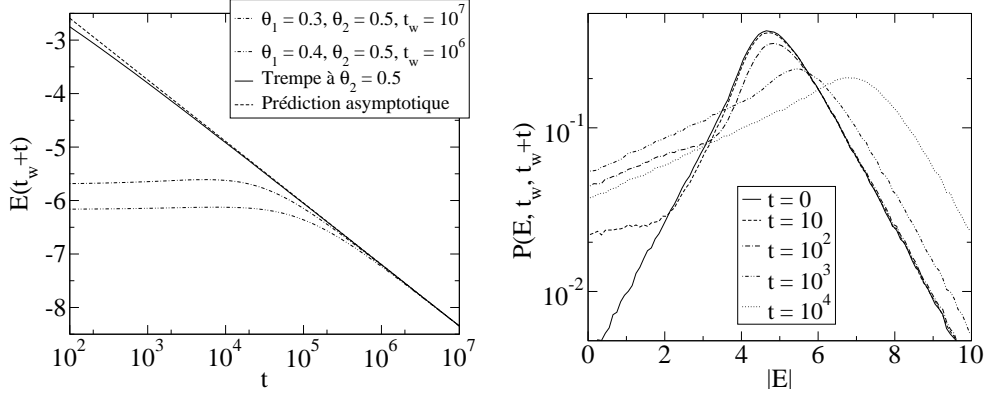


FIG. 4.4 – *A gauche : comparaison du comportement à temps long de $E(t_w + t) = \Delta E(t_w, t) + E(t_w)$ dans le modèle de pièges, avec une trempe directe depuis une température infinie (Monte-Carlo). La prédiction analytique est également présentée (tirets). A droite : distribution dynamique des énergies $P(E, t_w, t_w + t)$ au temps $t_w + t$ après un saut (positif) en température à t_w , avec $t_w = 10^4$, $\theta_1 = 0.5$ et $\theta_2 = 0.8$ (modèle de pièges). On voit clairement le propagation d'un front à faible énergie, associé à la rééquilibration progressive des petites échelles de temps, avant la reprise de la dérive globale de la distribution pour $t \sim t_w$.*

est augmentée de T_1 à $T_2 > T_1$. La Fig. 4.4 (droite) illustre cette évolution : à la température T_1 , la probabilité d'être dans un piège peu profond ($|E| \ll T \ln t_w$) est assez faible. Quand on augmente brusquement la température, le système se rééquilibre plus rapidement dans les régions d'énergies élevées (faibles barrières), puisqu'elles possèdent un temps de relaxation relativement court, ce qui entraîne un repeuplement de ces pièges, d'où une remontée de l'énergie, qui correspond à l'effet Kovacs. A mesure que le temps s'écoule, l'équilibration progresse en une sorte de "front" dans l'espace des énergies, comme le montre la Fig. 4.4. Puis pour des temps t d'ordre t_w , le pic de la distribution reprend sa lente dérive vers les basses énergies (grandes valeurs de $|E|$).

Il est intéressant de constater que cette image physique est en fait très proche de celle qui émerge du modèle de croissance de domaines dans lequel les petites échelles de longueur se rééquilibrent rapidement et conduisent à une augmentation de l'énergie moyenne, avant que les grandes échelles ne reprennent leur croissance. A ce propos, on peut d'ailleurs penser que l'interprétation quantitative de l'effet Kovacs pourrait fournir un outil extrêmement intéressant pour étudier expérimentalement le problème de la croissance des échelles de longueur ou de la statistique des temps de piégeage dans les systèmes vitreux, un thème qui soulève un grand intérêt actuellement [72, 73, 160, 70, 67, 19, 155]. Cependant, comme cela a été discuté récemment [25], les différences physiques entre les deux images (pièges ou domaines) ne sont pas aussi évidentes qu'elles peuvent

paraître. En particulier, la description en termes de modèle de pièges suppose implicitement l'existence d'une longueur de cohérence [37], alors que les modèles de croissance de domaine peuvent générer naturellement des distributions non triviales de temps de relaxation [25]. Tout au long de cette partie, nous avons vu de surcroît que les prédictions quantitatives des deux images étaient en fait très similaires. Cela dit, alors que l'on s'attend à une dépendance en température de l'exposant ν (tel que celui trouvé dans les simulations Lennard-Jones) dans une image de type pièges, cette dépendance est nettement moins naturelle dans le cadre d'une croissance de domaines en loi de puissance du temps. Remarquons toutefois que des lois de croissance plus complexes (logarithmiques par exemple) peuvent dans certains cas imiter des lois de puissance avec un exposant dépendant de la température [43, 24].

4.4 Bilan sur l'effet Kovacs

Bien que l'effet Kovacs soit connu depuis plus de quarante ans, son interprétation quantitative n'a été développée pour l'essentiel que très récemment. Sachant que cet effet semble être générique et observé dans une grande variété de systèmes vitreux différents (expérimentaux ou modèles), il apparaît important d'établir quel type d'information microscopique on peut extraire de l'analyse quantitative de la "bosse de Kovacs". Qualitativement, il est clair que l'effet Kovacs traduit l'hétérogénéité du système : fixer la valeur moyenne macroscopique d'une observable telle que le volume ou l'énergie n'empêche pas l'existence de fluctuations locales qui peuvent être importantes, et qui gardent une trace de l'histoire du système. Une description plus complète requiert donc de considérer, au lieu de simples moyennes, des distributions de probabilité qui seraient de manière naturelle les distributions de volume spécifique ou de densité d'énergie à l'intérieur du matériau. Dans les deux modèles étudiés analytiquement dans ce chapitre, on peut transposer la distribution de densité d'énergie en d'autres distributions qui permettent d'interpréter plus aisément la dynamique, à savoir la distribution des tailles de domaines (pour la croissance de domaines) ou la distribution des temps de piégeage (pour le modèle de pièges). Ces deux modèles conduisent à des prédictions quantitatives et précises concernant la forme de la bosse de Kovacs, qui sont rassemblées dans la Table 4.1, et que l'on peut également résumer par une équation phénoménologique, inspirée de la forme trouvée à la fois dans la croissance de domaines et dans le modèle de pièges (pour le cas $T_1, T_2 > T_g$) – voir les Eqs. (4.3, 4.11, 4.13) :

$$\Delta E = \Delta E_K \left[\frac{\tau^{*\nu}}{(t + \tau^*)^\nu} - \frac{\varphi}{t^\nu} \right] \quad (4.27)$$

Dans les modèles de croissance de domaines, l'exposant ν est égal à $(d - \Theta)/z$, où z est l'exposant dynamique reliant les échelles de longueur et de temps : $\ell \sim t^{1/z}$. Le premier terme correspond à la contribution à temps long des domaines qui

existaient déjà à l'instant t_1 , et le second terme correspond à l'excès d'énergie créée par la nucléation de nouveaux domaines après le saut en température. Une interprétation similaire des deux termes peut être donnée dans le modèle de pièges, avec $\nu = T/T_g - 1$ (pour une distribution exponentielle de barrières). Notons aussi que d'après l'Eq. (4.27), les données devraient se remettre à l'échelle comme $\Delta E_K \mathcal{G}(\frac{t}{\tau^*})$ lorsque τ^* devient grand. La position du maximum τ_K extraite de l'Eq. (4.27) devient, dans la limite $\tau^* \gg 1$:

$$\tau_K \approx (\varphi \tau^*)^{\frac{1}{\nu+1}} \ll \tau^* \quad (4.28)$$

de sorte que la variable d'échelle correcte n'est en général pas t/τ_K , sauf dans la limite $\nu \rightarrow 0$, lorsque τ_K et τ^* coïncident.

Nous espérons que ces résultats motiveront de nouvelles études expérimentales de cet effet. Il serait en particulier intéressant de tester l'Eq. (4.27), qui condense de manière phénoménologique les prédictions de la croissance de domaines et du modèle de pièges (pour $T > T_g$), et qui décrit de manière satisfaisante les résultats numériques obtenus dans le modèle Lennard-Jones pour des températures supérieures à la température de transition vitreuse.

Par ailleurs, on pourrait également extraire d'une analyse détaillée de l'effet Kovacs une détermination quantitative de la distribution des temps de relaxation dans des systèmes vitreux, et sa dépendance en température. Cette distribution pourrait être comparée à d'autres déterminations dynamiques plus directes. Une autre situation qui mériterait aussi d'être étudiée expérimentalement serait l'effet Kovacs en régime de vieillissement, où les deux températures sont maintenues en-dessous de la température de transition vitreuse T_g . Dans ce cas, l'instant auquel le saut de température est effectué n'est plus fixé par le protocole, et devient au contraire un paramètre supplémentaire qui permet de tester des lois d'échelle.

Enfin, d'un point de vue théorique, il serait intéressant d'étudier les prédictions des théories dynamiques de champ moyen des verres de spins (modèles p-spins par exemple) concernant la forme de la bosse de Kovacs. Il est bien connu (cf. Réf. [40]) que les équations dynamiques décrivant ces modèles sont (quasiment) identiques aux équations schématisées de la théorie de couplage de modes. Bien que l'on s'attende à ce que les résultats de ce modèle soient là encore assez similaires à ceux obtenus dans la présente étude, il pourrait être intéressant de vérifier cette proposition plus en détail.

	Domaines ($\ell_{eq} = \infty$)	Pièges $T_1 > T_g$	Pièges $T_1 < T_g$
t_1	$\ell(t_1, T_1)^{\Theta-d} \propto T_2 - T_1$	$t_1^{1-\theta_1} \ln t_1 \propto T_2 - T_1$	t_w
ΔE_K	$\propto T_2 - T_1$	$\propto T_2 - T_1$	$\propto T_2 - T_1$
τ^*	$\ell(\tau^*, T_2) = \ell(t_1, T_1)$	$\tau^* = t_1^{T_1/T_2}$	$\tau^* = t_w^{T_1/T_2}$
τ_K	$\tau_K \sim (\tau^*)^{\frac{1}{\nu+1}} \ll \tau^*$	$\tau_K \sim (\tau^*)^{\frac{1}{\nu+1}} \ll \tau^*$	$\tau_K \sim \tau^*$
$\Delta E_{(t \ll \tau_K)}$	$\Delta E_K (1 - \ell^{\Theta-d})$	$\Delta E_K (1 - t^{-\nu} \ln t)$	$\Delta E_K (t/\tau^*)^{(1-\theta_1)/\gamma}$
$\Delta E_{(t \gg \tau_K)}$	$\Delta E_K (\ell_1/\ell)^{d-\Theta}$	$\Delta E_K (\tau^*/t)^\nu$	$-T_2 \ln(t/t_w^\gamma)$
ν	$(d - \Theta)/z$	$\theta_2 - 1$	

TAB. 4.1 – Résumé des différents résultats et régimes pour l'effet Kovacs, dans la limite $T_1 \rightarrow T_2^-$. Notations : t_1 (ou t_w) est le temps passé à la température T_1 , Θ et z sont respectivement l'exposant de l'énergie et l'exposant dynamique de la croissance de domaines, γ est le rapport $\gamma = T_1/T_2$ et $\theta_{1,2}$ sont les températures réduites $\theta_{1,2} = T_{1,2}/T_g$.

Conclusion générale

Tout au long de ce travail de thèse, nous avons développé différentes approches de la transition vitreuse et des phénomènes de vieillissement. La première approche consiste à considérer l'évolution du système dans son espace des phases, censé être composé d'un grand nombre de minima, en faisant des hypothèses très simplificatrices sur la structure de cet espace des phases. L'hypothèse la plus simple, qui sous-tend le modèle de pièges usuel, est de supposer que tous les minima sont connectés, et que le système peut transiter directement de l'un à l'autre en franchissant simplement la barrière d'énergie qui les sépare. Nous avons étendu cette étude à différents cas, d'une part le modèle Barrat-Mézard qui correspond au choix de taux de transition de Glauber entre les états (qui ne sont plus dans ce cas des minima, mais plutôt des points-selles), autrement dit à une dynamique entropique où le vieillissement est lié au fait que de moins en moins d'états de plus basse énergie sont accessibles lorsque l'on se trouve déjà dans un état profond. En particulier, cette dynamique diffère de la dynamique activée du modèle de pièges dans le sens où l'évolution reste possible à température nulle. Nous avons également considéré des systèmes où les deux types de dynamiques (entropique et activée) existent, et nous avons mis en évidence dans ces modèles la présence d'une transition entre deux régimes temporels dans la fonction de corrélation, l'un dominé par la dynamique entropique, et l'autre à temps plus long gouverné par l'activation thermique. Ceci se voit très clairement dans la dépendance en température des courbes, la dynamique activée étant très sensible aux variations de température, contrairement à la dynamique entropique.

En revenant au modèle de pièges, nous avons montré que la fonction de corrélation au point critique présentait des propriétés d'ultramétrie dynamique, une notion qui a été introduite dans l'étude de la dynamique du modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK). Ce résultat est en particulier intéressant car il fournit un exemple explicite dans lequel on peut calculer la fonction de corrélation et montrer qu'elle satisfait cette propriété, ce qui n'est pas le cas dans le modèle SK. En outre, on peut calculer également les corrections de temps fini à cette propriété, et montrer qu'elle décroissent très lentement, en $1/\ln t$, un résultat dont on peut espérer qu'il présente un caractère générique. Pour terminer avec cette description en termes d'espace des phases, nous avons étudié la question de la température effective dans les systèmes hors d'équilibre, une notion qui est principalement basée sur les résultats obtenus dans les théories de champ moyen

à propos des relations de fluctuation dissipation. Nous avons illustré cette notion à l'aide d'un modèle très simple à deux états avec un forçage externe, et montré que dans ce cas apparaissent deux températures effectives, l'une décrivant les propriétés de fluctuation dissipation du système, et l'autre les propriétés liées à l'énergie, comme la chaleur spécifique. Nous avons de plus proposé quelques conjectures sur les raisons pour lesquelles les modèles de type "pièges" ne conduisaient pas à des relations de fluctuation dissipation linéaires, et sur une autre manière d'aborder la notion de température effective, basée sur la production d'entropie.

En poursuivant cette démarche, nous nous sommes intéressés au cas où l'espace des phases a une structure bien spécifique en "rigole", de sorte que les minima forment essentiellement un réseau unidimensionnel. Ceci nous a conduit à introduire une généralisation unidimensionnelle du modèle de pièges qui peut également décrire, en-dehors de la dynamique d'espace des phases que nous venons de mentionner, des problèmes de diffusion de particules dans l'espace réel en milieu désordonné, et même (de manière simplifiée) la dynamique des bulles de dénaturation de l'ADN [96]. Nous avons trouvé dans ce modèle de nombreuses propriétés intéressantes, comme la présence de sous-diffusion associée à un front de diffusion non gaussien, des propriétés non triviales de localisation dynamique qui ne peuvent être décrites par des considérations d'équilibre partiel, ainsi que la présence simultanée de vieillissement et de sous-vieillissement suivant les grandeurs considérées. Nous avons aussi étudié les fonctions de réponse à un biais h , tant dans le régime linéaire (par rapport au biais) que dans le régime non linéaire. On constate d'ailleurs que la frontière entre ces deux régimes dépend du temps d'attente t_w au bout duquel le biais est appliqué, et que plus t_w augmente, plus le régime linéaire en h est restreint. Nous avons de plus montré la validité d'une relation de fluctuation dissipation dans le régime linéaire en h , qui inclut néanmoins un régime non-linéaire par rapport au temps.

Nous avons ensuite tenté de comprendre comment on pouvait passer d'une description en termes d'espace des phases de la dynamique vitreuse, à une description dans l'espace réel. La question est en particulier de savoir à quelles structures spatiales correspondent les très nombreux minima de l'espace des phases dont on sait qu'ils jouent un rôle prépondérant dans le ralentissement de la dynamique. En outre, une fois ces structures identifiées, on peut se demander quelle est leur taille caractéristique, et si cette échelle de longueur croît en abaissant la température. Nous avons pour cela étudié un modèle désordonné unidimensionnel, dans lequel les structures inhérentes peuvent être déterminées sans difficulté, et montré que ces structures inhérentes peuvent être ensuite décomposées en différentes régions sur lesquelles l'énergie est minimisée localement. La taille moyenne de ces régions fournit alors une échelle de longueur caractéristique de la dynamique. En comparant avec la longueur obtenue grâce à une fonction de corrélation à deux répliques, nous avons pu montrer que ce modèle était décrit par deux échelles de longueur indépendantes au lieu d'une seule comme dans les problèmes usuels de croissance de domaines, un scénario dont on peut espérer qu'il présente un certain degré de

généralité.

Nous avons par ailleurs considéré un deuxième type de modèle dont l'évolution n'est pas régie par un hamiltonien, mais par des règles dynamiques de redistribution des densités entre sites voisins. Ce modèle, dont nous n'avons pas pu achever l'étude pour l'instant, semble avoir un comportement très riche. Nous avons pu montrer notamment par un calcul direct de la distribution de probabilité à N corps que les résultats obtenus par une approximation de champ moyen étaient en fait exacts, et que cette distribution de probabilité n'était en général pas uniforme sur l'hypersurface de l'espace des phases compatible avec les contraintes, contrairement à l'hypothèse la plus simple que l'on pourrait formuler. En outre, la présence d'hétérogénéités dynamiques se manifeste par l'existence d'une échelle de longueur qui croît à mesure que l'on augmente la densité moyenne.

Pour terminer, nous avons appliqué ces différentes approches à l'effet Kovacs, un effet mémoire observé expérimentalement dans les systèmes vitreux depuis plusieurs décennies, mais dont les premières études précises dans des modèles vitreux sont bien plus récentes. Nous avons comparé les prédictions, concernant cet effet, des modèles de croissance de domaines et du modèle de pièges, qui conduisent en fin de compte à des résultats assez semblables.

Ajoutons pour conclure que cette thèse aura été pour nous l'occasion de développer des collaborations avec d'autres chercheurs du laboratoire sur des thèmes divers, qui ne sont pas nécessairement reliés au sujet de la thèse. Ces collaborations se sont révélées fructueuses, puisque nous avons publié un article en collaboration avec P. Bonville et J. Hodges sur des questions de températures effectives détectées par effet Mössbauer [35] (nous avons discuté au premier chapitre le modèle alors proposé), et un deuxième article en collaboration avec S. Deboeuf, E. Lajeunesse et O. Dauchot [66], traitant du problème de la relaxation d'un empilement granulaire, a été soumis récemment. Nous avons d'ailleurs proposé dans ce dernier article, en nous appuyant sur un modèle et sur des données expérimentales, un scénario pour la relaxation des systèmes vitreux dissipatifs comme les empilements granulaires. En nous inspirant des travaux de Cugliandolo et Kurchan [62] selon lesquels les fonctions de corrélation $C(t, t')$ sont décrites génériquement par une reparamétrisation du temps $h(t)$ telle que $C(t, t') = F[h(t)/h(t')]$, nous avons suggéré que ce scénario pourrait rester valable dans les matériaux granulaires, avec une reparamétrisation $h(t)$ qui sature pour $t \rightarrow \infty$ au lieu de tendre elle-même vers l'infini, cette saturation traduisant l'arrêt complet de la dynamique.

Annexe A

Fonction de corrélation au point critique

A.1 Corrélation dans le modèle de pièges à $T = T_g$

Nous reportons dans cette annexe le calcul détaillé de la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ du modèle de pièges (et du modèle Barrat-Mézard, voir plus loin) pour $T = T_g$. Commençons par définir la transformée de Laplace de $C(t_w, t_w + t)$ par rapport à t_w :

$$\hat{C}(t, E) = \int_0^\infty dt_w e^{-Et_w} C(t_w, t_w + t) \quad (\text{A.1})$$

Il a été montré dans la Réf. [41] (en utilisant une définition légèrement différente de la transformée de Laplace) que :

$$\hat{C}(t, E) = \frac{1}{E} \frac{\langle \frac{\tau}{E\tau+1} e^{-t/\tau} \rangle}{\langle \frac{\tau}{E\tau+1} \rangle} \quad (\text{A.2})$$

où $\langle \dots \rangle$ désigne la moyenne sur la distribution *a priori* des temps de piégeage $\psi(\tau)$. En prenant τ_0 comme unité de temps, on obtient pour le dénominateur :

$$\langle \frac{\tau}{E\tau+1} \rangle = \int_1^\infty \frac{d\tau}{\tau^2} \frac{\tau}{E\tau+1} = \int_E^\infty \frac{du}{u(1+u)} = \log(1 + \frac{1}{E}) \quad (\text{A.3})$$

En définissant $\hat{f}(E)$ comme :

$$\hat{f}(E) \equiv \frac{1}{E \log(1 + \frac{1}{E})} \quad (\text{A.4})$$

on peut écrire $\hat{C}(t, E)$ de la manière suivante :

$$\hat{C}(t, E) = \hat{f}(E) \int_1^\infty \frac{d\tau}{\tau^2} \frac{\tau}{E\tau+1} e^{-t/\tau} \quad (\text{A.5})$$

On utilisant la relation :

$$\frac{\tau}{E\tau + 1} = \int_0^\infty dt_w e^{-Et_w} e^{-t_w/\tau} \quad (\text{A.6})$$

on trouve :

$$\hat{C}(t, E) = \hat{f}(E) \int_0^\infty dt_w e^{-Et_w} \int_1^\infty \frac{d\tau}{\tau^2} e^{-(t_w+t)/\tau} \quad (\text{A.7})$$

$$= \hat{f}(E) \int_0^\infty dt_w e^{-Et_w} \frac{1 - e^{-(t_w+t)}}{t_w + t} \quad (\text{A.8})$$

Le calcul de la transformée de Laplace inverse donne un produit de convolution :

$$C(t_w, t_w + t) = \int_0^{t_w} du f(u) \frac{1 - e^{-(t+t_w-u)}}{t + t_w - u} \quad (\text{A.9})$$

où $f(u)$ est la transformée de Laplace inverse de $\hat{f}(E)$. Le comportement asymptotique à grand u de $f(u)$ se calcule directement grâce à un théorème taubérien [78] :

$$f(u) = \frac{1}{\log u} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(\log u)^2}\right) \quad u \rightarrow \infty \quad (\text{A.10})$$

En supposant maintenant $t \gg 1$, on peut négliger le terme exponentiel dans l'Eq. (A.9), ce qui donne :

$$C(t_w, t_w + t) \simeq \int_0^{t_w} du \frac{f(u)}{t + t_w - u} \quad (\text{A.11})$$

Nous souhaitons calculer $C(t_w, t_w + t)$ pour de très grandes valeurs de t_w , au premier ordre en $1/\ln t_w$. Comme nous ne connaissons que le comportement à temps long de $f(u)$, il est plus simple de séparer l'intégrale précédente en deux termes C_1 et C_2 , en introduisant une borne A telle que $1 \ll A \ll t_w$. Le premier terme s'écrit :

$$C_1 = \int_0^A du \frac{f(u)}{t + t_w - u} \leq \frac{1}{t + t_w - A} \int_0^A f(u) du \quad (\text{A.12})$$

de sorte que ce terme devrait être d'ordre A/t_w avec des corrections logarithmiques, comme on peut le déduire du comportement à E petit de $f(E)$. En effectuant maintenant le changement de variable $u = t_w e^{-v \log t_w}$ dans le second terme C_2 , et en gardant seulement le premier terme du développement de $f(u)$, on obtient :

$$C_2 = \int_0^{1 - \frac{\log A}{\log t_w}} dv \frac{e^{-v \log t_w}}{1 + \frac{t}{t_w} - e^{-v \log t_w}} \frac{1}{1 - v} \quad (\text{A.13})$$

Pour les grandes valeurs de $\ln t_w$, cette intégrale est dominée par le voisinage de $v = 0$, de sorte qu'un développement à petit v du dernier facteur $1/(1-v)$ peut être effectué :

$$C_2 = \int_0^{1 - \frac{\log A}{\log t_w}} dv \frac{e^{-v \log t_w}}{1 + \frac{t}{t_w} - e^{-v \log t_w}} (1 + v + \mathcal{O}(v^2)) \quad (\text{A.14})$$

Le remplacement de la borne supérieure par ∞ conduit à des corrections d'ordre $1/t_w$ qui peuvent donc être négligées. Le terme d'ordre n dans le développement en v donne une contribution d'ordre $(1/\ln t_w)^{n+1}$, comme on le constate en utilisant le changement de variable $z = u \ln t_w$. On peut donc se contenter de garder le premier terme, ce qui donne :

$$\int_0^\infty dv \frac{e^{-v \log t_w}}{1 + \frac{t}{t_w} - e^{-v \log t_w}} = \frac{1}{\log t_w} \int_0^1 \frac{dx}{1 + \frac{t}{t_w} - x} = \frac{1}{\log t_w} \log\left(1 + \frac{t_w}{t}\right) \quad (\text{A.15})$$

De plus, le deuxième terme dans le développement à grand u de $f(u)$ conduit aussi à une correction en $(\ln t_w)^{-2}$. En conclusion, il a été montré que la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ est donnée dans la limite des grands t_w et t par :

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{\log\left(1 + \frac{t_w}{t}\right)}{\log t_w} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(\log t_w)^2}\right), \quad (\text{A.16})$$

où le préfacteur du terme sous-dominant pourrait être calculé exactement si nécessaire.

A.2 Corrélation dans le modèle Barrat-Mézard à $T = T_g$

Nous proposons ici de calculer la fonction de corrélation au point critique dans le modèle Barrat-Mézard par une approche différente de celle utilisée dans le modèle de pièges, car basée cette fois sur l'équation maîtresse dans le formalisme continu. Comme nous l'avons fait pour l'étude de la phase basse température ($\mu < 1$) du modèle BM, on peut chercher une variable d'échelle qui relie le temps et l'énergie de façon à transformer asymptotiquement l'équation maîtresse à deux variables à une équation à une seule variable. En partant ici encore du rapport $t/\tau(E)$, on peut en simplifier l'expression de façon à obtenir la variable d'échelle $u^{-1} = e^E t \ln t$. La fonction d'échelle $\varphi(u)$ doit être liée à u de la manière suivante :

$$P(E, t) \simeq \frac{1}{\ln t} u \varphi(u) \quad (\text{A.17})$$

La condition de normalisation $\int_{-\infty}^0 dE P(E, t) = 1$ se traduit par :

$$\frac{1}{\ln t} \int_{(t \ln t)^{-1}}^\infty du \varphi(u) \rightarrow 1 \quad t \rightarrow \infty \quad (\text{A.18})$$

ce qui impose que $\varphi(u) \simeq u^{-1}$ pour $u \rightarrow 0$. L'équation maîtresse devient alors dans la limite des grands temps :

$$u^2 \varphi'(u) + (u - 1) \varphi(u) = -\frac{1}{u} \quad (\text{A.19})$$

La condition suivant laquelle $\varphi(u)$ doit être normalisable au sens de l'Eq. (A.18) sélectionne une unique solution :

$$\varphi(u) = \frac{1}{u} (1 - e^{-1/u}) \quad (\text{A.20})$$

de sorte que $P(E, t)$ est donné par :

$$P(E, t) = \frac{1}{\ln t} [1 - \exp(-e^E t \ln t)] \quad (\text{A.21})$$

A partir de cette expression, on peut calculer la fonction de corrélation $C(t_w, t_w + t)$ à la température de transition vitreuse T_g :

$$C(t_w, t_w + t) = \int_{-\infty}^0 dE P(E, t_w) e^{-t/\tau(E)} \quad (\text{A.22})$$

où $\tau(E)$ est donné par :

$$\frac{1}{\tau(E)} \equiv \int_{-\infty}^0 \frac{e^{E'} dE'}{1 + e^{E'-E}} = e^E \ln(1 + e^{-E}) \quad (\text{A.23})$$

qui se réduit à $|E| e^E$ pour les grandes valeurs de $|E|$ ($E < 0$). Ainsi la fonction de corrélation s'écrit, pour $\ln t_w \gg 1$ et $t \gg 1$:

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{1}{\ln t_w} \int_{-\infty}^0 dE \exp(E t e^E) [1 - \exp(-e^E t_w \ln t_w)] \quad (\text{A.24})$$

De cette expression, on peut déduire que la fonction de corrélation se ramène asymptotiquement à la même forme que dans le modèle de pièges :

$$C(t_w, t_w + t) = \frac{\log(1 + \frac{t_w}{t})}{\log t_w} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(\log t_w)^2}\right), \quad (\text{A.25})$$

Notons que cette approche s'applique également au modèle de pièges, à condition de prendre comme variable d'échelle pour la distribution dynamique des énergies $v = (t e^E)^{-1}$, et l'équation différentielle satisfaite par la fonction d'échelle $\varphi_{\text{TM}}(v)$ est la même que pour $\varphi(u)$.

Annexe B

Modèle de pièges unidimensionnel

B.1 Le front de diffusion moyen

B.1.1 Formulation du problème

Nous reportons dans cet appendice le calcul explicite de $\langle p(x, t) \rangle_\tau$. Notons que tous les calculs présentés dans cette annexe sont censés être valides dans le cas plus général où les transitions sont seulement contraintes à avoir une portée spatiale ℓ_{hop} finie, et dans un régime de temps où $\xi(t) \gg \ell_{hop}$. Il n'est pas nécessaire de se restreindre au cas des sauts sur les plus proches voisins. Deux moyennes distinctes vont être introduites, la moyenne sur les marches aléatoires $\langle \dots \rangle_w$, et la moyenne sur le désordre (les temps de piégeage τ_i) $\langle \dots \rangle_\tau$. Nous considérons ici une version légèrement modifiée du modèle, dans lequel la particule reste sur le site x un temps exactement égale à $\tau(x)$ (nous utilisons des notations continues pour l'espace), plutôt que distribué exponentiellement autour de cette valeur. On s'attend, et nous l'avons testé numériquement, à ce que cette différence ne modifie la forme de $\langle p(x, t) \rangle_\tau$ à temps long.

Pour une réalisation donnée du désordre, on peut décomposer la probabilité $p(x, t)$ que la marche soit sur le site x au temps t en une somme sur le nombre de pas de la marche :

$$p(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P(x, n; t) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \delta_{x_n, x} I(t_n < t < t_{n+1}) \rangle_w \quad (\text{B.1})$$

où $I(t_n < t < t_{n+1})$ est la fonction caractéristique de l'intervalle $[t_n, t_{n+1}]$, égale à 1 si t appartient à cet intervalle et 0 sinon. Afin de simplifier les notations, nous introduisons $I_n(t) = I(t_n < t < t_{n+1})$. En prenant la moyenne sur le désordre :

$$\langle p(x, t) \rangle_\tau = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \langle \delta_{x_n, x} I_n(t) \rangle_w \rangle_\tau \quad (\text{B.2})$$

Le point clé est que l'on peut permuter les deux moyennes, et effectuer d'abord la moyenne sur le désordre pour une marche donnée. En notant $\langle \dots \rangle_{n, x}$ la moyenne

sur les marches à n pas se terminant en x , on obtient :

$$\langle p(x, t) \rangle_\tau = \sum_{n=0}^{\infty} q(x|n) \langle \langle I_n(t) \rangle_\tau \rangle_{n,x} \quad (\text{B.3})$$

où $q(x|n)$ est la probabilité standard, pour une marche aléatoire, de se trouver au site x après n pas :

$$q(x|n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{-x^2/2n} \quad (\text{B.4})$$

pour $n \gg 1$. On prend ensuite la transformée de Laplace temporelle \mathcal{L} de $\langle p(x, t) \rangle_\tau$:

$$\langle \hat{p}(x, s) \rangle_\tau = \sum_{n=0}^{\infty} q(x|n) \langle \langle \hat{I}_n(s) \rangle_\tau \rangle_{n,x} \quad (\text{B.5})$$

ce qui requiert le calcul de $\hat{I}_n(s)$:

$$\begin{aligned} \hat{I}_n(s) &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-st} dt = \frac{1}{s} e^{-st_n} [1 - e^{-s(t_{n+1}-t_n)}] \\ \hat{I}_n(s) &\simeq \tau(x) e^{-st_n} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

puisque $t_{n+1} - t_n = \tau(x)$, et que $\tau(x)$ est au plus d'ordre $s^{-\nu}$ lorsque $s \rightarrow 0$, de sorte que $s\tau(x)$ devrait être petit devant 1. Pour une marche W donnée, se terminant en x après n pas, le temps t_n peut être décomposé en une somme sur les différents sites visités :

$$t_n = \sum_{x'} \mathcal{N}_W(x') \tau(x') \quad (\text{B.7})$$

où $\mathcal{N}_W(x')$ est le nombre de visites de la marche W sur le site x' . Maintenant, $\hat{I}_n(s)$ peut être moyenné sur le désordre :

$$\langle \hat{I}_n(s) \rangle_\tau = \langle \tau e^{-s\mathcal{N}_W(x)\tau} \rangle_\tau \prod_{x' \neq x} \langle e^{-s\mathcal{N}_W(x')\tau} \rangle_\tau \quad (\text{B.8})$$

Les moyennes du type $\langle e^{-a\tau} \rangle_\tau$ ou $\langle \tau e^{-a\tau} \rangle_\tau$ se calculent facilement, dans la limite $a \rightarrow 0$,

$$\langle e^{-a\tau} \rangle_\tau = \int_1^{\infty} \frac{\mu d\tau}{\tau^{1+\mu}} e^{-a\tau} \simeq 1 - c a^\mu \simeq e^{-ca^\mu} \quad (\text{B.9})$$

$$\langle \tau e^{-a\tau} \rangle_\tau = -\frac{\partial}{\partial a} \langle e^{-a\tau} \rangle_\tau = c \mu a^{\mu-1} e^{-ca^\mu} \quad (\text{B.10})$$

avec $c = \Gamma(1 - \mu)$, de sorte que $\langle \hat{I}_n(s) \rangle_\tau$ s'écrit :

$$\langle \hat{I}_n(s) \rangle_\tau = c\mu [s\mathcal{N}_W(x)]^{\mu-1} e^{-cs^\mu [\sum_{x'} \mathcal{N}_W(x')^\mu]} \quad (\text{B.11})$$

L'étape suivante est de moyenner sur l'ensemble des marches W se terminant au site x en n pas. Comme cette partie est la plus difficile du calcul, nous avons fait appel à des approximations simples, censées être valides au voisinage de $\mu = 1$ et de $\mu = 0$ respectivement.

B.1.2 Une approximation pour $\mu \rightarrow 1$

Une approximation simple consiste à effectuer la moyenne $\langle \dots \rangle_{n,x}$ du membre de droite de l'Eq. (B.11) en remplaçant $\mathcal{N}_W(x')$ par $\mathcal{N}_x(x', n) = \langle \mathcal{N}_W(x') \rangle_{n,x}$:

$$\begin{aligned} \langle \langle \hat{I}_n(s) \rangle_\tau \rangle_{n,x} &= \langle c\mu [s\mathcal{N}_W(x)]^{\mu-1} e^{-cs^\mu [\sum_{x'} \mathcal{N}_W(x')^\mu]} \rangle_{n,x} \\ &\simeq c\mu [s\mathcal{N}_x(x, n)]^{\mu-1} e^{-cs^\mu [\sum_{x'} \mathcal{N}_x(x', n)^\mu]} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

On s'attend à ce que cette approximation soit correcte, à temps long, pour μ proche de 1 ($\mu < 1$), car elle est exacte pour $\mu = 1$. Notons cependant que pour $\mu = 1$, l'Eq. (B.9) n'est plus valable, et des corrections logarithmiques apparaissent. En revenant à $\mathcal{N}_x(x', n)$, on peut montrer que pour les grandes valeurs de n , cette quantité obéit à une loi d'échelle :

$$\mathcal{N}_x(x', n) = \sqrt{n} F\left(\frac{x'}{\sqrt{n}}, \frac{x}{\sqrt{n}}\right) \quad (\text{B.13})$$

la fonction $F(v, z)$ étant donnée par l'intégrale :

$$F(v, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin \pi u}} e^{-\frac{(v-zu)^2}{2 \sin \pi u}} \quad (\text{B.14})$$

Les différents facteurs dans l'Eq. (B.12) peuvent alors être calculés :

$$\sum_{x'} \mathcal{N}_x(x', n)^\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{n} dv \left[\sqrt{n} F\left(v, \frac{x}{\sqrt{n}}\right) \right]^\mu = \sqrt{n}^{1+\mu} G\left(\frac{x}{\sqrt{n}}\right) \quad (\text{B.15})$$

(en ayant introduit $G(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(v, z)^\mu dv$) et :

$$\mathcal{N}_x(x, n)^{\mu-1} = \sqrt{n}^{\mu-1} F\left(\frac{x}{\sqrt{n}}, \frac{x}{\sqrt{n}}\right)^{\mu-1} = \sqrt{n}^{\mu-1} H\left(\frac{x}{\sqrt{n}}\right)^{\mu-1} \quad (\text{B.16})$$

avec $H(v) = F(v, v)$. A partir de l'Eq. (B.5), une limite continue en espace peut être déduite, en définissant une variable d'échelle continue par la relation $n = \lambda x^2$:

$$\langle \hat{p}(x, s) \rangle_\tau = x^2 \int_0^\infty d\lambda \left[\frac{e^{-1/2\lambda}}{|x|\sqrt{2\pi\lambda}} \right] \times \quad (\text{B.17})$$

$$\left[c\mu s^{\mu-1} (|x|\sqrt{\lambda})^{\mu-1} H\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\right)^{\mu-1} \right] e^{-[cs^\mu |x|^{1+\mu} \sqrt{\lambda}^{1+\mu} G(\frac{1}{\sqrt{\lambda}})]}$$

où les propriétés de parité de $G(z)$ et de $H(z)$ ont été utilisées. En regroupant les facteurs, et en introduisant une nouvelle variable d'échelle $\eta = |x|^{(1+\mu)/\mu} s$, on obtient :

$$\langle \hat{p}(x, s) \rangle_\tau = |x|^{1/\mu} \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{\mu-1} \int_0^\infty d\lambda \lambda^{\frac{\mu}{2}-1} H\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\right)^{\mu-1} e^{-\frac{1}{2\lambda} - c\eta^\mu \lambda^{(1+\mu)/2} G(\frac{1}{\sqrt{\lambda}})} \quad (\text{B.18})$$

On peut remarquer que cette expression est en accord avec la forme d'échelle attendue pour $\langle p(x, t) \rangle_\tau$:

$$\langle p(x, t) \rangle_\tau = \frac{1}{\xi} f\left(\frac{|x|}{\xi}\right) \quad (\text{B.19})$$

où ξ est l'échelle de longueur dynamique, $\xi \sim t^{\mu/(1+\mu)}$. En effet, on peut réécrire la relation précédente sous la forme :

$$\langle p(x, t) \rangle_\tau = \frac{1}{|x|} g\left(\frac{t}{|x|^{(1+\mu)/\mu}}\right) \quad (\text{B.20})$$

En prenant la transformée de Laplace par rapport à t , on a :

$$\langle \hat{p}(x, s) \rangle_\tau = |x|^{1/\mu} \hat{g}(\eta) \quad (\text{B.21})$$

où \hat{g} est la transformée de Laplace de g ; cette équation est bien de la même forme que l'Eq. (B.18). On peut ainsi en déduire que la fonction d'échelle $\hat{g}(\eta)$ est donnée par :

$$\hat{g}(\eta) = \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{\mu-1} \int_0^\infty d\lambda \lambda^{\frac{\mu}{2}-1} H\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\right)^{\mu-1} e^{-\frac{1}{2\lambda} - c\eta^\mu \lambda^{(1+\mu)/2} G(\frac{1}{\sqrt{\lambda}})} \quad (\text{B.22})$$

Il est intéressant à ce point de s'intéresser aux corrections à cette loi d'échelle, pour savoir quel est le temps caractéristique au-delà duquel elle devient valable. La principale correction consiste à prendre en compte le terme linéaire qui intervient dans le développement de $\langle e^{-a\tau} \rangle_\tau$ pour $a \rightarrow 0$ donné en Eq. (B.9). Ceci induit alors l'ajout d'un terme constant à $\langle \tau e^{-a\tau} \rangle_\tau$, puisque cette quantité est obtenue par dérivation de la précédente. En reportant cette correction dans la suite des calculs jusqu'à l'Eq. (B.18), on obtient schématiquement :

$$\langle \hat{p}(x, s) \rangle_\tau = |x|^{1/\mu} [\hat{g}(\eta) + \varepsilon(\eta) s^{\frac{1-\mu}{1+\mu}}] \quad (\text{B.23})$$

où $\varepsilon(\eta)$ est une fonction qui peut être calculée exactement. On voit donc que cette correction à la loi d'échelle ne disparaît que si $s^{(1-\mu)/(1+\mu)} \ll 1$, autrement dit pour $t^{(1-\mu)/(1+\mu)} \gg 1$.

B.1.3 Comportements asymptotiques de la fonction f

Nous allons nous intéresser plus particulièrement aux comportements asymptotiques de $\hat{g}(\eta)$ pour η grand, ce qui nous donnera accès aux queues spatiales de la distribution $\langle p(x, t) \rangle_\tau$. Lorsque $\eta \rightarrow \infty$, l'intégrale précédente est dominée par les petites valeurs de λ , ce qui signifie qu'il faut connaître le comportement asymptotique à grand z de $H(z)$ et de $G(z)$. Commençons par étudier le cas de $H(z)$:

$$\begin{aligned} H(z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin \pi u}} \exp \left[-\frac{z^2(1-u)^2}{2 \sin \pi u} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z \frac{dv}{\sin(\pi v/z)} \exp \left[-\frac{v^2}{2 \sin(\pi v/z)} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Dans la limite $z \gg 1$, cette intégrale est dominée par le voisinage de $v = 0$, et $\sin(\pi v/z)$ peut être développé au premier ordre, en remplaçant également la borne supérieure z de l'intégrale par $+\infty$:

$$H(z) \simeq \frac{1}{\pi\sqrt{2z}} \int_0^{+\infty} dv v^{-\frac{1}{2}} e^{-zv/2\pi} = \frac{1}{z\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \quad (\text{B.25})$$

d'où l'on déduit :

$$H(z) \simeq \frac{1}{z} \quad z \rightarrow \infty \quad (\text{B.26})$$

En ce qui concerne maintenant $G(z)$:

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dv F(v, z)^\mu \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \left\{ \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin(\pi u)}} \exp \left[-\frac{(v-zu)^2}{2 \sin(\pi u)} \right] \right\}^\mu \\ &= \frac{z}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dw \left\{ \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin(\pi u)}} \exp \left[-\frac{z^2(w-u)^2}{2 \sin(\pi u)} \right] \right\}^\mu \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

avec le changement de variable $v = zw$. L'intégrale entre accolades peut être calculée en introduisant une nouvelle variable $q = w - u$:

$$\int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin(\pi u)}} \exp \left[-\frac{z^2(w-u)^2}{2 \sin(\pi u)} \right] = \int_{-w}^{1-w} \frac{dq}{\sqrt{\sin \pi(w+q)}} \exp \left[-\frac{z^2 q^2}{2 \sin \pi(w+q)} \right] \quad (\text{B.29})$$

Si $0 < w < 1$, cette intégrale est équivalente pour $z \gg 1$ à :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin \pi u}} \exp \left[-\frac{z^2(w-u)^2}{2 \sin \pi u} \right] &\simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{\sqrt{\sin \pi w}} \exp \left[-\frac{z^2 q^2}{2 \sin \pi w} \right] \\ &\simeq \frac{1}{z\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2/2} = \frac{1}{z} \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Pour $w > 1$ et $w < 0$, l'expression $M(u, w) = \frac{(w-u)^2}{2 \sin \pi u}$ a un minimum $M_0(w) > 0$ en fonction de w , de sorte qu'un calcul par une méthode du col conduit à :

$$\int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin \pi u}} \exp \left[-\frac{z^2(w-u)^2}{2 \sin \pi u} \right] \sim \frac{1}{z} e^{-z^2 M_0(w)} \quad (\text{B.31})$$

Les contributions des régions $w > 1$ et $w < 0$ deviennent négligeables à grand z , si bien que l'on obtient finalement :

$$G(z) \simeq z^{1-\mu} \quad (\text{B.32})$$

Le comportement de $\hat{g}(\eta)$ pour les grandes valeurs de η est alors obtenu à partir de :

$$\hat{g}(\eta) = \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{\mu-1} \int_0^{+\infty} d\lambda \lambda^{\mu-\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2\lambda} - c\eta^\mu \lambda^\mu}. \quad (\text{B.33})$$

La transformée de Laplace inverse peut être calculée en utilisant une méthode du col. Pour mettre en œuvre plus facilement cette méthode, nous introduisons la nouvelle variable d'intégration $\rho = \lambda \eta^{\mu/(1+\mu)}$:

$$\hat{g}(\eta) = \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{\mu-1} \left(\eta^{-\frac{\mu}{1+\mu}} \right)^{\mu-\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} d\rho \rho^{\mu-\frac{3}{2}} e^{-\eta^{\frac{\mu}{1+\mu}} [\frac{1}{2\rho} + c\rho^\mu]} \quad (\text{B.34})$$

Il faut étudier le minimum de la fonction $\Omega(\rho) = 1/2\rho + c\rho^\mu$; en définissant ρ_0 par la relation $\Omega'(\rho_0) = 0$, on obtient $\rho_0 = (2\mu c)^{-1/(1+\mu)}$. La fonction $\hat{g}(\eta)$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \hat{g}(\eta) &= \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{-\frac{1}{1+\mu}} \rho_0^{\mu-\frac{3}{2}} e^{-\eta^{\mu/(1+\mu)} \Omega(\rho_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho e^{-\frac{1}{2}\eta^{\mu/(1+\mu)} \Omega''(\rho_0)(\rho-\rho_0)^2} \\ &= \mu c (2\mu c)^{\frac{3/2-\mu}{1+\mu}} \Omega''(\rho_0)^{-\frac{1}{2}} \eta^{-\frac{1}{1+\mu}} e^{-\eta^{-\mu/(1+\mu)} \Omega(\rho_0)} \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Une manière de calculer la transformée de Laplace inverse est de deviner la forme fonctionnelle de cette dernière, d'en prendre la transformée de Laplace et de procéder ensuite par identification. En supposant, pour $\tau \rightarrow 0$, que $g(\tau)$ se comporte comme :

$$g(\tau) \simeq B \tau^\alpha e^{-b\tau^{-\beta}} \quad (\text{B.36})$$

la transformée de Laplace $\hat{g}(\eta)$ se calcule à grand η par une méthode du col :

$$\hat{g}(\eta) \simeq \frac{B y_0^\alpha}{\sqrt{2\pi \psi''(y_0)}} \eta^{-\gamma} e^{-\eta \psi(y_0)} \quad (\text{B.37})$$

avec $\gamma = (1 + \alpha + \frac{\beta}{2})/(1 + \beta)$, $\psi(y) = y + by^{-\beta}$, en ayant défini y_0 par la relation $\psi'(y_0) = 0$. En identifiant cette dernière expression avec l'Eq. (B.34), on obtient en particulier $\beta = \mu$ et $\alpha = -\mu/2$, ainsi que les constantes b et B . En revenant à la forme d'échelle usuelle Eq. (B.19) pour $\langle p(x, t) \rangle_\tau$, on trouve finalement pour $f(\zeta)$:

$$f(\zeta) \approx f_\infty |\zeta|^{\frac{\mu-1}{2}} e^{-b|\zeta|^{1+\mu}} \quad |\zeta| \rightarrow \infty \quad (\text{B.38})$$

avec $\zeta = x/t^{\mu/(1+\mu)}$, et :

$$f_\infty = \sqrt{\frac{\mu\Gamma(1-\mu)}{2^\mu\pi}}, \quad b = 2^{-\mu}\Gamma(1-\mu). \quad (\text{B.39})$$

On peut aussi s'intéresser à la limite $\zeta \rightarrow 0$. En partant de l'Eq. (B.22), nous devons calculer le comportement à petit z de $G(z)$ et $H(z)$, qui est simple dans ce cas car ces fonctions ont une limite finie en 0, notées $g_0(\mu)$ et h_0 respectivement :

$$g_0(\mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} dv \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin \pi u}} e^{\frac{v^2}{2\sin \pi u}} \right)^\mu \quad (\text{B.40})$$

$$h_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{\sin \pi u}} = \frac{\Gamma(\frac{1}{4})^2}{2\pi^2} \quad (\text{B.41})$$

Il faut donc calculer l'intégrale suivante :

$$\hat{g}(\eta) = \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} h_0^{\mu-1} \eta^{\mu-1} \int_0^\infty d\lambda \lambda^{\frac{\mu}{2}-1} e^{-\frac{1}{2\lambda} - c g_0(\mu) \eta^\mu \lambda^{(1+\mu)/2}} \quad (\text{B.42})$$

Pour $\eta \rightarrow 0$, cette intégrale est dominée par les grands λ . On peut alors effectuer le changement de variable $y = c g_0(\mu) \eta^\mu \lambda^{(1+\mu)/2}$, ce qui donne :

$$\hat{g}(\eta) = A \eta^{-\frac{1}{1+\mu}} \int_0^\infty dy y^{-\frac{1}{1+\mu}} e^{-y} \exp\left(-\frac{1}{2}[c g_0(\mu)]^{\frac{2}{1+\mu}} \eta^{\frac{2\mu}{1+\mu}} y^{-\frac{2}{1+\mu}}\right) \quad (\text{B.43})$$

avec une constante A donnée par :

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2\mu}{1+\mu} \Gamma(1-\mu)^{\frac{1}{1+\mu}} g_0(\mu)^{-\frac{\mu}{1+\mu}} h_0^{\mu-1} \quad (\text{B.44})$$

A l'ordre zéro en η , l'intégrale précédente se réduit à :

$$\int_0^\infty dy y^{-\frac{\mu}{1+\mu}} e^{-y} = \Gamma\left(\frac{\mu}{1+\mu}\right) \quad (\text{B.45})$$

ce qui donne le premier terme du développement de $\hat{g}(\eta)$ à $\eta \rightarrow 0$:

$$\hat{g}(\eta) = A \Gamma\left(\frac{\mu}{1+\mu}\right) \eta^{-\frac{1}{1+\mu}} \quad \eta \rightarrow 0 \quad (\text{B.46})$$

En prenant la transformée de Laplace inverse, ce terme donne la valeur de $\langle p(x = 0, t) \rangle_\tau$, qui est proportionnelle à $t^{-\frac{\mu}{1+\mu}}$. Afin d'obtenir la dépendance spatiale, nous devons calculer le terme suivant du développement en η :

$$A \Gamma\left(\frac{\mu}{1+\mu}\right) \eta^{-\frac{1}{1+\mu}} - \hat{g}(\eta) = A \eta^{-\frac{1}{1+\mu}} \int_0^\infty dy y^{-\frac{1}{1+\mu}} e^{-y} \times \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{2}[cg_0(\mu)]^{\frac{2}{1+\mu}} \eta^{\frac{2\mu}{1+\mu}} y^{-\frac{2}{1+\mu}}\right)\right] \quad (\text{B.47})$$

En introduisant la nouvelle variable $z = \frac{1}{2}[cg_0(\mu)\eta]^{\frac{2}{1+\mu}} y^{-\frac{2}{1+\mu}}$ et la constante $K = \frac{1}{2}[cg_0(\mu)]^{\frac{2}{1+\mu}}$, l'intégrale ci-dessus s'écrit :

$$\int_0^\infty dy y^{-\frac{1}{1+\mu}} e^{-y} \left[1 - \exp\left(-K \eta^{\frac{2\mu}{1+\mu}} y^{-\frac{2}{1+\mu}}\right)\right] = \frac{1+\mu}{2} K^{\frac{\mu}{2}} \int_0^\infty dz z^{-1-\frac{\mu}{2}} [1 - e^{-z}] e^{-K^{\frac{1+\mu}{2}} z^{-\frac{1+\mu}{2}}} \quad (\text{B.48})$$

Pour $\eta \rightarrow 0$, la dernière exponentielle peut être négligée, et en intégrant par parties, on trouve que cette intégrale vaut $\frac{2}{\mu}\Gamma(1-\frac{\mu}{2})$. En calculant la transformée de Laplace inverse, on trouve :

$$g(\tau) \simeq f_0 \tau^{-\frac{\mu}{1+\mu}} - f_1 \tau^{-\mu} \quad \tau \rightarrow \infty \quad (\text{B.49})$$

avec :

$$f_0 = \frac{2\mu h_0^{\mu-1}}{(1+\mu)\sqrt{2\pi}} g_0(\mu)^{-\frac{\mu}{1+\mu}} \frac{\Gamma(1-\mu)^{\frac{1}{1+\mu}} \Gamma\left(\frac{\mu}{1+\mu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1+\mu}\right)} \quad (\text{B.50})$$

$$f_1 = \frac{2^{\frac{1-\mu}{2}}}{\sqrt{\pi}} h_0^{\mu-1} \Gamma\left(1-\frac{\mu}{2}\right) \quad (\text{B.51})$$

En revenant à la fonction d'échelle $f(\zeta)$, on trouve finalement :

$$f(\zeta) = f_0 - f_1 |\zeta|^\mu \quad \zeta \rightarrow 0 \quad (\text{B.52})$$

La correction suivante peut être calculée également, et on trouve qu'elle est proportionnelle à ζ^2 pour $\mu > 1/2$, et à $\zeta^{1+2\mu}$ pour $\mu < 1/2$.

B.1.4 Une approximation pour $\mu \rightarrow 0$

En revenant à l'Eq. (B.11), on peut chercher s'il existe une autre approximation, valable dans le régime de température opposé $\mu \rightarrow 0$, afin de calculer l'argument de l'exponentielle. De manière schématique, pour $\mu \rightarrow 0$, $\mathcal{N}_W(x')^\mu = 0$ si $\mathcal{N}_W(x') = 0$, et reste d'ordre 1 sinon, de telle sorte que $\langle \sum_{x'} \mathcal{N}_W(x')^\mu \rangle_{n,x}$ devrait se réduire au nombre moyen $L(x, n)$ de sites visités par une marche allant de 0

à x en n pas. Une étude un peu plus attentive révèle en fait qu'il est nécessaire d'inclure une correction en \sqrt{n}^μ :

$$\left\langle \sum_{x'} \mathcal{N}_W(x')^\mu \right\rangle_{n,x} \simeq \sqrt{n}^\mu L(x, t) \quad \mu \ll 1 \quad (\text{B.53})$$

afin de tenir compte du fait que $\mathcal{N}_W(x')^\mu$ est d'ordre \sqrt{n}^μ plutôt que d'ordre 1, lorsque $\mathcal{N}_W(x')$ est différent de 0. Par ailleurs, $L(x, n)$ peut être calculé exactement dans la limite $n \rightarrow \infty$ [119] :

$$L(x, n) = \sqrt{n} \ell \left(\frac{x}{\sqrt{n}} \right) \quad (\text{B.54})$$

avec une fonction d'échelle $\ell(u)$ donnée par :

$$\ell(u) = u + \sqrt{\pi} e^{u^2/2} \operatorname{erfc} \left(\frac{u}{2} \right) \quad (\text{B.55})$$

La fin du calcul suit précisément les mêmes étapes que celles correspondant au cas $\mu \rightarrow 1$. On peut convertir la somme sur n en une intégrale, comme précédemment, et obtenir la fonction d'échelle $\hat{g}(\eta)$:

$$\hat{g}(\eta) = \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{\mu-1} \int_0^\infty d\lambda \lambda^{\frac{\mu}{2}-1} H \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)^{\mu-1} e^{-\frac{1}{2\lambda} - c\eta^\mu \lambda^{(1+\mu)/2} \ell \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)} \quad (\text{B.56})$$

Ici encore, nous sommes intéressés par le comportement à grand η de $\hat{g}(\eta)$, dominé par la région à petit λ de l'intégrale. Pour les grands arguments, $\ell(u)$ est dominée par le premier terme, $\ell(u) \simeq u$. La fonction $\hat{g}(\eta)$ s'écrit ainsi :

$$\hat{g}(\eta) = \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{\mu-1} \int_0^\infty d\lambda \lambda^{\mu-\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2\lambda} - c\eta^\mu \lambda^{\mu/2}} \quad (\text{B.57})$$

En introduisant la nouvelle variable d'intégration $\rho = \eta^{2\mu/(2+\mu)} \lambda$, on obtient :

$$\hat{g}(\eta) = \frac{\mu c}{\sqrt{2\pi}} \eta^{\mu-1} \left(\eta^{-\frac{2\mu}{2+\mu}} \right)^{\mu-\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\rho \rho^{\mu-\frac{3}{2}} \exp \left[-\eta^{\frac{2\mu}{2+\mu}} \left(\frac{1}{2\rho} + c\rho^{\frac{\mu}{2}} \right) \right] \quad (\text{B.58})$$

Le minimum de la fonction $\Omega_2(\rho) = 1/2\rho + c\rho^{\mu/2}$ est donné par $\rho_2 = (\mu c)^{-2/(2+\mu)}$. La méthode du col conduit donc pour $\hat{g}(\eta)$ au résultat suivant :

$$\hat{g}(\eta) \simeq (\mu c)^{\frac{5-\mu}{2+\mu}} \Omega_2''(\rho_2)^{-\frac{1}{2}} \eta^{-\frac{2-\mu+\mu^2}{2+\mu}} e^{-\eta^{\frac{2\mu}{2+\mu}}} \Omega_2(\rho_2) \quad (\text{B.59})$$

En utilisant la même méthode que précédemment pour calculer la transformée de Laplace inverse, nous obtenons, pour $\tau \rightarrow 0$:

$$g(\tau) = \tilde{f}_\infty \tau^{-\frac{\mu(1-\mu)}{2-\mu}} e^{-\tilde{b}\tau^{-\frac{2\mu}{2+\mu}}} \quad (\text{B.60})$$

où les constantes \tilde{f}_∞ et \tilde{b} sont données par :

$$\tilde{b} = \frac{2-\mu}{2\mu} [\mu\Gamma(1-\mu)]^{\frac{2}{2-\mu}} \quad (\text{B.61})$$

$$\tilde{f}_\infty = 2\sqrt{\frac{2\pi(2+\mu)}{(2-\mu)(6+\mu)}} [\mu\Gamma(1-\mu)]^{\frac{1-\mu}{2-\mu}} \quad (\text{B.62})$$

Comme ce calcul n'est valable que dans la limite $\mu \rightarrow 0$, on peut de manière cohérente prendre aussi cette limite dans les coefficients :

$$\tilde{b} \simeq 1 \quad \tilde{f}_\infty \simeq 2\sqrt{\frac{\pi\mu}{3}} \quad (\text{B.63})$$

Néanmoins, cette simplification n'est en rien nécessaire, elle permet seulement de mieux appréhender le comportement de ces coefficients avec μ . En revenant à la fonction d'échelle $f(\zeta)$ (avec rappelons-le $\zeta = x/t^{\mu/(1+\mu)}$), on trouve finalement :

$$f(\zeta) \simeq \tilde{f}_\infty |\zeta|^{-\frac{1-\mu+\mu^2}{2-\mu}} \exp\left(-\tilde{b}|\zeta|^{\frac{2(1+\mu)}{2-\mu}}\right) \quad |\zeta| \rightarrow \infty \quad (\text{B.64})$$

En ce qui concerne maintenant le comportement de $f(\zeta)$ pour $\zeta \rightarrow 0$, il est facile de voir que le calcul est le même que pour l'approximation précédente $\mu \rightarrow 1^-$, en remplaçant simplement $g_0(\mu)$ par $\lim_{u \rightarrow 0} \ell(u) = \sqrt{\pi}$. Seule la valeur de la constante f_0 définie en Eq. (B.50) est alors modifiée, et devient \tilde{f}_0 :

$$\tilde{f}_0 = 2^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{1+3\mu}{2(1+\mu)}} \frac{2\mu}{1+\mu} h_0^{\mu-1} \frac{\Gamma(1-\mu)^{\frac{1}{1+\mu}} \Gamma\left(\frac{\mu}{1+\mu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1+\mu}\right)} \quad (\text{B.65})$$

B.2 Précisions techniques concernant les simulations numériques

Nous donnons ici les précisions techniques concernant les simulations numériques du modèle de pièges unidimensionnel. Un nombre N_w de "marcheurs" indépendants sont simulés successivement, un par un, pour une réalisation donnée des énergies aléatoires $\{E_i\}$. Une marche est simulée de la façon suivante : le temps de séjour sur le site i est tiré aléatoirement d'après une distribution exponentielle de moyenne $\tau_i = \exp(E_i/T)$, et un des deux plus proches voisins est choisi aléatoirement avec égale probabilité. On peut ainsi calculer la quantité recherchée pour cet échantillon particulier, puis finalement moyenner sur le nombre N_s d'échantillons. De plus, afin de faciliter les comparaisons entre différentes simulations, nous avons utilisé à chaque fois les mêmes réalisations du désordre, en choisissant les mêmes nombres sources pour le générateur de nombres aléatoires. Pour les simulations hors d'équilibre, dans lesquelles le nombre de sites $L = 2N + 1$ est censé être infini, nous avons utilisé des conditions aux limites périodiques, avec

le plus souvent $N = 10^3$, excepté lorsque des temps très longs étaient nécessaires, auquel cas nous avons utilisé $N = 10^4$ (pour les $Y_k(t)$ par exemple).

Les barres d'erreur sont estimées en faisant plusieurs simulations avec les mêmes paramètres (avec en particulier les mêmes N_w et N_s), en changeant uniquement les nombres sources et en mesurant les fluctuations d'une simulation à l'autre. Nous avons ainsi choisi les nombres N_w et N_s de manière à avoir autant que possible de faibles barres d'erreur, tout en prenant en compte le temps t qu'il faut atteindre pour s'approcher suffisamment du régime asymptotique, ainsi que le temps de calcul. Il faut souligner que l'amplitude des fluctuations dépend beaucoup des quantités calculées. Les fonctions de corrélations sont faciles à calculer, et des valeurs telles que $N_w = N_s = 10^3$ sont suffisantes pour obtenir une erreur relative inférieure à 10^{-2} . Les quantités reliées à la localisation fluctuent davantage; pour les quantités intégrées telles que les Y_k , nous avons pris $N_w = 10^3$ et $N_s = 10^4$ (à l'exception des systèmes de petites tailles, pour lesquels les calculs ont été effectués avec $N_w = N_s = 2 \times 10^3$), ce qui s'est avéré être un bon compromis en vue d'obtenir à la fois des barres d'erreur satisfaisantes (inférieures à 10^{-2}) et des temps suffisamment longs (par exemple $t = 10^6$ pour $\mu = 0.5$). Pour les distributions comme $\varphi(P)$ et $\langle p(x, t) \rangle$, il est nécessaire de moyennner sur un plus grand nombre d'échantillons, afin d'obtenir des courbes suffisamment régulières (avec des fluctuations entre simulations inférieures à 5×10^{-2}). Ainsi, la distribution $\varphi(P)$ a été simulée avec $N_w = 10^4$ et $N_s = 10^5$, alors que $\langle p(x, t) \rangle$ a été calculé avec $N_w = 10^3$ et $N_s = 10^5$. Notons enfin que $Y_2(\ell, t)$ a été simulé avec $N_w = 10^5$ et $N_s = 10^3$ (sauf pour $t = 10^6$ et 10^7 , où $N_w = 5 \cdot 10^4$ et 10^4 respectivement), car dans ce cas nous avons besoin d'une bonne statistique sur les sites peu profonds pour éviter des fluctuations trop importantes à ℓ petit.

B.3 Calcul approché des rapports de participation

Le calcul analytique s'avère assez difficile, et l'objectif de cet appendice est de donner des arguments analytiques en faveur de l'existence d'une limite finie Y_2^{dyn} de $Y_2(t)$ lorsque $t \rightarrow \infty$ pour $\mu < 1$, et de tenter d'en extraire des informations sur le comportement de Y_2^{dyn} en fonction de μ , en particulier pour μ proche de 1.

Le rapport de participation $Y_2(t)$ est donné par l'intégrale :

$$Y_2(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p(x, t)^2 \rangle_\tau \quad (\text{B.66})$$

La quantité $\langle p(x, t)^2 \rangle_\tau$ peut être calculée suivant la même méthode que pour $\langle p(x, t) \rangle_\tau$. Il est utile d'introduire la quantité à deux temps $Q(x, t, t')$ définie comme :

$$Q(x, t, t') = \langle p(x, t)p(x, t') \rangle_\tau \quad (\text{B.67})$$

En définissant également $R(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dx Q(x, t, t')$, on a $Y_2(t) = R(t, t)$, et en passant en transformée de Laplace :

$$\hat{R}(s, s') = \int_0^\infty dt \int_0^\infty dt' e^{-st-s't'} R(t, t') \quad (\text{B.68})$$

Une hypothèse raisonnable, confirmée par des simulations numériques, est que pour de grands temps t et t' ($t > t'$), $R(t, t')$ devienne une fonction de t/t' ,

$$R(t, t') = Y_2^{dyn} \mathcal{R}\left(\frac{t}{t'}\right) \quad (\text{B.69})$$

ce qui se justifie par analogie avec la fonction de corrélation $C(t, t')$ étudiée à la section (2.4). Pour simplifier, nous allons nous restreindre au cas particulier $s = s'$:

$$\begin{aligned} \hat{R}(s, s) &= 2Y_2^{dyn} \int_0^\infty dt' \int_t'^\infty dt e^{-s(t+t')} \mathcal{R}\left(\frac{t}{t'}\right) \\ &= 2Y_2^{dyn} \int_0^\infty dt' \int_1^\infty du t' e^{-st'(1+u)} \mathcal{R}(u) \end{aligned} \quad (\text{B.70})$$

ou encore :

$$\hat{R}(s, s) = \frac{2Y_2^{dyn}}{s^2} \int_1^\infty du \frac{\mathcal{R}(u)}{(1+u)^2} \quad (\text{B.71})$$

Une limite finie pour $Y_2(t)$ correspond ainsi à $\hat{R}(s, s) \sim s^{-2}$, et c'est ce que nous allons essayer de montrer dans la suite. En revenant à $Q(x, t, t')$ et en décomposant cette grandeur sur le nombre de pas, on a :

$$Q(x, t, t') = \sum_{n, n'} p(x, n, t) p(x, n', t') \quad (\text{B.72})$$

En moyennant sur le désordre, on obtient :

$$\langle Q(x, t, t') \rangle_\tau = \sum_{n, n'} q(x|n) q(x|n') \langle I(t_n < t < t_{n+1}) I(t'_{n'} < t' < t'_{n'+1}) \rangle_{\tau, (n, x), (n', x)} \quad (\text{B.73})$$

Pour des marcheurs donnés W et W' , et une séquence donnée de τ_i , introduisons $\hat{K}_{n, n'}(s, s')$ défini par :

$$\begin{aligned} \hat{K}_{n, n'}(s, s') &= \int_0^\infty dt \int_0^\infty dt' I(t_n < t < t_{n+1}) I(t'_{n'} < t' < t'_{n'+1}) e^{-st-s't'} \\ &\simeq \tau(x)^2 e^{-st_n - s't'_{n'}} \end{aligned} \quad (\text{B.74})$$

en supposant à nouveau que $t_{n+1} - t_n = t'_{n'+1} - t'_{n'} = \tau(x)$, c'est-à-dire que les temps de piégeage sont fixés plutôt que distribués exponentiellement, et que $s\tau(x)$ et $s'\tau(x)$ sont tous deux beaucoup plus petits que 1, ce qui signifie que le plus

grand temps de piégeage rencontré est beaucoup plus petit que les temps t et t' considérés. En introduisant la décomposition suivante :

$$t_n = \sum_y \mathcal{N}_W(y, n) \tau(y) \quad (\text{B.75})$$

$$t'_{n'} = \sum_y \mathcal{N}_{W'}(y, n') \tau(y) \quad (\text{B.76})$$

$\hat{K}_{n,n'}(s, s')$ s'écrit :

$$\hat{K}_{n,n'}(s, s') = \tau(x)^2 e^{-[s\mathcal{N}_W(x,n) + s'\mathcal{N}_{W'}(x,n')]\tau(x)} \prod_{y \neq x} e^{-[s\mathcal{N}_W(y,n) + s'\mathcal{N}_{W'}(y,n')]\tau(y)} \quad (\text{B.77})$$

En moyennant $\hat{K}_{n,n'}(s, s')$ sur le désordre, on a :

$$\langle \hat{K}_{n,n'}(s, s') \rangle_\tau = \mu \Gamma(2 - \mu) [s\mathcal{N}_W(x, n) + s'\mathcal{N}_{W'}(x, n')]^{\mu-2} \times \prod_{y \neq x} e^{-c[s\mathcal{N}_W(y,n) + s'\mathcal{N}_{W'}(y,n')]} \quad (\text{B.78})$$

On peut maintenant écrire $\hat{R}(s, s)$ sous la forme :

$$\begin{aligned} \hat{R}(s, s) &= 2\mu \Gamma(2 - \mu) \sum_x \sum_{n < n'} q(x|n) q(x|n') \quad (\text{B.79}) \\ &\times s^{\mu-2} [\mathcal{N}_W(x, n) + \mathcal{N}_{W'}(x, n')]^{\mu-2} e^{-cs^\mu \sum_y [\mathcal{N}_W(y,n) + \mathcal{N}_{W'}(y,n')]} \end{aligned}$$

Nous passons maintenant à la limite continue et remplaçons comme pour $\langle p(x, t) \rangle_\tau$ $\mathcal{N}_W(y, n)$ par sa valeur moyenne $\sqrt{n}F\left(\frac{y}{\sqrt{n}}, \frac{x}{\sqrt{n}}\right)$. A ce stade, nous abandonnons les constantes d'ordre un car nous allons procéder à des approximations assez fortes. En faisant le changement de variable $n' = \beta n$, on obtient :

$$\begin{aligned} \hat{R}(s, s) &\sim s^{\mu-2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_1^{\infty} dn \int_1^{\infty} \frac{d\beta}{\sqrt{\beta}} e^{-\frac{s^2}{2n}(1+\frac{1}{\beta})} \times \quad (\text{B.80}) \\ &\left[\sqrt{n}H\left(\frac{x}{\sqrt{n}}\right) + \sqrt{\beta n}H\left(\frac{x}{\sqrt{\beta n}}\right) \right]^{\mu-2} e^{-cs^\mu \int_{-\infty}^{\infty} dy n^{\frac{\mu}{2}} \left[F\left(\frac{y}{\sqrt{n}}, \frac{x}{\sqrt{n}}\right) + \sqrt{\beta}F\left(\frac{y}{\sqrt{\beta n}}, \frac{x}{\sqrt{\beta n}}\right) \right]} \end{aligned}$$

En raison du facteur $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$, l'intégrale sur β est dominée par le comportement à grand β , ce qui signifie qu'en première approximation, on peut négliger des termes comme $F\left(\frac{y}{\sqrt{n}}, \frac{x}{\sqrt{n}}\right)$ par rapport à $\sqrt{\beta}F\left(\frac{y}{\sqrt{\beta n}}, \frac{x}{\sqrt{\beta n}}\right)$. En introduisant également les variables \hat{x} et \hat{y} par les relations $\hat{x} = \frac{x}{\sqrt{n}}$ et $\hat{y} = \frac{y}{\sqrt{\beta n}}$, on a pour $\hat{R}(s, s)$:

$$\hat{R}(s, s) \sim s^{\mu-2} \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{x} \int_1^{\infty} d\beta \beta^{\frac{\mu-3}{2}} \int_1^{\infty} dn n^{\frac{\mu-1}{2}} e^{-\frac{\hat{x}}{2}(1+\frac{1}{\beta})} \times \\ H\left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{\beta}}\right)^{\mu-2} e^{-cs^{\mu}(\beta n)^{\frac{1+\mu}{2}} G\left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{\beta}}\right)} \quad (\text{B.81})$$

En changeant de variable dans la dernière intégrale sur n , par la relation :

$$n = \frac{1}{\beta s^{\frac{2\mu}{1+\mu}}} \left[\frac{v}{c G\left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{\beta}}\right)} \right]^{\frac{2}{1+\mu}} \quad (\text{B.82})$$

l'intégrale sur v devient $\int_0^{\infty} dv e^{-v} = 1$ (pour $s \rightarrow 0$), et $\hat{R}(s, s)$ se réduit à :

$$\hat{R}(s, s) \sim \frac{1}{c s^2} \int_1^{\infty} \frac{d\beta}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{x} e^{-\frac{\hat{x}}{2}(1+\frac{1}{\beta})} \frac{H\left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{\beta}}\right)^{\mu-2}}{G\left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{\beta}}\right)} \quad (\text{B.83})$$

Ainsi, ce calcul très simplifié s'avère cohérent avec une limite finie Y_2^{dyn} donnée par :

$$Y_2^{dyn} \propto \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \int_1^{\infty} \frac{d\beta}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{x} e^{-\frac{\hat{x}}{2}(1+\frac{1}{\beta})} \frac{H\left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{\beta}}\right)^{\mu-2}}{G\left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{\beta}}\right)} \quad (\text{B.84})$$

en utilisant $c = \Gamma(1-\mu)$.

Comme $\lim_{z \rightarrow 0} G(z) = g_0(\mu) \rightarrow 1$ quand $\mu \rightarrow 1$, et $\lim_{z \rightarrow 0} H(z) = h_0$ est indépendant de μ , la seule dépendance forte par rapport à μ provient du facteur $\Gamma(1-\mu)$, ce qui suggère que :

$$Y_2^{dyn} \sim (1-\mu) \quad \mu \rightarrow 0 \quad (\text{B.85})$$

Ce résultat, semblable au comportement d'équilibre ($Y_2^{eq} = 1-\mu$ pour tout $\mu < 1$), est compatible avec les données numériques. Pour $1 < \mu < 2$, on peut montrer en utilisant les mêmes approximations que $Y_2(t) \sim 1/t^{(\mu-1)/2}$ quand $t \rightarrow \infty$, alors que $Y_2(t) \sim 1/\sqrt{t}$ pour $\mu > 2$, ce qui est le résultat attendu. En ce qui concerne Y_3 , nous avons vérifié que le même niveau d'approximation conduisait aussi à une limite finie, et à un comportement linéaire de cette limite par rapport à μ lorsque $\mu \rightarrow 1$.

Annexe C

Modèle sans désordre avec contraintes cinétiques

Les calculs détaillés relatifs au modèle sans désordre et avec contraintes cinétiques proposé par F. Lequeux et présenté au paragraphe 3.3 sont reportés dans cette annexe.

C.1 Etat stationnaire en champ moyen

Pour déterminer la distribution de probabilité stationnaire à un corps $P(\rho)$ dans le cadre d'une approximation de champ moyen, considérons un lien du réseau, avec des sites dénotés par 1 et 2. Le taux de transition s'écrit, en choisissant les unités de temps de manière à avoir un préfacteur égal à 1 devant l'intégrale (ce préfacteur ne dépend pas de N d'après la définition de la dynamique) :

$$W(\rho_1, \rho_2 \rightarrow \rho'_1, \rho'_2) = \int_0^1 dq \psi(q) \delta[\rho'_1 - qS] \delta[\rho'_2 - (1-q)S] \theta(2-S) \quad (\text{C.1})$$

où la variable $S \equiv \rho_1 + \rho_2$ a été introduite pour simplifier les notations. L'évolution de la distribution de probabilité jointe $Q(\rho_1, \rho_2, t)$ est décrite par l'équation maîtresse suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial t}(\rho_1, \rho_2, t) &= -Q(\rho_1, \rho_2, t) \int_0^\infty d\rho'_1 \int_0^\infty d\rho'_2 W(\rho_1, \rho_2 \rightarrow \rho'_1, \rho'_2) \\ &+ \int_0^\infty d\rho'_1 \int_0^\infty d\rho'_2 W(\rho'_1, \rho'_2 \rightarrow \rho_1, \rho_2) Q(\rho'_1, \rho'_2, t) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

En remplaçant les taux de transition par leur expression donnée en Eq. (C.1), on obtient l'équation :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Q}{\partial t}(\rho_1, \rho_2, t) &= -Q(\rho_1, \rho_2, t) \theta(2 - \rho_1 - \rho_2) \\
&+ \int_0^1 dq \psi(q) \int_0^2 d\rho'_1 \int_0^2 d\rho'_2 \delta[\rho_1 - q(\rho'_1 + \rho'_2)] \\
&\times \delta[\rho_2 - (1 - q)(\rho'_1 + \rho'_2)] \theta(2 - \rho'_1 - \rho'_2) Q(\rho'_1, \rho'_2, t) \quad (C.3)
\end{aligned}$$

En supposant maintenant que la distribution jointe est factorisée, dans l'esprit de cette approximation de champ moyen :

$$Q(\rho_1, \rho_2, t) = P(\rho_1, t) P(\rho_2, t) \quad (C.4)$$

on obtient en intégrant l'Eq. (C.3) sur ρ_2 :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P}{\partial t}(\rho, t) &= -P(\rho, t) \int_0^2 d\rho_2 P(\rho_2, t) \theta(2 - \rho - \rho_2) \\
&+ \int_0^1 dq \psi(q) \int_0^2 d\rho'_1 \int_0^2 d\rho'_2 \delta[\rho - q(\rho'_1 + \rho'_2)] \theta(2 - \rho'_1 - \rho'_2) P(\rho'_1, t) P(\rho'_2, t)
\end{aligned} \quad (C.5)$$

Le deuxième terme du membre de droite, que nous noterons B , peut se réexprimer de manière un peu plus simple en effectuant les changements de variables $S = \rho'_1 + \rho'_2$ (à ρ'_1 fixé) et $v = qS$. On trouve alors pour B , après quelques lignes de calcul :

$$B = \int_0^2 d\rho' \int_{\rho'}^2 \frac{dS}{S} P(\rho', t) P(S - \rho', t) \int_0^S dv \psi\left(\frac{v}{S}\right) \delta(\rho - v) \quad (C.6)$$

Pour aller plus avant, il nous faut maintenant spécifier une forme fonctionnelle pour la distribution $\psi(q)$. Pour garder une certaine généralité, tout en profitant d'une forme analytique commode, nous choisissons pour $\psi(q)$ une distribution bêta symétrique, de paramètre μ :

$$\psi(q) = \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} [q(1 - q)]^{\mu-1} \quad (C.7)$$

Il est dès lors possible de calculer les intégrales précédentes :

$$\int_0^S dv \psi\left(\frac{v}{S}\right) \delta(\rho - v) = \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} \int_0^S dv \left[\frac{v}{S} \left(1 - \frac{v}{S}\right)\right]^{\mu-1} \delta(\rho - v) \quad (C.8)$$

$$= \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} \theta(S - \rho) \left[\frac{\rho}{S} \left(1 - \frac{\rho}{S}\right)\right]^{\mu-1} \quad (C.9)$$

d'où l'on déduit :

$$B = \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} \rho^{\mu-1} \int_{\rho}^2 \frac{dS}{S^{2\mu-1}} (S - \rho)^{\mu-1} \int_0^S d\rho' P(\rho', t) P(S - \rho', t) \quad (C.10)$$

Nous allons maintenant étudier les solutions stationnaires pour la distribution $P(\rho)$, dans le cadre de cette approximation de champ moyen. Il est assez naturel, compte-tenu de la forme de l'équation maîtresse, de rechercher des solutions du type :

$$P(\rho) = C\rho^\alpha e^{\beta\rho} \quad (\text{C.11})$$

avec deux paramètres libres α et β , la constante C étant fixée par normalisation. Le fait d'inclure deux paramètres libres permet d'espérer trouver l'ensemble des solutions du problème (même s'il n'y a au départ aucune garantie pour cela), car celui-ci possède deux paramètres de contrôle, la densité globale $\bar{\rho}$ et l'exposant μ qui décrit de quelle manière s'opère la redistribution. Si des solutions existent sous la forme proposée, on peut s'attendre à ce que α et β s'expriment en fonction de $\bar{\rho}$ et μ . Le premier terme A du membre de droite de l'équation maîtresse Eq. (C.3) s'écrit, en utilisant l'expression Eq. (C.11) de $P(\rho)$:

$$A = -C^2 \rho^\alpha e^{\beta\rho} \int_0^{2-\rho} d\rho_2 \rho_2^\alpha e^{\beta\rho_2} = -C^2 \rho^\alpha \int_\rho^2 dz (z - \rho)^\alpha e^{\beta z} \quad (\text{C.12})$$

D'autre part, le deuxième terme B devient :

$$B = C^2 \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} \rho^{\mu-1} \int_\rho^2 dS S^{1-2\mu} (S - \rho)^{\mu-1} e^{\beta S} \int_0^S dx x^\alpha (S - x)^\alpha \quad (\text{C.13})$$

En posant $x = Sy$ dans la dernière intégrale, on obtient :

$$B = C^2 \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} \rho^{\mu-1} \int_\rho^2 dS S^{2(1-\mu+\alpha)} (S - \rho)^{\mu-1} e^{\beta S} \int_0^1 dy [y(1-y)]^\alpha \quad (\text{C.14})$$

On constate qu'en prenant $\alpha = \mu - 1$, on trouve bien $A + B = 0$, car :

$$\frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu)^2} \int_0^1 dy [y(1-y)]^\alpha = 1 \quad (\text{C.15})$$

ce qui signifie que la forme proposée en Eq. (C.11) pour $P(\rho)$ est bien solution de l'équation maîtresse, pour $\alpha = \mu - 1$ et pour toute valeur de β . Les conditions de normalisation s'écrivent :

$$C \int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{\beta\rho} = 1 \quad (\text{C.16})$$

$$C \int_0^2 d\rho \rho^\mu e^{\beta\rho} = \bar{\rho} \quad (\text{C.17})$$

d'où l'on déduit :

$$\bar{\rho} = \frac{\int_0^2 d\rho \rho^\mu e^{\beta\rho}}{\int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{\beta\rho}} \quad (\text{C.18})$$

On peut remarquer la similitude avec le formalisme habituel de la physique statistique, puisque l'on peut écrire :

$$\bar{\rho} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{\beta \rho} \quad (\text{C.19})$$

Cette dernière intégrale joue donc le rôle d'une fonction de partition (à un corps). Il n'est malheureusement pas possible d'exprimer explicitement β en fonction de $\bar{\rho}$ et de μ , mis à part au voisinage de certains points particuliers. A titre d'illustration, la distribution $P(\rho)$ s'écrit dans le cas $\mu = 1$, qui correspond à une distribution $\psi(q)$ uniforme :

$$P(\rho) = \frac{\beta}{e^{2\beta} - 1} e^{\beta \rho} \quad (\text{C.20})$$

et la relation liant $\bar{\rho}$ à β est assez simple :

$$\bar{\rho} = \frac{2 e^{2\beta}}{e^{2\beta} - 1} - \frac{1}{\beta} \quad (\text{C.21})$$

qui reste cependant une équation implicite.

C.2 Calculs exacts en dimension quelconque

Nous allons maintenant présenter un calcul exact de la distribution $P(\rho)$ pour un espace de dimension d quelconque. Dans une première étape, nous écrirons une équation maîtresse décrivant exactement, sans approximation de champ moyen, l'évolution de la distribution de probabilité à N corps. Nous en chercherons ensuite les solutions stationnaires, avant de revenir à la distribution de probabilité à un site, et de comparer les résultats obtenus avec ceux trouvés au paragraphe précédent dans le cadre d'une approximation de champ moyen.

C.2.1 Taux de transition d'un système à N sites

Il faut tout d'abord écrire les taux de transition globaux pour le problème à N corps. Ceux-ci s'expriment de la manière suivante :

$$W(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) = \sum_{\langle i,j \rangle} \prod_{k \neq i,j} \delta(\rho_k - \rho'_k) \delta(\rho'_i + \rho'_j - \rho_i - \rho_j) \times \int_0^1 dq \psi(q) \delta[\rho'_i - q(\rho_i + \rho_j)] \theta(2 - \rho_i - \rho_j) \quad (\text{C.22})$$

où la notation $\sum_{\langle i,j \rangle}$ signifie une somme sur les liens du réseau. Les différents facteurs s'interprètent comme suit : $\prod_{k \neq i,j} \delta(\rho_k - \rho'_k)$ traduit le fait qu'une fois choisi un lien (i, j) , les autres sites ne sont pas affectés par la transition ; $\delta(\rho'_i + \rho'_j - \rho_i - \rho_j)$ assure la conservation de la masse sur le lien ; $\theta(2 - \rho_i - \rho_j)$ correspond

à la contrainte cinétique qui interdit la transition si la somme des deux masses est supérieure à 2; enfin, l'intégrale sur q rend compte de la redistribution des masses sur le lien.

En utilisant le relation :

$$\int_0^1 dq \psi(q) \delta[\rho'_i - q(\rho_i + \rho_j)] = \frac{1}{\rho_i + \rho_j} \psi\left(\frac{\rho'_i}{\rho_i + \rho_j}\right) \quad (\text{C.23})$$

pour $\rho'_i < \rho_i + \rho_j$, on peut réécrire les taux de transition sous la forme :

$$\begin{aligned} W(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) &= \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\prod_{k \neq i,j} \delta(\rho_k - \rho'_k) \right] \delta(\rho'_i + \rho'_j - \rho_i - \rho_j) \\ &\quad \times \frac{\theta(2 - \rho_i - \rho_j)}{\rho_i + \rho_j} \psi\left(\frac{\rho'_i}{\rho_i + \rho_j}\right) \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

C.2.2 Equation maîtresse

Nous pouvons maintenant écrire l'équation maîtresse associée à ce processus :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t}(\{\rho_k\}, t) &= -P(\{\rho_k\}, t) \int \prod_k d\rho'_k W(\{\rho_k\} \rightarrow \{\rho'_k\}) \\ &\quad + \int \prod_k d\rho'_k W(\{\rho'_k\} \rightarrow \{\rho_k\}) P(\{\rho'_k\}, t) \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Comme précédemment, nous allons traiter séparément les deux termes A et B du membre de droite de l'Eq. (C.25). Nous introduirons la variable $S_{ij} \equiv \rho_i + \rho_j$ pour simplifier les notations. Le premier terme A s'écrit :

$$\begin{aligned} A &= -P(\{\rho_k\}, t) \sum_{\langle i,j \rangle} \int \prod_k d\rho'_k \prod_{k \neq i,j} \delta(\rho'_k - \rho_k) \times \\ &\quad \delta(\rho'_i + \rho'_j - S_{ij}) \frac{\theta(2 - S_{ij})}{S_{ij}} \psi\left(\frac{\rho'_i}{S_{ij}}\right) \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

$$= -P(\{\rho_k\}, t) \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{\theta(2 - S_{ij})}{S_{ij}} \int d\rho'_i d\rho'_j \delta(\rho'_i + \rho'_j - S_{ij}) \psi\left(\frac{\rho'_i}{S_{ij}}\right) \quad (\text{C.27})$$

Or la dernière intégrale se réduit à :

$$\begin{aligned} \frac{1}{S_{ij}} \int d\rho'_i d\rho'_j \delta(\rho'_i + \rho'_j - S_{ij}) \psi\left(\frac{\rho'_i}{S_{ij}}\right) &= \int_0^1 dq \int_0^\infty d\rho'_j \delta[\rho'_j - (1 - q)S_{ij}] \psi(q) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

d'où l'on déduit :

$$A = -P(\{\rho_k\}, t) \sum_{\langle i,j \rangle} \theta(2 - S_{ij}) \quad (\text{C.29})$$

La dernière somme s'interprète comme le nombre de liens mobiles sur le réseau ("mobile" signifiant non bloqué, mais pas nécessairement en mouvement). D'autre part, le second terme B s'écrit :

$$\begin{aligned}
B &= \sum_{\langle i,j \rangle} \int \prod_k d\rho'_k P(\{\rho'_k\}, t) \prod_{k \neq i,j} \delta(\rho'_k - \rho_k) \times \\
&\quad \delta(\rho'_i + \rho'_j - S_{ij}) \frac{\theta(2 - S_{ij})}{S_{ij}} \psi\left(\frac{\rho_i}{S_{ij}}\right) \\
&= \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{\theta(2 - S_{ij})}{S_{ij}} \psi\left(\frac{\rho_i}{S_{ij}}\right) \int d\rho'_i d\rho'_j P(\{\rho'_i, \rho'_j, \rho_k\}_{k \neq i,j}, t) \delta(\rho'_i + \rho'_j - S_{ij}) \\
&= \sum_{\langle i,j \rangle} \psi\left(\frac{\rho_i}{S_{ij}}\right) \theta(2 - S_{ij}) \int_0^1 dq P(\{qS_{ij}, (1-q)S_{ij}, \rho_k\}_{k \neq i,j}, t) \quad (C.30)
\end{aligned}$$

En rassemblant tous les termes, l'équation maîtresse devient finalement :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P}{\partial t}(\{\rho_k\}, t) &= \sum_{\langle i,j \rangle} \theta(2 - S_{ij}) \times \\
&\quad \left[-P(\{\rho_k\}, t) + \psi\left(\frac{\rho_i}{S_{ij}}\right) \int_0^1 dq P(\{qS_{ij}, (1-q)S_{ij}, \rho_k\}_{k \neq i,j}, t) \right] \quad (C.31)
\end{aligned}$$

C.3 Distribution stationnaire en un site

En partant de la distribution stationnaire à N variables obtenue en Eq. (3.49), on peut chercher à en déduire la distribution de densité en un site, car c'est une quantité plus facilement exploitable en pratique, et que l'on peut en outre comparer aux prédictions de champ moyen. En ayant défini la fonction $Z_N(x)$ qui intervient dans la normalisation de la distribution à N corps :

$$Z_N(x) = \int dP_N \delta\left(\sum_{k=1}^N \rho_k - Nx\right) \quad (C.32)$$

où la notation dP_N représente :

$$dP_N = \prod_{k=1}^N [\rho_k^{\mu-1} \theta(2 - \rho_k) d\rho_k] \quad (C.33)$$

La distribution à un site est obtenue en intégrant $P(\{\rho_k\})$ sur $N - 1$ variables :

$$P_1(\rho) = \frac{1}{Z_N(\bar{\rho})} \int dP_{N-1} \delta\left[\sum_{k=1}^{N-1} \rho_k - (N\bar{\rho} - \rho)\right] \rho^{\mu-1} \theta(2 - \rho) \quad (C.34)$$

$$= \frac{\rho^{\mu-1} \theta(2 - \rho)}{Z_N(\bar{\rho})} Z_{N-1}\left(\frac{N\bar{\rho} - \rho}{N - 1}\right) \quad (C.35)$$

En supposant que $Z_N(x)$ se met sous la forme générique :

$$Z_N(x) = f(N) e^{NS(x)} \quad (\text{C.36})$$

où $f(N)$ dépend de N de manière “sous-exponentielle”, on trouve :

$$\begin{aligned} P_1(\rho) &= \rho^{\mu-1} \theta(2-\rho) \exp \left[(N-1) S \left(\bar{\rho} - \frac{\rho - \bar{\rho}}{N-1} \right) - NS(\bar{\rho}) \right] \\ &= \rho^{\mu-1} \theta(2-\rho) \exp \left[(N-1) \left(S(\bar{\rho}) - \frac{\rho - \bar{\rho}}{N-1} S'(\bar{\rho}) \right) - NS(\bar{\rho}) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

soit finalement :

$$P_1(\rho) = \rho^{\mu-1} e^{\bar{\rho} S'(\bar{\rho}) - S(\bar{\rho})} e^{-\rho S'(\bar{\rho})} \theta(2-\rho) \quad (\text{C.38})$$

Il faut maintenant montrer que cette distribution est bien normalisée, et que sa valeur moyenne vaut $\bar{\rho}$. Partons pour cela de la relation de récurrence entre $Z_N(\bar{\rho})$ et $Z_{N-1}(\bar{\rho})$:

$$Z_N(\bar{\rho}) = \int_0^\infty d\rho \rho^{\mu-1} \theta(2-\rho) Z_{N-1} \left(\bar{\rho} - \frac{\rho - \bar{\rho}}{N-1} \right) \quad (\text{C.39})$$

En remplaçant Z_N et Z_{N-1} par leur expression Eq. (C.36), on trouve après un développement similaire à celui effectué pour $P_1(\rho)$:

$$f(N) e^{NS(\bar{\rho})} = f(N-1) e^{(N-1)S(\bar{\rho}) + \bar{\rho} S'(\bar{\rho})} \int_0^\infty d\rho \rho^{\mu-1} \theta(2-\rho) e^{-\rho S'(\bar{\rho})} \quad (\text{C.40})$$

d'où l'on déduit, après réorganisation des termes, que la distribution $P_1(\rho)$ est bien normalisée à 1. Montrer que la moyenne vaut $\bar{\rho}$ est par contre un peu plus subtil. Définissons pour cela $\hat{Z}_N(\lambda)$, la transformée de Laplace de $Z_N(x)$, par la relation :

$$\hat{Z}_N(\lambda) = \int_0^\infty dx Z_N(x) e^{-\lambda x} \quad (\text{C.41})$$

Cette quantité $\hat{Z}_N(\lambda)$ peut se calculer directement :

$$\hat{Z}_N(\lambda) = \int_0^\infty dx \int dP_N \delta \left[\sum_{k=1}^N \rho_k - Nx \right] e^{-\lambda x} \quad (\text{C.42})$$

$$= \frac{1}{N} \int dP_N \exp \left(-\frac{\lambda}{N} \sum_{k=1}^N \rho_k \right) \quad (\text{C.43})$$

d'où finalement :

$$\hat{Z}_N(\lambda) = \frac{1}{N} \left[\int_0^\infty d\rho \rho^{\mu-1} \theta(2-\rho) e^{-\lambda \rho / N} \right]^N \quad (\text{C.44})$$

D'autre part, on peut calculer $\hat{Z}_N(\lambda)$ en utilisant une méthode du col :

$$\hat{Z}_N(\lambda) = f(N) \int_0^\infty dx e^{N[S(x) - \lambda x/N]} \quad (\text{C.45})$$

La fonction $g(x) \equiv S(x) - \lambda x/N$ est maximale pour $x = \bar{\rho}$ tel que $S'(\bar{\rho}) = \lambda/N$. Par conséquent, on peut réécrire $\hat{Z}_N(\lambda)$ sous la forme :

$$\hat{Z}_N(\lambda) = a f(N) e^{N[S(\bar{\rho}) - \bar{\rho}S'(\bar{\rho})]} \quad (\text{C.46})$$

où a est une constante correspondant à l'intégrale sur le voisinage du col. En prenant la limite $N \rightarrow \infty$ à $\bar{\rho}$ fixé, ce qui correspond à des valeurs de λ qui tendent vers l'infini avec N , on obtient en égalant le logarithme des membres de droite des Eqs. (C.44) et (C.46)

$$S(\bar{\rho}) - \bar{\rho}S'(\bar{\rho}) = \ln \int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{-S'(\bar{\rho})\rho} \quad (\text{C.47})$$

En dérivant les deux membres de cette équation par rapport à $\bar{\rho}$, on trouve la relation attendue :

$$\bar{\rho} = \frac{\int_0^2 d\rho \rho^\mu e^{-S'(\bar{\rho})\rho}}{\int_0^2 d\rho \rho^{\mu-1} e^{-S'(\bar{\rho})\rho}} = \int_0^2 d\rho \rho P(\rho) \quad (\text{C.48})$$

On a montré ainsi que la distribution de probabilité à un site $P_1(\rho)$ vaut, dans le cadre d'un calcul exact en dimension d quelconque, et à la limite thermodynamique :

$$P_1(\rho) = C \rho^{\mu-1} e^{\beta\rho} \quad (\text{C.49})$$

En d'autres termes, on retrouve les résultats obtenus dans le cadre d'une approximation de champ moyen, ce qui signifie que pour des systèmes de grande taille, la distribution à N corps est (quasiment) factorisée. C'est ce qu'on constate sur l'Eq. (3.49), qui montre qu'en dehors du facteur $\delta(\sum_k \rho_k - N\bar{\rho})$ traduisant la conservation globale de la masse, la distribution est factorisée.

Annexe D

Effet Kovacs dans le modèle de pièges

Nous présentons dans cette annexe les calculs détaillés de la variation de l'énergie moyenne dans le modèle de pièges, en appliquant le protocole de Kovacs. Nous nous restreindrons au cas où les températures T_1 et T_2 sont inférieures à T_g , mais les méthodes développées ici s'appliquent également aux autres cas, dont les résultats ont été donnés dans le texte.

D.1 Fonction de Green

L'équation maîtresse du modèle de pièges s'écrit :

$$\frac{\partial P_{\text{T}}}{\partial t}(E, t) = -e^{-\beta E} P_{\text{T}}(E) + \omega(t) \rho(E) \quad (\text{D.1})$$

avec $\omega(t) = \int_0^\infty dE' e^{-\beta E'} P_{\text{T}}(E', t)$, et $\beta = \frac{1}{T}$. L'énergie E est une variable positive, la profondeur des pièges, et se trouve être en fait l'opposée de la véritable énergie (négative) des états. Cette équation maîtresse doit être complétée par une condition initiale :

$$P_{\text{T}}(E, t = 0) = P_0(E) \quad (\text{D.2})$$

où $P_0(E)$ est une distribution de probabilité arbitraire donnée. Nous choisissons aussi une densité d'états exponentielle, $\rho(E) = T_g^{-1} e^{-E/T_g}$. En introduisant la transformée de Laplace $\hat{P}_{\text{T}}(E, s)$ par rapport à t définie par :

$$\hat{P}_{\text{T}}(E, s) = \int_0^\infty dt e^{-st} P_{\text{T}}(E, t) \quad (\text{D.3})$$

l'équation maîtresse devient :

$$s \hat{P}_{\text{T}}(E, s) - P_0(E) = -e^{-\beta E} \hat{P}_{\text{T}}(E, s) + \hat{\omega}(s) \rho(E) \quad (\text{D.4})$$

En résolvant pour $\hat{P}_T(E, s)$, on a :

$$\hat{P}_T(E, s) = \frac{P_0(E)}{s + e^{-\beta E}} + \frac{\hat{\omega}(s)\rho(E)}{s + e^{-\beta E}} \quad (\text{D.5})$$

ce qui permet de déterminer $\hat{\omega}(s)$ en multipliant l'Eq. (D.5) par $e^{-\beta E}$ et en intégrant sur E . La distribution $\hat{P}_T(E, s)$ est alors donnée par :

$$\hat{P}_T(E, s) = \frac{e^{\beta E}}{1 + s e^{\beta E}} P_0(E) + \frac{1}{s} \frac{e^{\beta E} \rho(E)}{1 + s e^{\beta E}} \hat{\varphi}(s) \left[\int_0^\infty dE \frac{e^{\beta E} \rho(E)}{1 + s e^{\beta E}} \right]^{-1} \quad (\text{D.6})$$

avec $\hat{\varphi}(s)$ définie par :

$$\hat{\varphi}(s) = \int_0^\infty dE \frac{P_0(E)}{1 + s e^{\beta E}} \quad (\text{D.7})$$

Intégrer l'Eq. (D.6) sur E permet alors de tester que la distribution $\hat{P}_T(E, s)$ est correctement normalisée, à savoir $\int_0^\infty dE \hat{P}_T(E, s) = 1/s$. Afin de calculer la variation de l'énergie après un saut en température, on doit introduire la fonction de Green $G_T(E, E_0, t)$ définie comme la probabilité pour le système d'avoir l'énergie E au temps $t_w + t$, sachant que l'énergie était E_0 à t_w , lors d'une évolution à température T . Notons que puisque le processus est markovien, la fonction de Green ne dépend que de la différence des temps t , et pas de t_w . La fonction de Green en transformée de Laplace $\hat{G}_T(E, E_0, s)$ est obtenue directement à partir de l'Eq. (D.6) en choisissant $P_0(E) = \delta(E - E_0)$:

$$\begin{aligned} \hat{G}_T(E, E_0, s) &= \frac{e^{\beta E_0}}{1 + s e^{\beta E_0}} \delta(E - E_0) \\ &+ \frac{1}{s} \frac{1}{1 + s e^{\beta E_0}} \frac{e^{\beta E} \rho(E)}{1 + s e^{\beta E}} \left[\int_0^\infty dE \frac{e^{\beta E} \rho(E)}{1 + s e^{\beta E}} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Comme cela a été montré en Réf. [129], la distribution d'énergie $P_T(E, t)$ prend une forme d'échelle à temps long, ainsi que l'on peut le voir à partir de l'Eq. (D.6) en prenant la limite $s \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \hat{P}_T(E, s) &= \frac{1}{s} \frac{e^{\beta E} \rho(E)}{1 + s e^{\beta E}} \left[\int_0^\infty dE \frac{e^{\beta E} \rho(E)}{1 + s e^{\beta E}} \right]^{-1} \\ &= \frac{\sin \pi \theta}{\pi} \frac{\beta e^{\beta E}}{(1 + s e^{\beta E})(s e^{\beta E})^\theta} \equiv \hat{\Pi}_T(E, s) \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

en ayant introduit la température réduite $\theta = T/T_g$, ce qui définit la distribution asymptotique $\hat{\Pi}_T(E, s)$. Sa transformée de Laplace inverse $\Pi_T(E, t)$ satisfait une relation d'échelle par rapport à la variable $\xi = \frac{e^{E/T}}{t}$:

$$\Pi_T(E, t) = \beta \xi g(\xi) \quad (\text{D.10})$$

On trouve $g(\xi)$ en inversant la transformée de Laplace donnée par l'Eq. (D.9) :

$$g(\xi) = \frac{\sin \pi \theta}{\pi \Gamma(\theta)} \frac{1}{\xi} e^{-1/\xi} \int_0^{1/\xi} du u^{\theta-1} e^u \quad (\text{D.11})$$

A temps long, la fonction de Green est donc donnée par :

$$\hat{G}_T(E, E_0, s) = \frac{e^{\beta E_0}}{1 + s e^{\beta E_0}} \delta(E - E_0) + \frac{1}{1 + s e^{\beta E_0}} \hat{\Pi}_T(E, s) \quad (\text{D.12})$$

Nous considérons maintenant l'histoire thermique suivante : à l'instant initial, le système subit une trempe d'une température $T_0 > T_g$ à $T_1 < T_g$; au temps t_w , la température est remontée jusqu'à une température T_2 qui satisfait $T_1 < T_2 < T_g$. On est intéressé par l'évolution ultérieure de l'énergie, au temps $t_w + t$. La probabilité d'avoir l'énergie E au temps $t_w + t$, compte tenu de cette histoire thermique, est :

$$P(E, t_w, t) = \int_0^\infty dE_0 G_{T_2}(E, E_0, t) P_{T_1}(E_0, t_w) \quad (\text{D.13})$$

En prenant une double transformée de Laplace par rapport à t_w et t :

$$\hat{P}(E, s_w, s) = \int_0^\infty dE_0 \hat{G}_{T_2}(E, E_0, s) \hat{P}_{T_1}(E_0, s_w) \quad (\text{D.14})$$

Les expressions asymptotiques Eqs. (D.9) et (D.12) permettent alors d'écrire :

$$\hat{P}(E, s_w, s) = \frac{e^{\beta_2 E}}{1 + s e^{\beta_2 E}} \hat{\Pi}_{T_1}(E, s_w) + \hat{\Pi}_{T_2}(E, s) \int_0^\infty dE_0 \frac{\hat{\Pi}_{T_1}(E_0, s_w)}{1 + s e^{\beta_2 E_0}} \quad (\text{D.15})$$

D.2 Evolution de l'énergie moyenne et relation d'échelle

En gardant à l'esprit que l'énergie d'un état donné est l'opposée de la barrière d'énergie E , l'énergie moyenne $\bar{E}(t)$ au temps t est définie par :

$$-\bar{E}(t) = \int_0^\infty dE E P_T(E, t) \quad (\text{D.16})$$

En prenant en compte l'histoire thermique introduite au paragraphe précédent, on peut définir la variation d'énergie entre t_w et $t_w + t$:

$$\Delta E(t_w, t) \equiv \bar{E}(t_w + t) - \bar{E}(t_w) \quad (\text{D.17})$$

On en déduit la transformée de Laplace temporelle :

$$-\Delta \hat{E}(s_w, s) = \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE_0 (E - E_0) \hat{G}_{T_2}(E, E_0, s) \hat{P}_{T_1}(E_0, s_w) \quad (\text{D.18})$$

En développant cette équation, on trouve pour $s_w \tau_0$ et $s \tau_0 \ll 1$:

$$-\Delta \hat{E}(s_w, s) = \int_0^\infty dE E \hat{\Pi}_{T_2}(E, s) \int_0^\infty dE_0 \frac{\hat{\Pi}_{T_1}(E_0, s_w)}{1 + s e^{\beta_2 E_0}} \quad (\text{D.19})$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{s} \int_0^\infty dE_0 E_0 \frac{\hat{\Pi}_{T_1}(E_0, s_w)}{1 + s e^{\beta_2 E_0}} \\ & = \hat{I}(s) \hat{J}(s_w, s) - \frac{1}{s} \hat{K}(s_w, s) \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

où $\hat{I}(s)$, $\hat{J}(s_w, s)$ et $\hat{K}(s_w, s)$ désignent respectivement les trois intégrales apparaissant dans l'Eq. (D.19). En effectuant les changements de variable $\tau = e^{\beta_2 E}$ dans \hat{I} et $\tau = e^{\beta_1 E_0}$ dans \hat{J} et \hat{K} , on a :

$$\hat{I}(s) = \frac{\sin \pi \theta_2}{\pi} \int_1^\infty d\tau \frac{T_2 \ln \tau}{(1 + s\tau)(s\tau)^{\theta_2}} \quad (\text{D.21})$$

$$\hat{J}(s_w, s) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi} \int_1^\infty \frac{d\tau}{(1 + s\tau^\gamma)(1 + s_w\tau)(s_w\tau)^{\theta_1}} \quad (\text{D.22})$$

$$\hat{K}(s_w, s) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi} \int_1^\infty \frac{d\tau T_1 \ln \tau}{(1 + s\tau^\gamma)(1 + s_w\tau)(s_w\tau)^{\theta_1}} \quad (\text{D.23})$$

avec $\gamma = T_1/T_2$; $\hat{I}(s)$ peut être calculée en utilisant l'identité $\ln \tau = \partial \tau^\alpha / \partial \alpha |_{\alpha=0}$, ce qui donne :

$$\hat{I}(s) = \frac{T_2}{s} (\pi \cot \pi \theta_2 - \ln s) \quad (\text{D.24})$$

Nous allons montrer que $\Delta \hat{E}(s_w, s)$ satisfait une relation d'échelle. Remarquons d'abord que pour $s \rightarrow 0$, $\hat{J}(s_w, s)$ est de la forme :

$$\hat{J}(s_w, s) = \frac{1}{s^{1/\gamma}} \int_0^\infty du \frac{f(s_w u / s^{1/\gamma})}{1 + u^\gamma} \quad (\text{D.25})$$

où $f(x) = (\sin \pi \theta_1) / [\pi x^{\theta_1} (1 + x)]$, et $u = s^{1/\gamma} \tau$. De la même façon, $\hat{K}(s_w, s)$ s'écrit :

$$\hat{K}(s_w, s) = -T_2 \ln s \hat{J}(s_w, s) + \frac{T_1}{s^{1/\gamma}} \int_0^\infty du \frac{f(s_w u / s^{1/\gamma})}{1 + u^\gamma} \ln u \quad (\text{D.26})$$

En revenant à $\Delta \hat{E}(s_w, s)$, on obtient à partir de l'Eq. (D.20) que les termes en $\ln s$ se compensent, pour donner :

$$-\Delta \hat{E}(s_w, s) = \frac{1}{s^{1+1/\gamma}} \left[\pi T_2 \cot \pi \theta_2 \int_0^\infty du \frac{f(s_w u / s^{1/\gamma})}{1 + u^\gamma} \right. \quad (\text{D.27})$$

$$\left. - T_1 \int_0^\infty du \frac{f(s_w u / s^{1/\gamma})}{1 + u^\gamma} \ln u \right]$$

$$= \frac{1}{s^{1+1/\gamma}} \varphi \left(\frac{s_w}{s^{1/\gamma}} \right) \quad (\text{D.28})$$

ce qui implique une forme d'échelle simple $\Delta E(t_w, t) = \psi(t/t_w^\gamma)$. Ceci peut se démontrer facilement en calculant la transformée de Laplace de cette forme d'échelle :

$$\mathcal{L}_{t_w t} \psi \left(\frac{t}{t_w^\gamma} \right) = \int_0^\infty dt \int_0^\infty dt_w e^{-st} e^{-s_w t_w} \psi \left(\frac{t}{t_w^\gamma} \right) \quad (\text{D.29})$$

Effectuons le changement de variable $t = x t_w^\gamma$ (à t_w fixé), puis $t_w = v / (sx)^{1/\gamma}$ (à x fixé). On obtient finalement :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{t_w t} \psi \left(\frac{t}{t_w^\gamma} \right) &= \frac{1}{s^{1+1/\gamma}} \int_0^\infty \frac{dx}{x^{1+1/\gamma}} \psi(x) \int_0^\infty dv v^\gamma \exp \left(-\frac{s_w}{s^{1/\gamma}} \frac{v}{x^{1/\gamma}} - v^\gamma \right) \\ &= \frac{1}{s^{1+1/\gamma}} \varphi \left(\frac{s_w}{s^{1/\gamma}} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.30})$$

ce qui donne bien la forme d'échelle attendue en transformée de Laplace.

D.3 Comportement à temps court

Dans ce paragraphe, nous étudions plus précisément le comportement à temps court de $\Delta E(t_w, t)$, caractérisé par $t \ll t_w^\gamma$, ou de manière équivalente $s \gg s_w^\gamma$. Notons cependant que seuls les temps grands par rapport au temps microscopique sont considérés ici : $t, t_w \gg \tau_0 = 1$ ($s, s_w \ll 1$). D'après l'Eq. (D.27), on voit que les deux intégrales suivantes doivent être calculées :

$$A(\lambda) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi} \int_0^\infty \frac{du}{(1+u^\gamma)(1+\lambda u)(\lambda u)^{\theta_1}} \quad (\text{D.31})$$

$$B(\lambda) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\ln u \, du}{(1+u^\gamma)(1+\lambda u)(\lambda u)^{\theta_1}} \quad (\text{D.32})$$

où λ représente le rapport $s_w/s^{1/\gamma}$. Dans le cas $\lambda \ll 1$, ces intégrales se réduisent à :

$$A(\lambda) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi \lambda^{\theta_1}} \int_0^\infty \frac{du}{(1+u^\gamma)u^{\theta_1}} \quad ; \quad B(\lambda) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi \lambda^{\theta_1}} \int_0^\infty \frac{\ln u \, du}{(1+u^\gamma)u^{\theta_1}} \quad (\text{D.33})$$

à condition que $\theta_1 + \gamma > 1$, ce qui assure la convergence des intégrales pour $u \rightarrow \infty$. Le cas opposé, $\theta_1 + \gamma < 1$, sera considéré plus loin. Les intégrales $A(\lambda)$ et $B(\lambda)$ peuvent être calculées aisément à l'aide des identités suivantes :

$$\int_0^\infty \frac{dv}{v^\mu(1+v)} = \frac{\pi}{\sin \pi \mu} \quad ; \quad \int_0^\infty \frac{\ln v \, dv}{v^\mu(1+v)} = \frac{\pi^2 \cos \pi \mu}{\sin^2 \pi \mu} \quad (\text{D.34})$$

Finalement, on trouve pour $\Delta \hat{E}(s_w, s)$:

$$-\Delta \hat{E}(s_w, s) \simeq \frac{T_2 \pi \sin \pi \theta_1}{\gamma \sin \frac{\pi}{\gamma}(1-\theta_1)} [\cot \frac{\pi}{\gamma}(1-\theta_1) + \cot \pi \theta_2] \frac{1}{s^{1+1/\gamma}} \left(\frac{s^{1/\gamma}}{s_w} \right)^{\theta_1} \quad (\text{D.35})$$

Le comportement à temps court de $\Delta E(t_w, t)$ est obtenu par transformée de Laplace inverse, dans le cas $\theta_1 + \gamma > 1$:

$$\Delta E(t_w, t) \simeq K_{>} \left(\frac{t}{t_w^\gamma} \right)^{(1-\theta_1)/\gamma} \quad t \ll t_w^\gamma \quad (\text{D.36})$$

où le coefficient $K_{>}$ est donné par :

$$K_{>} = - \frac{T_2 \pi \sin \pi \theta_1 [\cot \frac{\pi}{\gamma}(1-\theta_1) + \cot \pi \theta_2]}{\gamma \sin[\frac{\pi}{\gamma}(1-\theta_1)] \Gamma(\theta_1) \Gamma(\frac{1+\gamma-\theta_1}{\theta_1})} \quad (\text{D.37})$$

Il faut remarquer qu'en dépit du signe moins qui apparaît dans l'Eq. (D.36), $\Delta E(t_w, t)$ est bien positif à temps court pour $\theta_2 > \theta_1$, ce qui montre que l'énergie doit d'abord croître avant d'atteindre des valeurs plus basses. Toutefois, ce

coefficient s'annule pour $\theta_2 = \theta_1$, ce qui signifie que la singularité disparaît en l'absence de saut de température, et devient négatif pour $\theta_2 < \theta_1$.

Dans le cas opposé, $\theta_1 + \gamma < 1$, une autre approximation doit être utilisée. En faisant le changement de variable $v = \lambda u$ dans $A(\lambda)$ et $B(\lambda)$ – voir Eqs. (D.31,D.32) – on trouve :

$$A(\lambda) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi \lambda} \int_0^\infty \frac{dv}{[1 + (v/\lambda)^\gamma](1+v)v^{\theta_1}} \quad (\text{D.38})$$

$$B(\lambda) = \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi \lambda} \int_0^\infty dv \frac{\ln v - \ln \lambda}{[1 + (v/\lambda)^\gamma](1+v)v^{\theta_1}} \quad (\text{D.39})$$

Dans la limite $\lambda \ll 1$, on a $(v/\lambda)^\gamma \gg 1$, de sorte que $A(\lambda)$ et $B(\lambda)$ se réduisent à :

$$A(\lambda) \simeq \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi \lambda^{1-\gamma}} \int_0^\infty \frac{dv}{v^{\gamma+\theta_1}(1+v)} \quad ; \quad B(\lambda) \simeq \frac{\sin \pi \theta_1}{\pi \lambda^{1-\gamma}} \int_0^\infty dv \frac{\ln v - \ln \lambda}{v^{\gamma+\theta_1}(1+v)} \quad (\text{D.40})$$

ces intégrales étant bien convergentes puisque $\gamma + \theta_1 < 1$. On trouve alors pour $\Delta \hat{E}(s_w, s)$:

$$-\Delta \hat{E}(s_w, s) \simeq \left[\pi T_2 \cot \pi \theta_2 - \pi T_1 \cot \pi(\gamma + \theta_1) + T_1 \ln \frac{s_w}{s^{1/\gamma}} \right] \times \frac{\sin \pi \theta_1}{\sin \pi(\gamma + \theta_1)} \frac{1}{s^{1+1/\gamma}} \left(\frac{s^{1/\gamma}}{s_w} \right)^{1-\gamma} \quad (\text{D.41})$$

La transformée de Laplace inverse donne :

$$\Delta E(t_w, t) \simeq K_{<} \left(C - \ln \frac{t}{t_w^\gamma} \right) \frac{t}{t_w^\gamma} \quad t \ll t_w^\gamma \quad (\text{D.42})$$

où $K_{<}$ et C sont donnés par :

$$K_{<} = \frac{T_2 \sin \pi \theta_1}{\Gamma(1-\gamma) \sin \pi(\gamma + \theta_1)} \quad (\text{D.43})$$

$$C = \gamma \frac{\Gamma'(1-\gamma)}{\Gamma(1-\gamma)} - \Gamma'(2) + \pi \cot \pi \theta_2 - \pi \cot \pi(\gamma + \theta_1) \quad (\text{D.44})$$

D.4 Comportement à temps long

On peut aussi étudier le comportement à temps long ($t \gg t_w^\gamma$), qui se trouve être plus simple à appréhender que le comportement à temps court. En revenant à l'équation de départ – Eq. (D.19) – la limite $s \ll s_w^\gamma$ simplifie grandement l'équation, et on obtient :

$$-\Delta \hat{E}(s_w, s) = \frac{T_2}{s} [\pi \cot \pi \theta_2 - \ln s] \underbrace{\int_0^\infty dE_0 \hat{\Pi}_{T_1}(E_0, s_w)}_{1/s_w} - \frac{1}{s} \int_0^\infty dE_0 E_0 \hat{\Pi}_{T_1}(E_0, s_w) \quad (\text{D.45})$$

Le second terme n'est autre que $\mathcal{L}_{tt_w} \overline{E}(t_w)$, qui apparaît aussi dans le membre de gauche de l'équation, à cause de la définition de $\Delta \hat{E}(s_w, s)$. En d'autres termes, le comportement à temps long de $\overline{E}(t_w + t)$ est le même que si le système avait subi une trempe directe depuis une haute température jusqu'à la température T_2 au temps t_w . On trouve finalement :

$$\Delta E(t_w, t) = \overline{E}(t_w + t) - \overline{E}(t_w) \quad (\text{D.46})$$

$$\overline{E}(t_w + t) = -\mathcal{L}_t^{-1} \frac{T_2}{s} (\pi \cot \pi \theta_2 - \ln s) \quad (\text{D.47})$$

$$= T_2 [\Gamma'(1) - \pi \cot \pi \theta_2] - T_2 \ln t \quad (\text{D.48})$$

ce qui montre que $\overline{E}(t_w + t)$ est bien indépendant de t_w et de T_1 pour des temps $t \gg t_w^\gamma$. Ce résultat peut aussi être obtenu directement sans utiliser cette procédure thermique : si on calcule la distribution de probabilité $P(E, t)$ pour des grands temps t , en partant d'une condition initiale arbitraire $P_0(E)$, il apparaît que cette distribution ne dépend plus de $P_0(E)$. En résumé, l'énergie moyenne dans le protocole de Kovacs est donnée à temps long par :

$$\overline{E}(t_w, t_w + t) = \overline{E}_{late}(t) \quad t \gg t_w^\gamma \quad (\text{D.49})$$

où $\overline{E}_{late}(t)$ est l'énergie moyenne au temps t après une trempe directe depuis une haute température.

Publications

Bertin E., Hodges J. A., Bouchaud J.-P., Bonville P., Sanchez J. P. and Vuillet P., *Effective nuclear temperature in a fluctuating spin system*, Eur. Phys. J. B **27**, 347 (2002).

Bertin E. and Bouchaud J.-P., *Dynamical ultrametricity in the critical trap model*, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 3039 (2002).

Bertin E. M. and Bouchaud J.-P., *Subdiffusion and localization in the one dimensional trap model*, Phys. Rev. E **67**, 026128 (2003).

Bertin E. M. and Bouchaud J.-P., *Linear and non linear response in the aging regime of the 1D trap model*, Phys. Rev. E **67**, 065105(R) (2003).

Bertin E. M., *Crossover from entropic to thermal dynamics in glassy models*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 10683 (2003).

Deboeuf S., Bertin E. M., Lajeunesse E. and Dauchot O., *Jamming transition of a granular pile below the angle of repose*, Eur. Phys. J. B **36**, 105 (2003).

Bertin E. M., Bouchaud J.-P., Drouffe J.-M. and Godrèche C., *The Kovacs effect in model glasses*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 10701 (2003).

Bibliographie

- [1] Alba M., Hammann J., Ocio M. and Réfrégier P., *Spin glass dynamics from magnetic noise, relaxation and susceptibility measurements*, J. Appl. Phys. **61**, 3683 (1987).
- [2] Alba M., Ocio M. and Hammann J., *Ageing process and response function in spin glasses: an analysis of the thermoremanent magnetization decay in Ag:Mn(2.6%)*, Europhys. Lett. **2**, 45 (1986).
- [3] Alberici-Kious F., Bouchaud J.-P., Cugliandolo L. F., Doussineau P. and Levelut A., *Aging in K1-xLixTaO3: a domain growth interpretation*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4987 (1998).
- [4] Alexander S., *Anomalous transport properties for random-hopping and random-trapping models*, Phys. Rev. B **23**, 2951 (1981).
- [5] Alexander S., Bernasconi J., Schneider W. R. and Orbach R., *Excitation dynamics in random one-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys. **53**, 175 (1981).
- [6] Angelani L., Di Leonardo R., Parisi G. and Ruocco G., *Topological description of the aging dynamics in simple glasses*, Phys. Rev. Lett. **87**, 055502 (2001).
- [7] Angelani L., Di Leonardo R., Ruocco G., Scala A. and Sciortino F., *Saddles in the energy landscape probed by supercooled liquids*, Phys. Rev. Lett. **85**, 5356 (2000).
- [8] Angelani L., Ruocco G., Sampoli M. and Sciortino F., *General features of the energy landscape in Lennard-Jones-like model liquids*, J. Chem. Phys. **119**, 2120 (2003).
- [9] Balents L., Bouchaud J.-P. and Mézard M., *The large scale energy landscape of randomly pinned objects*, J. Phys. I (France) **6**, 1007 (1996).
- [10] Bardou F., Bouchaud J.-P., Aspect A. and Cohen-Tannoudji C., *Lévy statistics and laser cooling*, Cambridge University Press (2002).
- [11] Barkai E. and Cheng Y.-C., *Aging continuous time random walks*, J. Chem. Phys. **118**, 6167 (2003).
- [12] Barrat A. and Berthier L., *Real-space application of the mean-field description of spin-glass dynamics*, Phys. Rev. Lett. **87**, 087204 (2001).
- [13] Barrat A., Burioni R. and Mézard M., *Aging classification in glassy dynamics*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 1311 (1996).

- [14] Barrat A. and Mézard M., *Phase space diffusion and low temperature aging*, J. Phys. I (France) **5**, 941 (1995).
- [15] Bellon L., Ciliberto S. and Laroche C., *Memory in the aging of a polymer glass*, Europhys. Lett. **51**, 551 (2001).
- [16] Bellon L., Ciliberto S. and Laroche C., *Violation of the fluctuation-dissipation relation during the formation of a colloidal glass*, Europhys. Lett. **53**, 511 (2001).
- [17] Ben Arous G., *Aging and Spin Glass Dynamics*, in Proceedings of International Congress of Mathematicians, vol III, Beijing (2002).
- [18] Ben Arous G., Bovier A. and Gayraud V., *Aging in the random energy model*, Phys. Rev. Lett. **88**, 087201 (2002).
- [19] Berthier L., *Finite-size scaling analysis of the glass transition*, Phys. Rev. Lett. **91**, 055701 (2003).
- [20] Berthier L., *Yield stress, heterogeneities and activated processes in soft glassy materials*, J. Phys. Condens. Mat. **15**, S933 (2003).
- [21] Berthier L. and Barrat J.-L., *Nonequilibrium dynamics and fluctuation-dissipation relation in a sheared fluid*, J. Chem. Phys. **116**, 6228 (2002).
- [22] Berthier L. and Barrat J.-L., *Shearing a glassy material: numerical tests of nonequilibrium mode-coupling approaches and experimental proposals*, Phys. Rev. Lett. **89**, 095702 (2002).
- [23] Berthier L., Barrat J. L. and Kurchan J., *Dynamic ultrametricity in spin glasses*, Phys. Rev. E **63**, 016105 (2000).
- [24] Berthier L. and Bouchaud J.-P., *Geometrical aspects of aging and rejuvenation in the Ising spin glass: A numerical study*, Phys. Rev. B **66**, 054404 (2002).
- [25] Berthier L. and Garrahan J. P., *Nontopographic description of inherent structure dynamics in glassformers*, J. Chem. Phys. **119**, 4367 (2003).
- [26] Berthier L. and Garrahan J. P., *Real space origin of temperature crossovers in supercooled liquids*, Phys. Rev. E **68**, 041201 (2003).
- [27] Berthier L. and Holdsworth P. C. W., *Surfing on a critical line: rejuvenation without chaos, memory without a hierarchical phase space*, Europhys. Lett. **58**, 35 (2002).
- [28] Berthier L., Holdsworth P. C. W. and Sellitto M., *Nonequilibrium critical dynamics of the 2D XY model*, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 1805 (2001).
- [29] Berthier L., Viasnoff V., White O., Orlyanchik V. and Krzakala F., *Hiking through glassy phases: physics beyond aging*, in *Slow relaxations and non-equilibrium dynamics in condensed matter*, Proceedings of Les Houches Summer School, edited by Barrat J. L., Kurchan J. and Dalibard J., EDP Sciences, (2003).

- [30] Bertin E. M., *Crossover from entropic to thermal dynamics in glassy models*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 10683 (2003).
- [31] Bertin E. and Bouchaud J.-P., *Dynamical ultrametricity in the critical trap model*, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 3039 (2002).
- [32] Bertin E. M. and Bouchaud J.-P., *Subdiffusion and localization in the one dimensional trap model*, Phys. Rev. E **67**, 026128 (2003).
- [33] Bertin E. M. and Bouchaud J.-P., *Linear and non linear response in the aging regime of the 1D trap model*, Phys. Rev. E **67**, 065105(R) (2003).
- [34] Bertin E. M., Bouchaud J.-P., Drouffe J.-M. and Godrèche C., *The Kovacs effect in model glasses*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 10701 (2003).
- [35] Bertin E., Hodges J. A., Bouchaud J.-P., Bonville P., Sanchez J. P. and Vuillet P., *Effective nuclear temperature in a fluctuating spin system*, Eur. Phys. J. B **27**, 347 (2002).
- [36] Blanter Y. M. and Mirlin A. D., *Correlations of eigenfunctions in disordered systems*, Phys. Rev. E **55**, 6514 (1997).
- [37] Bouchaud J.-P., *Granular media: some ideas from statistical physics*, in *Slow relaxations and non-equilibrium dynamics in condensed matter*, Proceedings of Les Houches Summer School, edited by Barrat J. L., Kurchan J. and Dalibard J., EDP Sciences (2003).
- [38] Bouchaud J.-P., *Aging in glassy systems: new experiments, simple models and open questions*, in *Soft and fragile matter*, edited by Cates M. E. and Evans M. R., Bristol : Institute of Physics Publishing (2000).
- [39] Bouchaud J.-P., *Weak ergodicity breaking and aging in disordered systems*, J. Phys. I (France) **2**, 1705 (1992).
- [40] Bouchaud J.-P., Cugliandolo L., Kurchan J. and Mézard M., *Out of equilibrium dynamics in spin-glasses and other glassy systems*, in *Spin-glasses and random fields*, edited by Young A. P., Singapore : World Scientific, (1998).
- [41] Bouchaud J.-P. and Dean D. S., *Aging on Parisi's tree*, J. Phys. I (France) **5**, 265 (1995).
- [42] Bouchaud J.-P., Doussineau P., de Lacerda-Aroso T. and Levelut A., *Frequency dependence of aging, rejuvenation and memory in a disordered ferroelectric*, Eur. Phys. J. B **21**, 335 (2001).
- [43] Bouchaud J.-P., Dupuis V., Hammann J. and Vincent E., *Separation of time and length scales in spin glasses: temperature as a microscope*, Phys. Rev. B **65**, 024439 (2002).
- [44] Bouchaud J.-P. and Georges A., *Anomalous diffusion in disordered media*, Phys. Rep. **195** (1990).
- [45] Bouchaud J.-P. and Georges A., *Pulsed electrophoresis of point particles in random media*, J. Phys. A: Math. Gen. **23**, L1003 (1990).

- [46] Bouchaud J.-P., Georges A. et Le Doussal P., *Diffusion anormale dans les milieux désordonnés : piégeage, corrélations et théorèmes de la limite centrale*, J. Physique **48**, 1855 (1987).
- [47] Bouchaud J.-P. and Mézard M., *Universality classes for extreme-value statistics*, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 7997 (1997).
- [48] Bouchaud J. P. and Potters M., *Theory of financial risks*, ch. 3, Cambridge University Press (2000).
- [49] Brawer S., *Memory effects in the relaxation of glasses: an exactly soluble model*, Phys. and Chem. of Glasses **19**, 48 (1978).
- [50] Bray A. J. and Moore M. A., *Metastable states in spin-glasses*, J. Phys. C **13**, L469 (1980).
- [51] Bray A. J. and Moore M. A., *Metastable states in spin-glasses with short-ranged interactions*, J. Phys. C **14**, 1313 (1981).
- [52] Broderix K., Bhattacharya K. K., Cavagna A., Zippelius A. and Giardina I., *Energy landscape of a Lennard-Jones liquid: statistics of stationary points*, Phys. Rev. Lett. **85**, 5360 (2000).
- [53] Brokmann X., Hermier J.-P., Messin G., Desbiolles P., Bouchaud J.-P. and Dahan M., *Statistical aging and non ergodicity in the fluorescence of single nanocrystals*, Phys. Rev. Lett. **90**, 120601 (2003).
- [54] Büchner S. and Heuer A., *Potential energy landscape of a model glass former: thermodynamics, anharmonicities, and finite size effects*, Phys. Rev. E **60**, 6507 (1999).
- [55] Buisson L., Bellon L. and Ciliberto S., *Intermittency in ageing*, J. Phys. Condens. Mat. **15**, S1163 (2003).
- [56] Compte A. and Bouchaud J.-P., *Localization in one-dimensional random random walks*, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 6113 (1998).
- [57] Crisanti A., Paladin G. and Vulpiani A., *Products of random matrices in statistical physics*, Berlin : Springer-Verlag (1993).
- [58] Crisanti A. and Ritort F., *Violation of the fluctuation-dissipation theorem in glassy systems: basic notions and the numerical evidence*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, R181 (2003).
- [59] Cugliandolo L. F. and Dean D. S., *On the dynamics of a spherical spin-glass in a magnetic field*, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, L453 (1995).
- [60] Cugliandolo L. F., Dean D. S. and Kurchan J., *Fluctuation-dissipation theorems and entropy production in relaxational systems*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2168 (1997).
- [61] Cugliandolo L. F. and Kurchan J., *Analytical solution of the off-equilibrium dynamics of a long-range spin-glass model*, Phys. Rev. Lett. **71**, 173 (1993).
- [62] Cugliandolo L. F. and Kurchan J., *On the out-of-equilibrium relaxation of the Sherrington-Kirkpatrick model*, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 5749 (1994).

- [63] Cugliandolo L. F. and Kurchan J., *Weak ergodicity breaking in mean-field spin-glass models*, Phil. Mag. B **71**, 501 (1995).
- [64] Cugliandolo L. F., Kurchan J. and Peliti L., *Energy flow, partial equilibration, and effective temperatures in systems with slow dynamics*, Phys. Rev. E **55**, 3898 (1997).
- [65] Debenedetti P. G. and Stillinger F. H., *Supercooled liquids and the glass transition*, Nature **410**, 259 (2001).
- [66] Deboeuf S., Bertin E. M., Lajeunesse E. and Dauchot O., *Jamming transition of a granular pile below the angle of repose*, Eur. Phys. J. B **36**, 105 (2003).
- [67] Denny R. A., Reichman D. R. and Bouchaud J.-P., *Trap models and slow dynamics in supercooled liquids*, Phys. Rev. Lett. **90**, 025503 (2003).
- [68] Derrida B., *Random-energy model: an exactly solvable model of disordered systems*, Phys. Rev. B **24**, 2613 (1981).
- [69] Derrida B., *From random walks to spin glasses*, Physica D **107**, 186 (1997).
- [70] Doliwa B. and Heuer A., *Energy barriers and activated dynamics in a supercooled Lennard-Jones liquid*, Phys. Rev. E **67**, 031506 (2003).
- [71] Doliwa B. and Heuer A., *Finite-size effects in a supercooled liquid*, J. Phys. Cond. Mat. **15**, S849 (2003).
- [72] Donati C., Douglas J. F., Kob W., Plimpton S. J., Poole P. H. and Glotzer S.C., *Stringlike cooperative motion in a supercooled liquid*, Phys. Rev. Lett. **80**, 2338 (1998).
- [73] Donati C., Glotzer S. C., Poole P. H., Kob W. and Plimpton S. J., *Spatial correlations of mobility and immobility in a glass-forming Lennard-Jones liquid*, Phys. Rev. E **60**, 3107 (1999).
- [74] Dornic I., *Statistique des évènements persistants dans la dynamique de croissance de domaines*, Thèse de Doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis et CEA Saclay, manuscrit non publié (1998).
- [75] Dupuis V., Vincent E., Bouchaud J.-P., Hammann J., Ito A. and Aruga Katori H., *Aging, rejuvenation, and memory effects in Ising and Heisenberg spin glasses*, Phys. Rev. B **64**, 174204 (2001).
- [76] Dyre J. C., *Energy master equation: a low temperature approximation to Bässler's random walk model*, Phys. Rev. B **51**, 12 276 (1995).
- [77] Dyre J. C., *Master-equation approach to the glass transition*, Phys. Rev. Lett. **58**, 792 (1987).
- [78] Feller W., *An introduction to probability theory and its applications*, vol. II, ch. XIII, New York : Wiley (1966).
- [79] Ferrer M. L., Lawrence C., Demirjian B. G., Kivelson D., Alba-Simionesco C. and Tarjus G., *Supercooled liquids and the glass transition: temperature as the control variable*, J. Chem. Phys. **109**, 8010 (1998).

- [80] Fielding S. and Sollich P., *Observable dependence of fluctuation-dissipation relations and effective temperatures*, Phys. Rev. Lett. **88**, 050603 (2002).
- [81] Fielding S. M., Sollich P. and Cates M., *Aging and rheology in soft materials*, J. Rheol. **44**, 323 (2000).
- [82] Fontes L. R. G., Isopi M. and Newman C. M., *Random walks with strongly inhomogeneous rates and singular diffusions: convergence, localization and aging in one dimension*, Ann. Probab. **30**, 579 (2002).
- [83] Franz S. and Virasoro M. A., *Quasi-equilibrium interpretation of ageing dynamics*, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 891 (2000).
- [84] Fredrickson G. H. and Andersen H. C., *Facilitated kinetic Ising models and the glass transition*, J. Chem. Phys. **83**, 5822 (1985).
- [85] Fredrickson G. H. and Andersen H. C., *Kinetic Ising Model of the Glass Transition*, Phys. Rev. Lett. **53**, 1244 (1984).
- [86] Godrèche C. and Luck J.-M., *Response of non-equilibrium systems at criticality: ferromagnetic models in dimension two and above*, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 9141 (2000).
- [87] Godrèche C. and Luck J.-M., *Response of non-equilibrium systems at criticality: exact results for the Glauber-Ising chain*, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 1151 (2000).
- [88] Goldstein M., *Viscous liquids and the glass transition: a potential energy barrier picture*, J. Chem. Phys. **51**, 3728 (1969).
- [89] Golosov A., *Localization of random walks in one-dimensional random environments*, Commun. Math. Phys. **92**, 491 (1984).
- [90] Götze W., *Aspects of structural glass transition*, in *Liquids, freezing and glass transition*, Proceedings of Les Houches Summer School, edited by Hansen J.-P., Levesque D. and Zinn-Justin J., North-Holland (1989).
- [91] Götze W. and Sjögren L., *Relaxation processes in supercooled liquids*, Rep. Prog. Phys. **55**, 241 (1992).
- [92] Grigera T. S., Cavagna A., Giardina I. and Parisi G., *Geometric approach to the dynamic glass transition*, Phys. Rev. Lett. **88**, 055502 (2002).
- [93] Grigera T. S. and Israeloff N. E., *Observation of fluctuation-dissipation-theorem violations in a structural glass*, Phys. Rev. Lett. **83**, 5038 (1999).
- [94] Head D. A., *Phenomenological glass model for vibratory granular compaction*, Phys. Rev. E **62**, 2439 (2000).
- [95] Hérisson D. and Ocio M., *Fluctuation-dissipation ratio of a spin glass in the aging regime*, Phys. Rev. Lett. **88**, 257202 (2002).
- [96] Hwa T., Marinari E., Sneppen K. and Tang L.-H., *Localization of denaturation bubbles in random DNA sequences*, P. Natl. Acad. Sci. USA **100**, 4411 (2003).

- [97] Joh Y. G., Orbach R., Wood G. G., Hammann J. and Vincent E., *Extraction of the spin glass correlation length*, Phys. Rev. Lett. **82**, 438 (1999).
- [98] Jonason K., Vincent E., Hammann J., Bouchaud J.-P. and Nordblad P., *Memory and chaos effects in spin glasses*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3243 (1998).
- [99] Josseland C., Tkachenko A. V., Mueth D. M. and Jaeger H. M., *Memory effects in granular materials*, Phys. Rev. Lett. **85**, 3632 (2000).
- [100] Jung Y., Barkai E. and Silbey R. J., *Lineshape theory and photon counting statistics for blinking quantum dots: a Lévy walk process*, Chem. Phys. **284**, S181 (2002).
- [101] Kabla A. and Debregeas G., *Contact dynamics in a gently vibrated granular pile*, parution électronique : <http://arXiv.org/cond-mat/0303560>, (2003).
- [102] Keyes T. and Chowdhary J., *Potential energy landscape and mechanisms of diffusion in liquids*, Phys. Rev. E **65**, 041106 (2002).
- [103] Kircher O. and Bohmer R., *Aging, rejuvenation, and memory phenomena in a lead-based relaxor ferroelectric*, Eur. Phys. J. B **26**, 329 (2002).
- [104] Kisker J., Santen L., Schreckenberg M. and Rieger H., *Off-equilibrium dynamics in finite-dimensional spin-glass models*, Phys. Rev. B **53**, 6418 (1996).
- [105] Kivelson D. and Tarjus G., *Observed anomalies in supercooled liquids described by frustration-limited domain theory*, Philos. Mag. B **77**, 245 (1998).
- [106] Kob W. and Andersen H. C., *Kinetic lattice-gas model of cage effects in high-density liquids and a test of mode-coupling theory of the ideal-glass transition*, Phys. Rev. E **48**, 4364 (1993).
- [107] Komori T., Yoshino H. and Takayama H., *Numerical study on aging dynamics in the 3D Ising spin-glass model. I. Energy relaxation and domain coarsening*, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 3387 (1999).
- [108] Komori T., Yoshino H. and Takayama H., *Numerical study on aging dynamics in the 3D Ising spin-glass model. II. Quasi-equilibrium regime of spin auto-correlation function*, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 1192 (2000).
- [109] Komori T., Yoshino H. and Takayama H., *Numerical study on aging dynamics in Ising spin-glass models: temperature-change protocols*, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, Suppl. A 228 (2000).
- [110] Kovacs A. J., *Glass transition in amorphous polymers. Phenomenological study*, Fortschr. Hochpolymer Forsch., **3**, 394 (1963).
- [111] Kovacs A. J., Aklonis J. J., Hutchinson J. M. and Ramos A. R., *Isobaric volume and enthalpy recovery of glasses. II. A transparent multiparameter theory*, J. Polym. Sci. **17**, 1097 (1979).
- [112] Kurchan J., *Elementary constraints on autocorrelation function scalings*, Phys. Rev. E **66**, 017101 (2002).
- [113] Kurchan J., Parisi G. and Virasoro M. A., *Barriers and metastable states as saddle points in the replica approach*, J. Phys. I (France) **3**, 1819 (1993).

- [114] La Nave E., Mossa S. and Sciortino F., *Potential energy landscape equation of state*, Phys. Rev. Lett. **88**, 225701 (2002).
- [115] Le Doussal P., *Transport dans les systèmes désordonnés : lois d'échelle et intermittence. Quelques propriétés remarquables des modèles de spin homogènes ou désordonnés*, Thèse de Doctorat, Université Paris 6, manuscrit non publié (1987).
- [116] Le Doussal P., Monthus C. and Fisher D. S., *Random walkers in one-dimensional random environments: exact renormalization group analysis*, Phys. Rev. E **59**, 4795 (1999).
- [117] Lefloch F., Hammann J., Ocio M. and Vincent E., *Can aging phenomena discriminate between the droplet model and a hierarchical description in spin glasses ?*, Europhys. Lett. **18**, 647 (1992).
- [118] Lequeux F., communication privée.
- [119] Luck J.-M., communication privée.
- [120] Machta J., *Random walks on site disordered lattices*, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, L531 (1985).
- [121] Marinari E., Parisi G., Ricci-Tersenghi F. and Ruiz-Lorenzo J. J., *Off-equilibrium dynamics at very low temperatures in three-dimensional spin glasses*, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 2373 (2000).
- [122] Marinari E., Parisi G. and Ruiz-Lorenzo J. J., *Numerical simulations of spin-glass systems*, in *Spin glasses and random fields*, edited by Young A. P., Singapore : World Scientific (1998).
- [123] Marinari E., Parisi G., Ruiz-Lorenzo J. and Ritort F., *Numerical evidence for spontaneously broken replica symmetry in 3D spin glasses*, Phys. Rev. Lett. **76**, 843 (1996).
- [124] Mézard M., Parisi G., Surlas N., Toulouse G. and Virasoro M., *Replica symmetry breaking and the nature of the spin glass phase*, J. Physique (France) **45**, 843 (1984).
- [125] Mézard M., Parisi G. and Virasoro M. A., *Spin glass theory and beyond*, Singapore : World Scientific, (1987).
- [126] Monthus C., *Anomalous diffusion, localization, aging and sub-aging effects in trap models at very low temperature*, Phys. Rev. E **68**, 036114 (2003).
- [127] Monthus C., *Non-linear response of the trap model in the aging regime : Exact results in the strong disorder limit*, parution électronique : <http://arXiv.org/cond-mat/0306407>, (2003).
- [128] Monthus C., *On a non-linear fluctuation theorem for the aging dynamics of disordered trap models*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 11605 (2003).
- [129] Monthus C. and Bouchaud J.-P., *Models of traps and glass phenomenology*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 3847 (1996).

- [130] Monthus C. and Le Doussal P., *Localization of thermal packets and metastable states in the Sinai model*, Phys. Rev. E **65**, 066129 (2002).
- [131] Mossa S. and Sciortino F., *Kovacs effects in an aging molecular liquid*, parution électronique : <http://arXiv.org/cond-mat/0305526>, (2003).
- [132] Moynihan C. T., Easteal A. J., DeBolt M. A. and Tucker J. *Dependence of the fictive temperature of glass on cooling rate*, J. Am. Ceram. Soc. **59**, 12 (1976).
- [133] Narayanaswamy O. S., *A model of structural relaxation in glass*, J. Am. Ceram. Soc. **54**, 491 (1971).
- [134] Ocio M., Alba M. and Hammann J., *Time scaling of the ageing process in spin glasses: a study in CsNiFeF₆*, J. Phys. Lett. **46**, L-1101 (1985).
- [135] Ozon F., Narita T., Knaebel A., Debregeas G., Hébraud P. and Munch J.-P., *Partial rejuvenation of a colloidal glass*, Phys. Rev. E **68**, 032401 (2003).
- [136] Parker A. and Normand V., *The spin glass-like dynamics of gelatin gels*, parution électronique : <http://arXiv.org/cond-mat/0306056>, (2003).
- [137] Rieger H., *The number of solutions of the Thouless-Anderson-Palmer equations for p-spin interaction spin-glasses*, Phys. Rev. B **46**, 14655 (1992).
- [138] Rinn B., Maass P. and Bouchaud J.-P., *Hopping in the glass configuration space: subaging and generalized scaling laws*, Phys. Rev. B **64**, 104417 (2001).
- [139] Ritort F., *Universal dependence of the fluctuation-dissipation ratio on the transition rates in trap models*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 10791 (2003).
- [140] Sasaki M., Dupuis V., Bouchaud J.-P. and Vincent E., *Deviations from perfect memory in spin glass temperature cycling experiments*, Eur. Phys. J. B **29**, 469 (2002).
- [141] Sasaki M. and Nemoto K., *Memory effect, rejuvenation and chaos effect in the multi-layer random energy model*, J. Proc. Soc. Jpn. **69**, 2283 (2000).
- [142] Sasaki M. and Nemoto K., *Scaling law and aging phenomena in the random energy model*, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 2642 (2000).
- [143] Scher H. and Montroll E.W., *Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids*, Phys. Rev. B **12**, 2455 (1975).
- [144] Sciortino F. and Tartaglia P., *Extension of the fluctuation-dissipation theorem to the physical aging of a model glass-forming liquid*, Phys. Rev. Lett. **86**, 107 (2001).
- [145] Snoeijer J. H. and van Leeuwen J. M. J., *Force correlations in the q model for general q distributions*, Phys. Rev. E **65**, 051306 (2002).
- [146] Sollich P., *Fluctuation-dissipation relations in trap models*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 10807 (2003).
- [147] Sollich P., *Rheological constitutive equation for a model of soft glassy materials*, Phys. Rev. E **58**, 738 (1998).

- [148] Sollich P., Fielding S. and Mayer P., *Fluctuation-dissipation relations and effective temperatures in simple non-mean-field systems*, J. Phys. Cond. Mat. **14**, 1683 (2002).
- [149] Sollich P., Lequeux F., Hebraud P. and Cates M., *Rheology of soft glassy materials*, Phys. Rev. Lett. **70** 2020 (1997).
- [150] Stariolo D. A., *Dynamic ultrametricity in finite-dimensional spin glasses*, Europhys. Lett. **55**, 726 (2001).
- [151] Stariolo D. A., Montemurro M. A. and Tamarit F. A., *Aging dynamics of +/- J Edwards-Anderson spin glasses*, Eur. Phys. J. B **32**, 361 (2003).
- [152] Stillinger F. H., *A topographic view of supercooled liquids and glass formation*, Science **267**, 1935 (1995).
- [153] Stillinger F. H. and Weber T. A., *Hidden structures in liquids*, Phys. Rev. A **25**, 978 (1982).
- [154] Struick L. C. E., *Physical Aging in Amorphous Polymers and Other Materials*, Houston : Elsevier (1978).
- [155] Toninelli C., Biroli G. and Fisher D. S., *Spatial structures and dynamics of kinetically constrained models for glasses*, parution électronique : <http://arXiv.org/condmat/0306746>, (2003).
- [156] Tool A. Q., *Relation between inelastic deformability and thermal expansion of glass in its annealing range*, J. Am. Ceram. Soc. **29**, 240 (1946).
- [157] Viasnoff V. and Lequeux F., *Rejuvenation and overaging in a colloidal glass under shear*, Phys. Rev. Lett. **89**, 065701 (2002).
- [158] Vincent E., Bouchaud J.-P., Dean D. S., and Hammann J., *Aging in spin-glasses as a random walk - effect of a magnetic field*, Phys. Rev. B **52**, 1050 (1995).
- [159] Vincent E., Hammann J., Ocio M., Bouchaud J.-P. and Cugliandolo L. F., *Slow dynamics and aging in spin glasses*, in *Complex behaviour of glassy systems*, Proceedings of the XIV Sitges Conference, edited by Rubi E., Berlin : Springer (1996).
- [160] Weeks E. R., Crocker J. C., Levitt A. C., Schofield A. and Weitz D. A., *Three-dimensional direct imaging of structural relaxation near the colloidal glass transition*, Science **287**, 627 (2000).
- [161] Yoshino H., Hukushima K. and Takayama H., *Relaxational modes and aging in the Glauber dynamics of the Sherrington-Kirkpatrick model*, Prog. Theor. Phys. Suppl. **126**, 107 (1997).