



**HAL**  
open science

# Etude de modeles dynamiques pour la transition vitreuse

Clément Touya

► **To cite this version:**

Clément Touya. Etude de modeles dynamiques pour la transition vitreuse. Physique mathématique [math-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2009. Français. NNT: . tel-00550224

**HAL Id: tel-00550224**

**<https://theses.hal.science/tel-00550224>**

Submitted on 26 Dec 2010

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

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



Université  
de Toulouse

# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Université Toulouse III - Paul Sabatier  
Discipline ou spécialité : *Physique*

---

Présentée et soutenue par *Clément Touya*  
Le 12 Octobre 2009

Titre :

***Etude de modèles dynamiques pour la transition Vitreuse***

---

### JURY

<i>Alain Comtet</i>	<i>Président</i>
<i>Alain Barrat</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Jean-Philippe Bouchaud</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Christoph Meier</i>	
<i>David Dean</i>	<i>Directeur de thèse</i>
<i>Clément Sire</i>	<i>Invité</i>

---

**Ecole doctorale :** *Science de la Matière*  
**Unité de recherche :** *Laboratoire de Physique Théorique*  
**Directeur(s) de Thèse :** *David Dean*  
**Rapporteurs :** *Alain Barrat & Jean-Philippe Bouchaud*



*Ég gaf ykkur von sem varð aðvonbrigðum... Þetta er ágætis byrjun...*

**Sigur Rós**



# Remerciements

Le travail d'une thèse ne se limite pas aux longues heures passées derrière un écran d'ordinateur, ou à celles passées la craie à la main, des traces blanches sur les habits, devant un tableau noir. En effet, tout a commencé bien avant ces trois années, bien avant le début de mes études à l'université, mais bien le jour où pour la première fois, je me suis posé de véritables questions sur le monde qui nous entoure. Durant toutes ces années, de nombreuses personnes, consciemment ou non, m'ont apporté leur indispensable soutien, leur confiance et leur chaleur humaine et il est évident que sans elles, ce manuscrit n'existerait pas. Ces quelques lignes sont là pour les remercier et leur exprimer toute ma gratitude.

Merci à tous, si je vous ai oubliés ici, je ne vous ai pas oubliés dans mon coeur.

Durant ma thèse, deux personnes se sont succédées au poste de directeur du Laboratoire de Physique Théorique. Je tiens à les remercier toutes deux, Didier Poilblanc tout d'abord, pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire, Clément Sire ensuite, pour avoir su gérer le labo d'une main de maître, tout en y apportant un supplément d'âme. Je tiens ici à exprimer tout le respect, tant sur le plan scientifique que personnel, et la gratitude que j'éprouve à l'égard de mon directeur de thèse David Dean. Il a su me donner une grande liberté, tout en me recadrant quand cela s'avérait nécessaire. Grâce à lui, j'ai appris énormément, et j'espère en apprendre encore beaucoup. Je tiens aussi à remercier tous les membres du jury, qui ont pris de leur précieux temps pour lire ma thèse, pourtant parsemée de fautes d'orthographe (encore désolé). Tout d'abord, Alain Comtet, qui a accepté de présider mon jury et qui a fait preuve de beaucoup de gentillesse et de patience. Ensuite, Alain Barrat et Jean-Philippe Bouchaud, qui ont eu la lourde tâche d'être rapporteurs de cette thèse, encore merci. Je remercie aussi Christoph Meier pour ses remarques et son soutien, je me souviens encore qu'il m'a initié aux plaisirs de la recherche et je le remercie encore pour cela. Je voudrais remercier Clément Sire d'avoir accepté d'être dans mon jury, travailler avec lui a été un réel plaisir, sa bonne humeur et son savoir faire en font un collaborateur exceptionnel. Enfin, je voudrais remercier encore une fois les deux Alain, pour leurs corrections éclairées de ce manuscrit, sans votre aide massive, il serait encore rempli de fautes d'orthographe, et s'il en reste (je n'en doute pas), je m'en excuse auprès du lecteur<sup>1</sup>.

Pour finir, je voudrais remercier toutes les personnes que j'ai côtoyées au sein de l'institut et qui ont fait de ces trois années de travail un réel bonheur. Tout d'abord, Sylvia Scaldaferrò Miralles et Gisèle Dedieu, sans qui je me serais égaré de nombreuses fois dans les dédales la-

---

<sup>1</sup>De ce point de vue, cette thèse illustre bien le concept de transition vitreuse. En effet, le temps de relaxation pour atteindre le zéro fautes me semble clairement diverger !

---

byrinthiques administratifs (Amadeus me hante encore) qui peuvent graviter parfois autour du travail de thèse. Sylvia, mille mercis, tu as vraiment été d'un grand secours. Je tiens aussi à assurer Nicolas Elefantis de toute ma gratitude pour sa gentillesse et l'aide qu'il a pu m'apporter. Je voudrais aussi remercier Sandrine Le Magoarou qui a toujours été là pour m'aider, que ce soit pour des soucis informatiques, pour m'écouter quand j'ai eu des problèmes ou pour me donner des conseils. Je te remercie pour toutes ces poses café/thé, mais surtout pour avoir supporté toutes mes frasques, ainsi que celles de Ludovic. Sandrine merci beaucoup, tu vas beaucoup me manquer dans le froid germanique. Enfin, je finirai par remercier tous ces gens qui sont devenus à mon sens bien plus que des collègues, et plus particulièrement mon homonyme Clément<sup>2</sup>, David, Matthieu "Stringer Bell" Mambrini, Fabien, Sylvain et Olivier pour le LPT, et Fabienne Alary (tes goûts musicaux égalent presque ta fantastique gentillesse et joie de vivre), Michel Caffarel (une personne au grand cœur), Caroline, Nicolas Suaud, Alberto Beswick (pour son soutien durant mes études et tout ce qu'il m'a appris), Jean-Philippe Champeau (pour les bons moments passés en TP), Béatrice, Valérie et Aziz pour l'IRSAMC.

Je voudrais maintenant remercier les personnes qui, plus que quiconque, sont responsables de "l'homme" que je suis devenu aujourd'hui, je parle bien sûr de mes parents. Il est évident que sans eux, cette thèse n'existerait pas car ils m'ont apporté un soutien matériel et moral constant durant mes études. Cependant, au delà de ces considérations, je leur suis surtout reconnaissant pour l'éducation et l'amour qu'ils ont su m'apporter, et c'est pourquoi cette thèse leur est en partie dédiée. A mon père Albert, je voudrais tout simplement te dire que je t'aime et que j'espère que tu réalises le rôle important que tu as joué, et joues encore, dans tout ce que j'ai pu réaliser, merci pour tout papa. A ma mère Agnès, je voudrais que tu saches que, même si je suis ronchon et pas toujours disponible au téléphone, tu es toujours dans mon cœur, même loin en Allemagne. Maman, je t'aime et encore merci pour tout. Ceci m'amène maintenant à remercier mon frère Guillaume pour son soutien, et tous les bons moments passés ensemble pendant notre jeunesse, Guillaume je t'aime. Au passage, je voudrais remercier Caroline pour s'occuper si bien de lui, et de moi quand je suis dans les parages! Je voudrais aussi remercier mes grands-parents et plus spécialement Paul mon grand-père, qui nous a quitté quelque temps avant la fin de cette thèse, elle t'est aussi dédiée. Je sais que tu étais très fier de moi, tu me manques énormément. Je tiens à remercier mes cousins et cousines, Manu, Elise (avec Nans), Anne (ainsi que Ludo et ses petits bouts de choux Colin et Fleur) et Anaïs, ainsi que mes oncles et tantes Marie-Jo, Jean-Paul, Marie et Robert. Bref, de manière générale, je remercie toute ma famille.

Durant ces trois années et ma vie en général, j'ai eu le plaisir de rencontrer de nombreuses personnes formidables que je suis fier de compter comme amis, ces quelques lignes sont là pour les remercier. Tout d'abord, les potes du Labo, et plus précisément Thomas "Pépoune Garcia" Portet (J'espère bien pouvoir manger quelques sandwiches devant un bon TBBT, avec toi, une fois encore...), Fabien "ftroussel" Trouselet (les McDOs n'ont plus le même goût sans toi!), Gaspard "de la nuit" Bousquet (tu m'as cruellement manqué durant cette dernière année de thèse), Ludovic "justificateur" Arnaud, Benoît, Lorand, Vincent, Sylvain, Andreas, les Juliens (Baglio et Sopik), Cyril "LPT", Sebastien et sans oublier le grand maître de cérémonie Grenoblois Arnaud Ralko! Merci à tous les gars, vous avez contribué à rendre cette thèse vraiment fun! Au delà du labo, il y a aussi quelques amis proches que j'aimerais remercier : Il s'agit de David (Tu me manques gars, et ça va pas s'arranger maintenant que je suis en Allemagne), Ghyslain "Régis" Protoy (vivement l'album de Teg, ah Dual... Try to keep it safe mon pote,

---

<sup>2</sup>Seule personne à être remerciée trois fois dans cette thèse, chapeau bas!

---

tu vas me manquer), Laure(ita), Julien Soum, Aurore, Sylvain “Vital” (viens me voir à Dresde stp!), Loric (je ne pense pas que tu réalises à quel point notre amitié est importante pour moi) et pour finir Ludovic. Mon pote, je ne sais comment te remercier, ta culture et ton intuition scientifique m’ont toujours impressionné, et je te suis reconnaissant pour toutes ces discussions sur les sciences et la physique en particulier (même si récemment elles se sont un peu taries). Mais ce dont je te suis le plus reconnaissant, c’est de ton amitié, mon pote je t’aime et je ne doute pas que tu trouveras ta place dans le monde de la recherche et j’espère bien que dans un futur pas si éloigné, nous travaillerons ensemble!

Il me reste maintenant une dernière personne à remercier, il s’agit bien sûr de la plus importante, la femme que j’aime, Lisa Haslmair. Durant cette dernière année, tu as toujours été là pour me soutenir, me remonter le moral et me remplir de joie. A ce sujet, je voudrais en profiter pour remercier ta famille, Walter, Maria, Valentin et Moritz, pour m’avoir accueilli dans ta vie si gentiment et m’avoir accepté si rapidement. Lisa, tu as une famille formidable! Bien plus que cette thèse, te trouver est la chose la plus importante qui me soit arrivée dans ma vie. Cette thèse t’est donc aussi dédiée, ich liebe dich Lisa.

Pour conclure cette séquence émotion, je voudrais aussi remercier dans le désordre :

David Lynch, Bob Dylan, Nate Fisher (repose en paix), Jerry Cornelius, Teg (et plus particulièrement Dual...), Paul Muad’ib, Sam Beckett, Wes Anderson, l’agent Dale Cooper, Phil Elverum, Terry Pratchett, Bret et Jemaine, Hayao Miyazaki, McNulty et Omar little, Michael Moorcock, Michael Scott, Jim et Pam, Philip J. Fry, Franck Herbert, le vin et la bière, Brother Justin, Poppu, Stephen Malkmus, Jónsi, Jorge Cham, les Guignols, Landau, Scout, Stanley Kubrick, Arcade Fire, Albert Einstein,  $\pi$ , les frères Cohen, Carlton Cuse et Damon Lindelof, Fritz Leiber et son Souricier Gris, Quentin Tarantino, les mangas, Joss Whedon (you can’t take the sky from me), la fonction exponentielle et plus généralement les fonctions qui ont le bon goût de s’intégrer facilement, Sangoku, Dan Simmons et le Gritche, Internet, HBO, Katherine Kurtz et Camber MacRorie, Warhammer et les panachés, les livres, XKCD, Coppola, Tolkien, les Robin des Bois, les Pixies, les dessins animés que je regardais petit, Tardi, la pizza, Toulouse, Groland, les Nuls et tous ceux qui m’ont marqué et que j’oublie ici...

\* \*  
\*



# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>3</b>
<b>I Introduction</b>	<b>11</b>
1 Phénoménologie de la transition vitreuse . . . . .	12
1.1 Généralités sur l'état vitreux . . . . .	12
1.2 La transition vitreuse . . . . .	15
2 Etudes théoriques de l'état vitreux . . . . .	17
2.1 La théorie de Adam et Gibbs . . . . .	18
2.2 La théorie de couplage de modes . . . . .	19
3 Plan de Thèse . . . . .	21
<b>II Milieux désordonnés &amp; modèle de pièges</b>	<b>23</b>
1 Diffusion dans un milieu désordonné . . . . .	25
1.1 Problème du potentiel aléatoire . . . . .	26
1.2 Problème de la diffusivité aléatoire . . . . .	30
1.3 Lien formel entre ces deux problèmes . . . . .	30
1.4 Méthodes numériques . . . . .	32
2 Modèle de pièges . . . . .	34
2.1 Description du modèle . . . . .	34
2.2 Mise en évidence d'une transition . . . . .	37
2.3 Calcul de l'exposant anormal . . . . .	37
2.3.a Cas recuit . . . . .	39
2.3.b Cas trempé . . . . .	39
3 Résultats importants pour les milieux désordonnés . . . . .	40
3.1 Résultats à une dimension . . . . .	41
3.1.a Calcul de la constante de diffusion . . . . .	41
3.1.b Application au modèle Gaussien . . . . .	42
3.2 Résultats à deux dimensions . . . . .	42
3.2.a Calcul de la constante de diffusion . . . . .	42
3.2.b Application au modèle Gaussien . . . . .	43
4 Conclusion . . . . .	44
<b>III Potentiel aléatoire Gaussien au carré</b>	<b>45</b>
1 Le modèle étudié . . . . .	45
1.1 Motivations physiques . . . . .	46

# TABLE DES MATIÈRES

---

1.2	Le champ Gaussien . . . . .	47
2	Mise en évidence d'une transition vitreuse . . . . .	49
2.1	Résultats analytiques . . . . .	49
2.1.a	Cas où $\phi$ est purement Gaussien . . . . .	49
2.1.b	Cas où $N$ est fini . . . . .	50
2.2	Études numériques . . . . .	53
2.2.a	Importance des corrections en faible dimension . . . . .	53
2.2.b	Cas recuit . . . . .	55
2.2.c	Cas trempé . . . . .	56
2.2.d	Résultats . . . . .	57
3	Étude de la phase basse température . . . . .	58
3.1	Temps de premier passage . . . . .	59
3.2	Modèle de pièges . . . . .	63
3.3	Résultats numériques . . . . .	64
4	Conclusion . . . . .	66
<b>IV Potentiel non-Gaussien généralisé</b>		<b>67</b>
1	Méthodes perturbatives . . . . .	69
1.1	Méthode diagrammatique pour un faible désordre . . . . .	69
1.1.a	La méthode . . . . .	69
1.1.b	Application au cas Gaussien . . . . .	70
1.2	Groupe de renormalisation . . . . .	71
1.2.a	Idée générale . . . . .	71
1.2.b	Application aux milieux aléatoires . . . . .	73
2	Le groupe de renormalisation auto-similaire . . . . .	76
2.1	Établissement de l'équation du flot . . . . .	76
2.2	Calcul de la constante de diffusion . . . . .	79
3	Cas spéciaux et discussions . . . . .	80
3.1	Le cas purement Gaussien . . . . .	80
3.2	Mise en évidence d'une transition . . . . .	81
4	Simulations numériques . . . . .	85
5	Conclusion et discussion . . . . .	88
<b>V Dipôles dans un champ électrique aléatoire</b>		<b>93</b>
1	Modélisation du problème . . . . .	94
2	Limite adiabatique et haute température . . . . .	96
2.1	Équation de Langevin effective . . . . .	96
2.2	Approximation à haute température . . . . .	98
3	Résultat analytique en dimension une . . . . .	100
4	Simulations numériques . . . . .	102
4.1	Méthodes utilisées . . . . .	102
4.2	Résultats numériques . . . . .	104
5	conclusion . . . . .	107
<b>Conclusion</b>		<b>109</b>
<b>A Dérivation de l'équation de Langevin effective</b>		<b>111</b>
<b>B Dynamical transition for a particle in a squared Gaussian potential</b>		<b>117</b>

C Self Similar Renormalization Group Applied to Diffusion in non- Gaussian Potentials	135
D Dipole diffusion in a random electrical potential	151
Bibliographie	167
Index	173



## Introduction

*I am enough of an artist to draw freely upon my imagination. Imagination is more important than knowledge. Knowledge is limited. Imagination encircles the world.*

**Albert Einstein**

La raison d'être du physicien est la curiosité, curiosité de tout ce qui nous entoure, curiosité qui nous pousse à vouloir comprendre pourquoi. Pourquoi on ne traverse pas la chaise quand on s'assoit alors que la matière est principalement constituée de vide, pourquoi deux corps en chute libre ont la même accélération, pourquoi en électromagnétisme la charge est toujours conservée, pourquoi le contenu d'une tasse de café qui vient de se répandre au sol ne va jamais réintégrer spontanément la tasse, etc... Toutes ces questions et bien d'autres, les physiciens de tous temps se les sont posées, et, au fil des siècles, ils ont pu apporter de nombreuses réponses plus ou moins satisfaisantes. Par exemple, nous ne traversons pas la chaise car nous sommes repoussés par une force engendrée par le principe d'exclusion de Pauli, deux corps en chute libre ont la même accélération car le principe d'équivalence stipule que la masse grave est égale à la masse inertielle, la conservation de la charge est imposée par une symétrie de la nature notée  $U(1)$ , qui correspond à une transformation locale de la phase, ou enfin, comme dans un système fermé, l'entropie ne peut qu'augmenter, sans ajout d'énergie extérieure, le café ne pourra jamais réintégrer la tasse car cela diminuerait l'entropie. Ainsi, le physicien est devenu un façonneur de paradigmes qui vont lui permettre de développer ses théories pour expliquer les phénomènes qui l'entourent. Le choix et la complexité du paradigme utilisé est alors dicté par la physique que l'on veut étudier. Il est, par exemple, plus efficace de décrire une partie de billard en utilisant la théorie de Newton, qu'en utilisant la relativité générale, que l'on peut pourtant considérer comme un paradigme plus fondamental, mais qui n'est cependant pas adaptée pour décrire ce phénomène. Lorsque l'on veut par contre étudier la structure et le comportement de l'univers à grande échelle, la relativité générale est alors toute désignée. Cette collection de savoir fonctionne alors comme un château de cartes, on s'appuie sur les cartes posées par ses prédécesseurs pour s'élever toujours plus haut dans la connaissance. Bien qu'il faille parfois, pour avancer, souffler les fondations pour en poser de nouvelles, plus solides, comme le fit Einstein en 1905. Ainsi, de nos jours, le château est presque complet et la connaissance de l'homme n'a jamais été aussi vaste. Il existe cependant quelques points encore obscurs dans la physique moderne. Par exemple, nous ne savons pas encore décrire de façon satisfaisante les premiers

instants de l'univers ou bien, ce qui se passe *au delà* de la singularité d'un trou noir. Dans un autre registre, la supraconductivité à haute température critique n'est toujours pas comprise, et le processus de mesure en mécanique quantique reste lui aussi encore mystérieux, la réduction du paquet d'onde étant peu satisfaisante pour de nombreux physiciens. Sans avoir besoin de s'attaquer à des questions aussi fondamentales, il existe dans la physique moderne, des problèmes, plus modestes, mais qui restent tout à fait intéressants, dont une solution pleinement satisfaisante nous échappe encore. Il y en a un qui va alors nous intéresser plus particulièrement. Quelle est la nature de la *transition vitreuse*? Aussi surprenant que cela puisse paraître, bien que l'on sache fabriquer le verre, qui constitue la manifestation la plus évidente de ce phénomène, depuis plus de 5 000 ans<sup>1</sup> et que celui-ci existe à l'état naturel depuis toujours, nous ne possédons aucun cadre théorique pleinement satisfaisant pour la transition vitreuse. Plusieurs problèmes sont responsables de cet état de fait. Tout d'abord, contrairement à une transition de phase ordinaire pour laquelle on peut définir un paramètre d'ordre, ce n'est pas le cas pour la transition vitreuse, et les mécanismes l'entraînant ne sont pas encore clairement identifiés. Ensuite, cette transition n'est pas une vraie transition thermodynamique, car il a été montré que les propriétés de l'état vitreux vont fortement dépendre de la façon dont il a été produit. Enfin, ses caractéristiques vont dépendre du temps, et l'état vitreux va exhiber des propriétés de vieillissement typiques d'un milieu hors équilibre.

C'est donc dans cette optique que va s'inscrire ce travail de thèse. Ainsi, comme le titre le laisse entendre, tout au long de ce manuscrit, il va être question de l'étude de la dynamique de *modèles* dans le but de comprendre et d'appréhender un peu mieux le concept de *transition vitreuse*. Nous allons donc, dans ce chapitre introductif, dans un premier temps, dresser le portrait de la transition vitreuse pour essayer de mieux la comprendre. Puis dans une deuxième partie, nous nous pencherons sur quelques cadres théoriques existants pour décrire les liquides vitreux et leur formation, en mettant l'accent sur la théorie de couplage de modes. Enfin, nous tracerons le plan de cette thèse et éclaircirons un peu ce que nous entendons par *modèles dynamiques*.

# 1 Phénoménologie de la transition vitreuse

## 1.1 Généralités sur l'état vitreux

La plupart des liquides, s'ils sont refroidis ou de manière équivalente compressés, se transforment en solide. Ce changement se fait via une transition de phase du premier ordre qui est caractérisée par la discontinuité de certaines quantités thermodynamiques comme l'énergie. Le solide obtenu est alors un objet cristallin qui possède un ordre à longue portée absent de la phase liquide, et c'est l'apparition de cet ordre qui crée la discontinuité à la transition. Les mécanismes de formation de cet état cristallin sont alors considérés comme triviaux, lorsque l'on refroidit le liquide jusqu'à sa température de fusion, le système va cristalliser car l'énergie libre de l'état cristallin devient plus basse que celle de l'état liquide. Cependant, cette transformation n'est pas la seule possible, et pour certains matériaux, il est même presque impossible de retrouver l'état cristallin. Le liquide « évite » alors l'état cristallin et se transforme en un solide amorphe que l'on nomme verre, c'est la transition vitreuse. Cette transition, contrairement à la transition liquide/solide, ne s'accompagne d'aucune discontinuité des variables thermodynamiques classiques. Cet état de la matière étrange existe pour de nombreux composants comme les silicates (qui donnent le verre que l'on connaît bien), mais aussi certains céramiques, po-

---

<sup>1</sup>Les premiers verres fabriqués par l'Homme sont originaires de Mésopotamie, de Syrie ou d'Égypte.

lymères, colloïdes, et même des métaux amorphes. Pourtant le concept d'état vitreux va bien au delà de ces exemples de formation de verre à partir de liquide. En effet, on le retrouve aussi dans des systèmes physiques complètement différents comme les verres de spins [1], ou les empilements granulaires [2]. Il est alors possible de relier les systèmes de verres de spin, qui correspondent à des substances magnétiques dans lesquelles, les interactions entre les spins sont aléatoires et peuvent être positives (ferromagnétiques), ou négatives (antiferromagnétiques), à des problèmes de complexité et de biologie [3]. La problématique de la transition vitreuse, et les questionnements qu'elle suscite, vont donc bien au delà du monde du physicien, pour s'étendre à de nombreux domaines connexes. Nous allons cependant nous restreindre principalement au paradigme des liquides qui possèdent une transition vitreuse, bien que nous ferons référence de temps en temps aux systèmes de verres de spins.

Mais quelles sont les caractéristiques de l'état vitreux? Nous avons déjà précisé que la transition vitreuse n'était pas une vraie transition thermodynamique, le verre ne peut donc pas être un solide conventionnel. Cependant, d'un point de vue mécanique, celui-ci possède toutes les propriétés d'un solide. En effet, si on applique une force infinitésimale sur le verre, il répondra par une force opposée, qui tend à le replacer dans sa position initiale, ce qui est exactement le comportement d'un solide. Un liquide quant à lui, dans les mêmes conditions, va s'écouler dans le plan transverse à la force. Pourtant, le verre est un milieu amorphe et désordonné, et ainsi, contrairement au solide cristallin qui possède un ordre à longue portée, le verre n'en possède pas. Sa fonction de corrélation spatiale va alors décroître exponentiellement avec la distance, ce qui correspond exactement au comportement d'un liquide. Ainsi, le verre

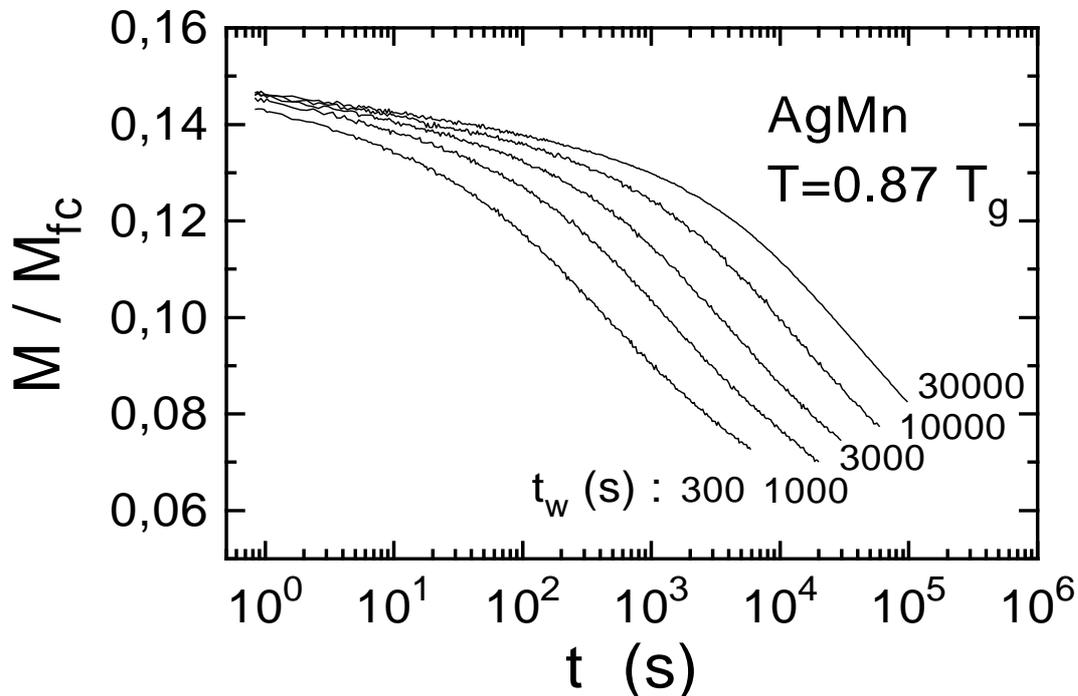


FIG. I.1 – Valeur expérimentale de la magnétisation Thermo-rémanente normalisée en fonction du temps pour des échantillons de  $AgMn_{2.6\%}$ , dans la phase vitreuse, pour différentes valeurs de  $t_w$  [4].

est un état de la matière étrange qui partage certaines propriétés avec le solide, d'autres avec le

liquide mais qui va avoir aussi des propriétés tout à fait uniques qui vont être reliées à la nature même de la transition vitreuse. Par exemple, le temps d'évolution d'un système vitreux est grand, très grand, tellement grand qu'il dépasse le temps d'observation typique d'une mesure durant une expérience, il dépasse même toutes échelles humaines et historiques ! Il est alors clair que l'idée reçue selon laquelle les vitraux des églises coulent est totalement fautive. Les propriétés physiques du verre nous semblent donc tout à fait stationnaires, il s'agit alors en fait d'un système hors équilibre dans le plus pur sens du terme. Contrairement à un régime transitoire, certes hors équilibre, mais qui est quasi-stationnaire, le verre peut se voir comme un système constamment hors équilibre, qui tend à se relaxer vers l'équilibre mais dont le temps de relaxation est si grand, qu'en pratique, l'équilibre n'est jamais atteint.

Ceci va alors entraîner de nombreuses propriétés dynamiques assez étranges, qui sont tout à fait génériques car observées dans de nombreux systèmes vitreux. Il existe un nombre important de résultats expérimentaux et théoriques sur le sujet, et par souci de clarté, nous allons en présenter quelques uns :

**Le vieillissement :** C'est une propriété essentielle des systèmes hors équilibre qui a été très étudiée [4–6]. En effet, dans un système à l'équilibre, quel que soit le moment, les propriétés physiques mesurables vont être inchangées, on dit que le système est alors invariant par translation dans le temps. En revanche, dans les systèmes hors équilibre comme le verre, cette symétrie est brisée, et les propriétés du système vont fortement dépendre de *l'histoire* et donc de l'âge de l'échantillon que l'on mesure. Plus un système est *vieux*, plus il se relaxe lentement, et si on définit un temps d'attente  $t_w$  avant de faire la mesure, on obtient différents résultats suivant la valeur de  $t_w$ . On peut voir par exemple sur la figure I.1, extraite de [4], des résultats expérimentaux pour du  $AgMn_{2.6\%}$  dans la phase vitreuse, pour lesquels la relaxation de la magnétisation Thermo-rémanente dépend fortement de l'âge de l'échantillon.

**Rajeunissement et effet mémoire :** Il a été montré expérimentalement, dans différents milieux vitreux tels que les verres de spins [7, 8], la présence de phénomènes dits de *rajeunissement* et de *mémoire*. Ainsi, si on refroidit un verre de spin à la température  $t_1$ , en dessous de sa température de vitrification  $T_g$ , et que l'on laisse le système reposer, comme nous l'avons vu, il va vieillir, entraînant ainsi la diminution de la susceptibilité  $\chi(\omega)$ , qui mesure la vitesse de relaxation du système. Si maintenant, on rediminue la température, au lieu de continuer à diminuer,  $\chi(\omega)$  va augmenter, corrigeant ainsi les effets de vieillissement, on parle alors de rajeunissement. Lorsque le rajeunissement est total, si on effectue le parcours inverse en réchauffant le système, au delà de sa température de vitrification, il est étonnant de constater qu'au moment où le système repasse à la température  $T_1$ ,  $\chi(\omega)$  subit une légère diminution par rapport à la valeur prévue. On parle alors d'effet mémoire. Sur la figure I.2, est représenté un résultat d'expérience extrait de [7] sur du  $CdCr_{1.7}In_{0.3}S_4$  dans lequel on distingue bien les effets de rajeunissement et de mémoire, qui nous montrent que les systèmes vitreux ne sont pas Markoviens. La dynamique à l'instant  $t$ , va dépendre fortement de tous les instants antérieurs.

Cette liste de phénomènes particuliers n'est bien sûr pas exhaustive, mais elle nous permet de bien sentir le caractère spécial de cet état de la matière et pourquoi les systèmes vitreux restent si compliqués à décrire dans un cadre théorique satisfaisant. Pour aller plus loin, nous allons maintenant essayer de comprendre ce qui se passe exactement lors de cette transition pour entraîner ce genre de comportement.

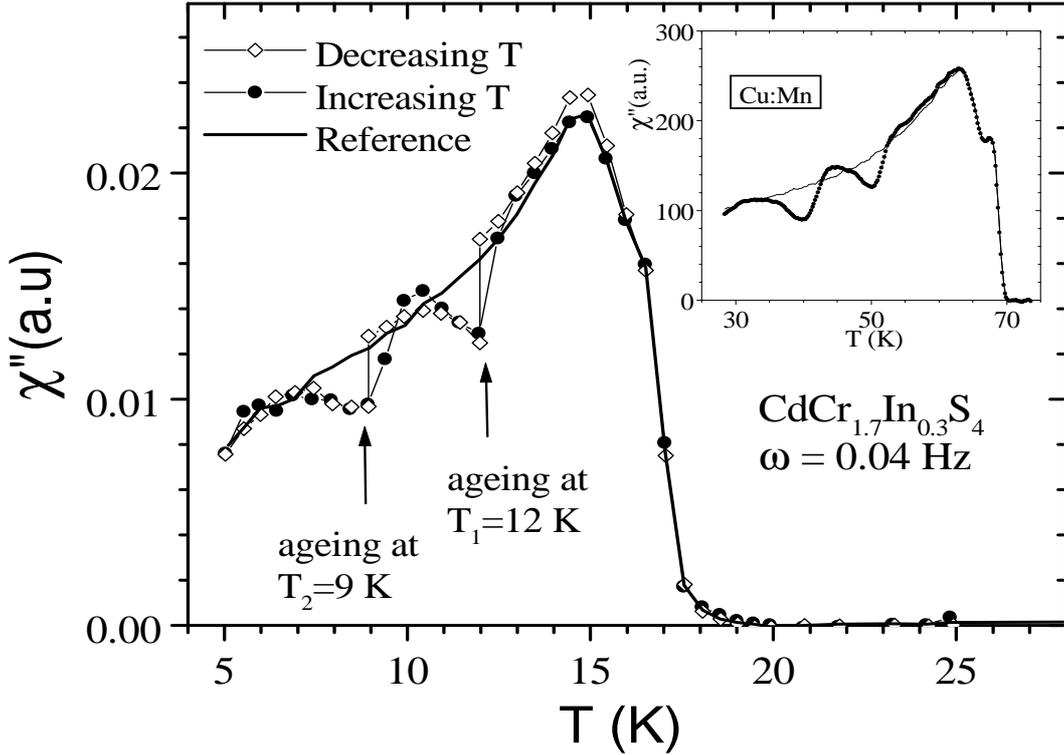


FIG. I.2 – Résultats expérimentaux pour le  $\text{CdCr}_{1.7}\text{In}_{0.3}\text{S}_4$ , qui met en évidence les effets de rajeunissement et de mémoire [7].

## 1.2 La transition vitreuse

Dans un liquide normal, le temps de relaxation  $\tau$ , après avoir imposé une petite contrainte, est de l'ordre de la picoseconde (ps), ce qui est plutôt rapide. Ceci est le reflet de la dynamique interne du liquide et on peut ainsi définir une échelle naturelle d'excitation du milieu de l'ordre du terahertz (THz). Sans surprise, lorsque l'on abaisse la température, le temps de relaxation du système augmente, car la dynamique se ralentit. Comme  $\tau$  est lié au mouvement des particules dans le liquide, on s'attend alors naïvement à ce que le temps de relaxation augmente en puissance de  $T$ . Cependant, si on étudie la dépendance en température de  $\tau$ , pour un grand nombre de systèmes vitreux, on se rend compte qu'elle est bien plus importante que celle attendue pour un liquide normal. Pour visualiser ce résultat, il est alors plus commode de l'exprimer en terme de viscosité du milieu  $\eta$ , qui est expérimentalement parlant bien plus simple à mesurer, et qui va avoir le même comportement que  $\tau$  avec la température. Ainsi, la viscosité croît ici extrêmement rapidement quand la température décroît pour atteindre des valeurs vertigineuses. Il est alors impossible de pousser plus loin les expériences car  $\tau$  devient plus grand que le temps expérimental. L'identification des mécanismes responsables de ce ralentissement extraordinaire de la dynamique, qui va alors donner lieu à tous les phénomènes discutés dans le paragraphe précédent, est alors un des plus grands défis du domaine. Nous verrons dans le prochain paragraphe, qu'il existe de nombreux cadres théoriques qui fonctionnent plutôt bien, cependant, aucun n'est capable de décrire tous les aspects de la dynamique. En raison des différences qui existent entre tous les liquides possédant une transition vitreuse (différences de composition chimique, d'énergie d'interaction,...), la forte augmentation mesurée de la viscosité, n'apparaît pas à la même échelle de température. Pour pouvoir alors comparer les résultats des différents composants, il est commode d'introduire une échelle de température réduite. Pour

cela, il nous faut, par convention, définir une température dite de transition vitreuse, que l'on note généralement  $T_g$ , pour chaque liquide. Elle correspond alors à la température à laquelle la viscosité vaut  $\eta(T = T_g) = 10^{13} P^2$ . Ce choix est tout à fait arbitraire, et il reflète le fait qu'une telle viscosité est équivalente à un temps de relaxation d'environ une minute, une échelle de temps plutôt pratique pour l'homme. Dans ces conditions, on peut mesurer la viscosité de différents liquides en fonction de  $T_g/T$ , et les résultats tirés des travaux de Angell et al. [9] sont reportés sur la figure I.3. Même après avoir défini une nouvelle échelle de température, les

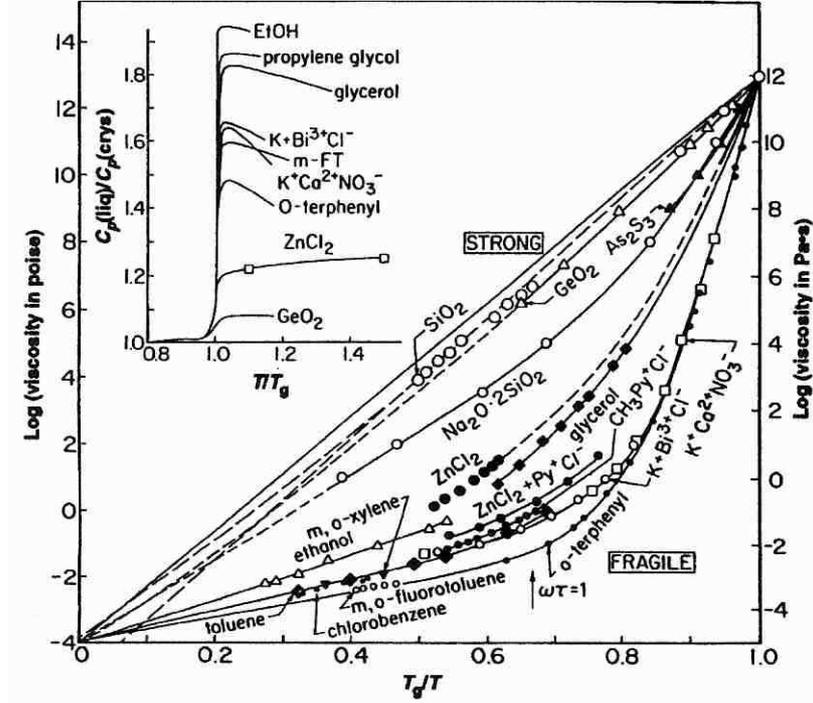


FIG. I.3 – Résultats expérimentaux pour la viscosité, en échelle logarithmique, de différents liquides possédant un comportement vitreux, en fonction de la température réduite  $T_g/T$ , extrait de [9].

courbes ne suivent pas une même tendance principale. Au lieu de cela, certains liquides comme le  $SiO_2$ , suivent une loi exponentielle pure aussi nommée loi d'Arrhénus, sur toute la gamme de température accessible expérimentalement, alors que d'autres montrent une courbure plus prononcée. On peut alors quantifier cette différence, et on dit que le verre est *fort*, quand il se comporte suivant une loi d'Arrhénus, et *fragile*, dans l'autre limite. Cette notion de fragilité n'a alors bien sûr aucun rapport avec les propriétés mécaniques du verre, mais tente de qualifier la dépendance des barrières d'énergie en  $T$ , qui sera faible pour un verre *fort* et inversement pour le verre *fragile*. Une forme populaire pour ajuster les données expérimentales comme celles présentées ici est alors donnée par la loi de Vogel-Fulcher-Tammann [10–12] (VFT) qui va s'écrire

$$\eta(T) = \eta_0 \exp\left(\frac{A}{T - T_0}\right). \quad (I.1)$$

Cette loi prédit ainsi une divergence de la viscosité à la température de Vogel,  $T = T_0$ , et suivant la valeur de  $T_0$ , on va passer d'un verre *fragile* à un verre *fort* quand  $T_0 \rightarrow 0$ . Cette loi

<sup>2</sup>l'unité utilisée ici est le Poise, défini comme  $1P = 10Pa.s$ .

est bien sûr empirique et elle n'est pas unique, elle a cependant le mérite de pouvoir s'ajuster sur la grande majorité des données expérimentales. Il est d'ailleurs très difficile de définir un cadre théorique qui permette de justifier l'utilisation de cette loi ou d'une autre, à quelques exceptions. Nous allons par exemple voir dans le paragraphe suivant que la théorie des couplages de modes permet de prédire une augmentation de la viscosité en puissance de  $T$ . Il est de plus intéressant de noter qu'il n'y a aucun signe, dans les résultats expérimentaux présentés sur la figure I.3, de discontinuité à la température de fusion du liquide, ce qui montre bien que le système évite la cristallisation.

A basse température, le mouvement des particules va avoir lieu sur différentes échelles de temps. Aux temps courts, elles vont se déplacer à l'intérieur de « cages » dans lesquelles elles sont confinées à cause de l'interaction avec les particules les plus proches. Ce mouvement va correspondre aux vibrations que pourrait subir un cristal. La dynamique qui donne lieu à la relaxation et qui correspond à des mouvements collectifs sur de grandes distances, va s'effectuer quant à elle, sur des échelles de temps beaucoup plus grandes. On peut alors réécrire l'entropie du système comme la somme de l'entropie due aux degrés de liberté rapides, qui va correspondre exactement à celle du cristal, et l'entropie due aux degrés de liberté lents, que l'on va qualifier de configurationnelle. La différence d'entropie entre le cristal et le verre est alors simplement donnée par cette entropie configurationnelle. Expérimentalement parlant, cette différence d'entropie  $\Delta S$ , si elle est normalisée par la valeur de la température de fusion  $T_m$ , va décroître rapidement avec la température, pour un verre fragile [13]. Il semble alors que l'entropie configurationnelle s'annule pour une valeur non nulle de la température que l'on qualifie dans la littérature de température de Kauzmann et qui se note  $T_K$ . Cependant, pour les verres dit forts,  $\Delta S$  va décroître beaucoup plus lentement et la valeur de  $T_K$  semble reléguée à 0. Les valeurs expérimentales de  $T_K$  sont alors très proches des valeurs de la température de Vogel  $T_0$ . Ces propriétés peuvent alors s'expliquer dans la théorie de Adam et Gibbs que nous allons présenter dans le prochain paragraphe. En dessous de  $T_K$ , l'entropie configurationnelle est donc nulle, cela signifie donc que le système n'a plus qu'un seul état accessible, qui va constituer un état vitreux *idéal*, le système ne peut plus s'écouler. En fait, on peut montrer que le paysage de l'énergie libre du système est très accidenté, et le nombre de minima locaux augmente exponentiellement avec le nombre de particules. Pour un système infini, à une température donnée, les barrières d'énergie séparant ces minima vont diverger, piègeant ainsi le système dans un seul état. Cependant, en dimension finie, les barrières resteront finies elles aussi, et le système ne sera jamais piégé dans un seul état, l'entropie configurationnelle n'est alors pas nulle.

## 2 Etudes théoriques de l'état vitreux

Maintenant que nous avons présenté les principales propriétés des liquides vitreux et de leurs transitions, nous allons nous pencher sur les approches théoriques qui existent pour comprendre ce ralentissement de la dynamique. Nous nous concentrerons uniquement sur les liquides vitreux, et les méthodes associées par exemple aux verres de spins, comme la théorie des répliques ou l'approche TAP ne seront pas explicitées ici, bien que nous évoquerons la méthode des répliques dans le chapitre 3. Nous pouvons alors définir deux types de modèles. Les premiers sont qualifiés de phénoménologiques, car ils émettent une supposition sur les mécanismes responsables de la dynamique particulière et en déduisent une expression pour le temps de relaxation qui s'accorde avec les expériences. Parmi ces modèles, on compte la théorie de Adam et Gibbs [14] que nous allons traiter dans le prochain paragraphe, le modèle de pièges de Bouchaud [15] que

nous allons traiter en détail dans le chapitre 2, mais aussi des théories comme celle du volume libre de Cohen et Turnbull [16]. Les seconds modèles ne présupposent aucun mécanisme, et la dynamique de relaxation est alors déduite d'approximations. L'intérêt de ces modèles est alors qu'ils permettent de comprendre le ralentissement de la dynamique sans aucune présupposition. Parmi ces approches, on compte par exemple, la théorie de Gibbs et Di Marzio [17] et la théorie des couplages de Modes pour la transition vitreuse [18] que nous allons présenter. Le nombre important de ces modèles montre bien la difficulté qui existe alors à appréhender la transition vitreuse, et comme nous nous bornons ici à introduire le domaine, nous ne présenterons brièvement que deux modèles qui vont mettre en évidence des résultats utiles pour la suite.

## 2.1 La théorie de Adam et Gibbs

Cette théorie appartient à la première catégorie, elle va donc reposer sur une supposition quant au mécanisme responsable du ralentissement de la dynamique. L'idée de base de Adam et Gibbs est qu'à basse température, la dynamique de relaxation est générée par des mouvements collectifs de particules dans des sous régions du système [14]. Dans cette théorie, la dynamique de relaxation de chaque sous région est alors considérée comme indépendante et il est possible de traiter chacune d'elles comme un système statistique indépendant. Le mouvement coopératif des particules dans une sous région va alors permettre au sous système de relaxer. On peut montrer que la probabilité qu'un tel évènement ait lieu, pour un sous système de taille  $z$ , peut s'écrire

$$P(z, T) = A \exp(-\beta z \delta \mu). \quad (\text{I.2})$$

Où  $\beta$  correspond à l'inverse de la température absolue, et  $\delta \mu$  à la différence de potentiel chimique par particule, ce qui est alors équivalent à la barrière d'énergie, par particule, que doit franchir une configuration pour pouvoir relaxer.  $A$  est alors un simple préfacteur dépendant très faiblement de  $z$  et  $T$ . Si on calcule alors la probabilité moyenne de transition par particule, on trouve après quelques manipulations

$$\overline{P(T)} = \overline{A} \exp(-\beta z_* \delta \mu). \quad (\text{I.3})$$

Où  $z_*$  correspond au plus petit sous système qui autorise des mouvements coopératifs, que l'on peut calculer en l'exprimant grâce à l'entropie de configuration  $S_{conf}$ . Ainsi, en suivant l'idée de Goldstein [19] et les arguments présentés précédemment, quand nous avons défini la température de Kauzmann, à basse température, la dynamique des particules va se scinder en deux parties. Un mouvement rapide d'oscillation autour d'une position d'équilibre locale, et de grands mouvements d'ensemble, beaucoup plus rares. L'entropie devrait se scinder elle aussi en deux parties  $S = S_{crist} + S_{conf}$ . Ainsi, dans notre système, l'entropie configurationnelle devrait être proportionnelle à la densité de sous régions  $z_*$  à la température  $T$ , puisqu'elles sont responsables de la dynamique de relaxation. Alors, comme cette densité peut aussi s'exprimer comme  $\rho(z_*, T) = N/z_*$ , on obtient finalement

$$z_* \sim \frac{N}{S_{conf}}. \quad (\text{I.4})$$

Si on suppose alors que la probabilité moyenne de transition par particule est proportionnelle à la viscosité, alors on peut, en utilisant (I.4) dans (I.3), écrire

$$\eta(T) \propto \exp \left[ \frac{C}{T S_{conf}} \right]. \quad (\text{I.5})$$

Cette relation est connue sous le nom de la formule de Adam-Gibbs, elle est très intéressante car elle relie une quantité dynamique, la viscosité, à une quantité thermodynamique statique, l'entropie de configuration. Nous verrons dans le chapitre 4 que nous obtiendrons dans nos modèles, une relation similaire entre la constante de diffusion et l'excès d'entropie. Ainsi, à la température de Kauzmann,  $S_{conf}$  va s'annuler, entraînant une divergence de la viscosité et du temps de relaxation, comme dans un verre. On peut même aller plus loin, si on est capable d'extraire le comportement de  $S_{conf}$  en fonction de la température. Ainsi, il a été mesuré expérimentalement, du moins pour les verres fragiles, que  $S_{conf} = B(T_K^{-1} - T^{-1})$ , et dans ces conditions, (I.5) va se réduire à

$$\eta(T) \propto \exp \left[ \frac{\tilde{C}}{T - T_K} \right]. \quad (\text{I.6})$$

On retrouve alors la loi de VFT (I.1), introduite dans le paragraphe précédent pour interpréter les expériences sur les liquides vitreux. La température de Vogel  $T_0$  est ici strictement égale à la température de Kauzmann  $T_K$ . Cette théorie a alors le mérite, en émettant une supposition raisonnable sur les mécanismes responsables du ralentissement de la dynamique, de prédire une relation non triviale entre une quantité dynamique et une quantité statique. De plus, en s'appuyant sur des résultats expérimentaux, elle permet de retrouver la loi de VFT utilisée dans les expériences.

### 2.2 La théorie de couplage de modes

Dans le paragraphe précédent, nous avons présenté la théorie phénoménologique de Adam et Gibbs pour décrire la dynamique de relaxation des liquides vitreux. Pour cela, nous avons émis une hypothèse quant aux mécanismes responsables de cette dynamique, pour en déduire une formule dont les paramètres vont être extraits des expériences. Cependant, cette théorie ne permet de faire que des prédictions qualitatives qui sont peu nombreuses. Il serait alors intéressant d'avoir une théorie qui permette de faire des prédictions qualitatives que l'on puisse directement comparer avec les expériences. Malheureusement, comme nous l'avons vu précédemment, une théorie qui va ainsi prédire tous les phénomènes liés à la transition vitreuse n'existe pas encore à ce jour. Il existe néanmoins une théorie, non phénoménologique, qui permet de prédire qualitativement certains comportements, que l'on nomme la théorie des couplages de modes (MCT<sup>3</sup>) [18]. Le point de départ de cette théorie est de noter que, dans un système vitreux, les positions des particules vont évoluer très lentement avec le temps, elles vont donc constituer des variables lentes. On peut alors définir la densité des fluctuations pour un vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  comme

$$\delta\rho(\mathbf{q}, t) = \sum_{j=1}^N \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j(t)). \quad (\text{I.7})$$

Où  $\mathbf{r}_j(t)$  va correspondre à la position de la particule  $j$  au temps  $t$ . On peut alors définir la fonction de corrélation associée  $F(q, t)$  comme

$$F(q, t) = \frac{1}{N} \langle \delta\rho(\mathbf{q}, t) \delta\rho^*(\mathbf{q}, t) \rangle. \quad (\text{I.8})$$

---

<sup>3</sup>pour Mode Coupling theory

En utilisant le fait que la densité des fluctuations va être une variable lente, et le formalisme de projection d'opérateur de Zwanzig-Mori [20–22], on peut extraire une équation pour le corrélateur normalisé  $\Phi(q, t)$  défini par la relation

$$\Phi(q, t) = F(q, t)/F(q, 0). \quad (\text{I.9})$$

Ainsi, dans ce formalisme, et en appliquant l'approximation du couplage de modes, qui consiste à dire que les couplages entre les modes lents vont aussi être lents [18], on obtient l'équation intégro-différentielle d'évolution des corrélations suivante

$$\ddot{\Phi}(q, t) + \Omega_q^2 \Phi(q, t) + \Omega_q^2 \int_0^t (M^{reg}(q, t-t') + M(q, t-t')) \dot{\Phi}(q, t') dt' = 0. \quad (\text{I.10})$$

Où  $m$  correspond à la masse de la particule, et la fréquence au carré  $\Omega_q^2$  est donnée par  $\Omega_q^2 = q^2 k_B T / (mF(q, 0))$ . On a alors séparé la fonction de mémoire en deux parties,  $M^{reg}(q, t)$ , que l'on va qualifier de partie régulière et qui va décrire la dépendance en temps de  $\Phi(q, t)$  sur des temps très courts, et  $M(q, t)$ , qui va décrire la dynamique de relaxation aux temps longs. Dans le cas d'un fluide normal, seul  $M^{reg}(q, t)$  va survivre, et on peut alors en obtenir une description détaillée en résolvant la dynamique pour un fluide. Cela dit, ce problème reste très complexe, et comme première approximation, on peut considérer cette fonction comme étant Gaussienne en temps. Il nous reste alors à évaluer la fonction mémoire  $M(q, t)$ . Comme elle est responsable de la dynamique du système aux temps longs, elle doit être une fonction lentement décroissante. Ainsi, dans l'approximation des couplages de modes, la fonction mémoire va pouvoir s'écrire comme un produit bi-linéaire de fonctions de corrélation dont les coefficients peuvent se déduire de quantités statiques. Il vient alors

$$M(q, t) = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} V^{(2)}(q, k, |\mathbf{q} - \mathbf{k}|) \Phi(k, t) \Phi(|\mathbf{q} - \mathbf{k}|, t), \quad (\text{I.11})$$

où la fonction  $V^{(2)}$  va s'écrire

$$V^{(2)}(q, k, |\mathbf{q} - \mathbf{k}|) = \frac{n}{q^2} F(q, 0) F(k, 0) F(|\mathbf{q} - \mathbf{k}|, 0) \left( \frac{\mathbf{q}}{q} (\mathbf{k}c(k) + (\mathbf{q} - \mathbf{k})c(|\mathbf{q} - \mathbf{k}|)) \right)^2. \quad (\text{I.12})$$

Où  $c(k)$  est la fonction de corrélation directe  $c(k) = n(1 - 1/F(q, 0))$ , et  $n$  est simplement la densité de particules  $n = N/V$ . Ainsi, on appelle (I.10), (I.11) et (I.12), les équations de couplage de modes, et elles forment un système fermé que l'on peut résoudre. Le cœur de la théorie est alors la résolution de ces équations et l'interprétation physique des solutions obtenues. La présentation que l'on vient de faire est plus que succincte, car le développement rigoureux de ces équations, et leur résolution dépassent largement la place et le temps impartis pour cette thèse. Pour un développement rigoureux, on peut se référer à [18]. On peut montrer qu'il va exister une transition dans ce modèle pour une température critique  $T_c$ , en dessous de laquelle le système devient non ergodique et reste piégé dans une région de l'espace des phases, ce qui est typique d'un système vitreux. On peut aller plus loin et montrer que, lorsqu'on approche de  $T_c$  en diminuant la température, le temps de relaxation va augmenter comme une loi de puissance en  $T$

$$\tau(T) = C(T - T_c)^{-\alpha}. \quad (\text{I.13})$$

Cette relation est différente de la loi de VFT utilisée dans les expériences sur les verres, cela dit, elle fonctionne bien pour la plupart des résultats expérimentaux. On peut alors montrer

pour l'exposant  $\alpha$  est universel et tel que  $\alpha > 1$ . De plus, nous verrons dans le chapitre 4 que dans le modèle que nous étudierons, nous obtiendrons un comportement similaire.

### 3 Plan de Thèse

Dans ce chapitre introductif, nous avons brièvement présenté les problématiques de la transition vitreuse. Maintenant que nous avons une meilleure idée de ce qu'elle représente, et de quelles manières on peut aborder le problème théoriquement, nous allons nous orienter vers les travaux effectués pendant cette thèse sur le sujet, et qui sont présentés dans ce manuscrit. Comme nous l'avons signalé précédemment, cette thèse a pour but, l'étude de *modèles dynamiques* pour la transition vitreuse, il nous reste donc à définir ce que nous entendons par *modèles dynamiques*.

Le paradigme principal dans lequel nous allons nous placer est celui des milieux désordonnés. Il s'agit de milieux dans lesquels, le plus souvent, les interactions entre les particules vont être aléatoires, tirées d'une distribution quelconque. Ainsi, dans le chapitre 2, nous allons définir en détail ces modèles et nous montrerons en quoi ils peuvent constituer un paradigme, alternatif à ceux présentés ici, pour la transition vitreuse. Nous présenterons aussi un autre modèle phénoménologique pour la transition vitreuse, qui est le modèle de pièges de Bouchaud. Il va alors s'avérer être lié de près aux modèles désordonnés. Enfin, dans une troisième partie, nous dériverons quelques résultats importants, qui vont nous guider tout au long de ce manuscrit.

Dans le chapitre 3, nous nous concentrerons sur un modèle particulier. Il s'agira de l'étude de la diffusion d'une particule dans un potentiel aléatoire de statistique Gaussienne au carré, en dimension une. Nous allons alors montrer qu'il va exister une transition dynamique à une température non nulle  $T_c$  pour laquelle la constante de diffusion du milieu va s'annuler. Le système va alors passer d'un régime de diffusion normale à un régime de diffusion anormale avec un comportement sous diffusif. De plus nous allons mettre en évidence des effets de tailles finies dans la génération numérique du potentiel qui vont masquer la transition et engendrer à très basse température un comportement d'Arrhénius similaire à (I.1), pour des verres durs. Enfin, dans une dernière partie, nous étudierons la dynamique du système dans le régime sous diffusif, en utilisant un modèle de pièges.

Dans le chapitre 4, nous généraliserons le problème précédent en dimension  $D$ , et pour cela nous présenterons quelques méthodes de calcul perturbatives. Par un calcul de groupe de renormalisation auto-similaire, nous calculerons la constante de diffusion et montrerons que quelle que soit  $D$ , la transition va toujours exister à la même température  $T_C$ . De plus, à basse température, nous allons mettre en évidence une loi de VFT pour ce modèle où la température de Vogel  $T_0$  sera donnée par la température critique  $T_C$ . Comme dans le chapitre 3, ces résultats seront soutenus par des simulations numériques poussées. Nous obtiendrons enfin, en adaptant nos résultats à un modèle où le désordre n'est pas directement présent, une formule sensiblement similaire à celle de Adam Gibbs (I.5).

Enfin, dans le chapitre 5, nous nous pencherons sur un problème de dipôle diffusant dans un champ électrique aléatoire. Dans une limite dite adiabatique, ce modèle va se réduire alors au problème étudié dans les chapitres 3 et 4. Nous montrerons alors, par des calculs analytiques et des simulations numériques, qu'au delà de cette limite, la transition vitreuse en dimension une va survivre à la même température critique. De plus, nous explorerons numériquement la phase sous diffusive de ce système.

Nous allons donc mettre en évidence dans nos modèles, une transition dynamique en tous points similaire à la transition vitreuse. Ceci est très important car comme nous l'avons vu, il existe peu de modèles qui peuvent prédire une dynamique de ralentissement similaire à la transition vitreuse sans présupposition sur les mécanismes microscopiques qui en sont responsables. Ainsi, en démontrer l'existence dans les modèles *jouets* que nous allons présenter est un pas de plus vers une compréhension satisfaisante de la transition vitreuse.

\* \*  
\*

# Milieus désordonnés & modèle de pièges

*A process cannot be understood by stopping it. Understanding must move with the flow of the process, must join it and flow with it.*

-The First Law of Mentat-  
**Frank Herbert**

Au chapitre précédent, nous avons introduit la phénoménologie de la transition vitreuse dont nous avons décrit la dynamique grâce à la théorie de couplage de mode (MCT) [18]. Bien que les équations de la MCT peuvent être reliées à un problème de verre de spin, en champ moyen et dimension infinie, en présence d'un désordre *gelé* [23, 24], l'origine physique de cette théorie n'est pas très claire. Au vu de ces difficultés, il est alors naturel d'étudier des descriptions phénoménologiques alternatives pour la transition vitreuse, et dans cette thèse, nous allons explorer deux paradigmes qui nous le verrons, ne sont pas étrangers l'un à l'autre.

Le premier type de problèmes présenté est celui de particules évoluant dans des milieux désordonnés. L'aspect qui va nous intéresser plus particulièrement dans ce vaste sujet, est le calcul des propriétés de transport dans de tels milieux. Ces questions apparaissent fréquemment en physique de la matière condensée mais aussi dans d'autres sciences telles que l'ingénierie, l'hydrologie ou encore la pétrologie [25–31]. Ainsi, de par le grand panel d'applications possibles, développer des techniques pour calculer des quantités telles que la diffusivité, la mobilité, la conductivité ou la perméabilité effective, devient très important. La présence du désordre va alors modifier les propriétés de ces milieux, et par exemple, dans les zéolithes, le désordre modifie la diffusion de la réaction de certaines espèces chimiques et donc joue un rôle crucial dans la détermination de la cinétique de ces réactions [32].

Cela dit, l'importance de ces systèmes provient surtout du fait que ces milieux désordonnés peuvent servir de paradigme pour la transition vitreuse et pour le comprendre il faut se poser la question de la nature de ce désordre. L'idée est simple : pour un système en interaction suffisamment *complexe* et sans désordre, une particule va ressentir une interaction effective qui sera la somme des interactions avec toutes les autres particules. Comme les positions de ces particules vont fluctuer par agitation thermique, il vient naturellement qu'à une certaine échelle, on va pouvoir modéliser cette interaction par une force aléatoire. De plus, si le modèle est *frustré*, on peut montrer qu'au niveau champ moyen, il existe des modèles où cette analogie devient même exacte et on peut avoir deux modèles, l'un avec désordre et l'autre sans, mais très

frustré, qui exhibent le même comportement thermodynamique à haute température et la même transition vitreuse à basse température [33–35]. Même si le système frustré, non désordonné, possède un état fondamental cristallin qui n'est pas partagé par son pendant désordonné, en pratique, ce n'est pas important car cet état n'est dynamiquement jamais atteint.

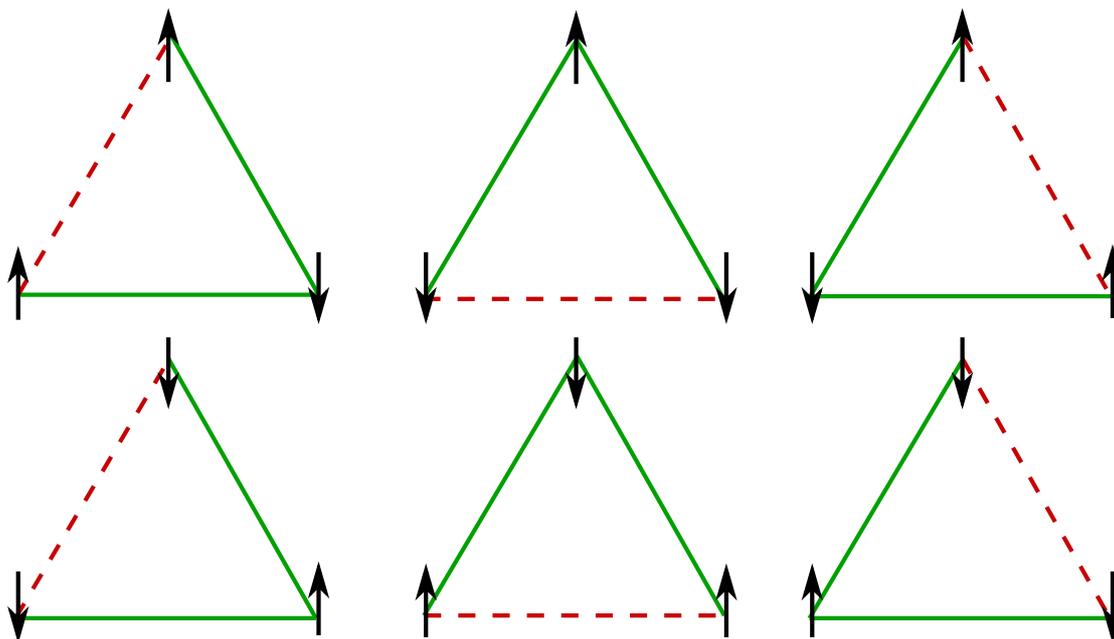


FIG. II.1 – Pour minimiser l'énergie, deux spins consécutifs veulent être en opposition. Le système est frustré car sur le réseau triangulaire, cette condition ne peut jamais être complètement remplie. Ceci entraîne ici la dégénérescence de l'état fondamental avec 6 états de même énergie, où les liens frustrés sont représentés par les lignes rouges brisées.

Il semble que la présence de frustration soit un ingrédient essentiel pour l'existence d'un état vitreux et pour le comprendre, il faut savoir ce que l'on entend exactement par frustration. Le terme fut introduit par Gérard Toulouse [36] en (1977) dans le cadre des systèmes de spins en matière condensée. Le système frustré le plus simple est sûrement celui du spin d'ising antiferromagnétique sur un réseau triangulaire (figure (II.1)), mais de manière générale, on parlera de frustration quand on ne pourra satisfaire totalement une ou des contraintes. Ainsi, le principal effet de la frustration est de complexifier le paysage de l'énergie libre en dégénéralisant l'état de plus basse énergie comme dans la figure (II.1) ou en créant un grand nombre d'états métastables, ce qui est exactement le cas, comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, pour les systèmes vitreux.

Dans cette thèse, nous allons étudier des systèmes désordonnés dans deux cas limites.

**Le désordre recuit :** Quand les fluctuations du milieu, dues aux autres particules, ont lieu sur des échelles de temps beaucoup plus courtes que la dynamique de la particule test, il est alors possible de construire un modèle Markovien pour en tenir compte. Dans cette limite, il vient alors que le désordre va dépendre du temps et à chaque instant, la valeur de la force aléatoire sera re-tirée de la distribution appropriée.

**Le désordre trempé :** A l'autre extrémité, si les fluctuations apparaissent sur des échelles de temps beaucoup plus grandes que la dynamique de la particule, alors le désordre va être indépendant du temps. On parle aussi dans ce cas d'un désordre *gelé* et des

corrélations spatiales non triviales, absentes de l'approximation recuite, vont apparaître. En effet, comme le désordre est indépendant du temps, si la particule arrive sur une position précédemment visitée, la force aléatoire ressentie sera la même, contrairement au cas recuit. La présence de ces corrélations va alors rendre les problèmes avec un désordre gelé plus difficiles à résoudre.

Ces deux limites sont bien sûr des cas idéalisés, cependant, l'approximation recuite semble bien fonctionner dans la plupart des cas. A basse température, comme les fluctuations deviennent plus lentes, on s'attend à ce que la limite appropriée soit l'approximation trempée, mais ceci ne devient vrai que à basse dimension ( $1D$  ou  $2D$ ), où les corrélations spatiales deviennent importantes<sup>1</sup>. Dans cette thèse, nous étudierons principalement des problèmes où le désordre sera gelé ; pour plus de détails sur les modèles recuits, le lecteur peut se référer à [37].

La deuxième description phénoménologique qui va nous intéresser dans cette thèse est celle d'un modèle de piège, premièrement introduit par Bouchaud [15]. On a vu précédemment, que le paysage de l'énergie d'un système désordonné est extrêmement accidenté, avec énormément de minima locaux qui correspondent, par exemple, dans le langage des verres de spin à des configurations métastables. Ces minima sont alors entourés de grandes barrières d'énergie et on s'attend à ce qu'ils agissent comme des pièges qui retiennent le système pendant un certain temps  $\tau$ . Dans ce modèle, le système va donc se comporter comme un marcheur aléatoire qui saute de piège en piège par activation thermique et dont la distribution de temps de résidence  $\tau$  va dépendre de celle des barrières d'énergie. Si la distribution de  $\tau$  décroît suffisamment lentement, comme une loi de puissance, alors il existe une température critique  $T_C$  en dessous de laquelle le système devient sous diffusif [15, 37, 38]. A température suffisamment basse, le temps de relaxation dépasse les échelles de temps expérimentales et des effets de vieillissement apparaissent, typiques des systèmes vitreux [5, 39], qui peuvent se comprendre dans le cadre de la théorie de couplage de modes [24]. Ce modèle à été beaucoup étudié et il existe toute une littérature sur le sujet [40–47] dont on présentera quelques résultats, dans ce chapitre, qui seront utiles tout au long de ce manuscrit.

## 1 Diffusion dans un milieu désordonné

Dans cette partie, on va donc étudier la diffusion de particules dans des milieux désordonnés où le désordre prendra la forme d'interactions aléatoires. Le champ de ce domaine est très vaste, cependant, on va principalement s'intéresser à une quantité significative qui caractérise le mouvement des particules, *la constante de diffusion à long temps*. Elle décrit le comportement asymptotique de la diffusion des particules et, tout au long de ce manuscrit, on la notera  $\kappa_e$ . En absence de désordre, pour une particule Brownienne, le résultat est bien connu depuis Einstein [48] et la constante de diffusion se déduit de l'écart quadratique moyen par la formule :

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle = 2D\kappa_0 t, \quad (\text{II.1})$$

où  $D$  est la dimension de l'espace et  $\kappa_0$  la constante de diffusion sans désordre. Cette formule, valide aux temps longs ( $t \rightarrow \infty$ ), n'est pas tout à fait exacte car il existe des termes correctifs dépendant de la dimensionalité du problème (voir chapitre 3).

Pour comprendre en quoi ces modèles peuvent correspondre à des modèles jouets pour la transition vitreuse, il faut savoir comment la présence du désordre va modifier les propriétés de

---

<sup>1</sup>Ceci sera explicité plus tard dans le chapitre.

diffusion du système. Si on considère une particule test interagissant avec les autres particules, alors, dans la phase liquide, on s'attend à ce que la particule ait une constante de diffusion non nulle  $\kappa_0$  (II.1). Si maintenant, la même particule diffuse dans un milieu trempé, où toutes les particules sont gelées dans une configuration quelconque, alors, il a été montré [49, 50] que la constante de diffusion va être modifiée, telle que  $\kappa_e < \kappa_0$ . Physiquement, cela se comprend facilement, car si les particules du milieu peuvent bouger, les pièges qui enferment la particule test vont disparaître sur une échelle de temps caractéristique et ainsi permettre à la particule test de diffuser plus rapidement que dans le cas trempé. Cependant, dans certains cas, la présence du désordre peut avoir des effets beaucoup plus importants et modifier les lois même de la diffusion. Alors, pour une valeur critique de l'intensité du désordre ou de la température, la dynamique va tellement se ralentir, que la constante de diffusion va s'annuler. On passe alors d'un régime dit *normal*, où l'écart quadratique moyen est linéaire en temps et est donné par une formule du type (II.1), à un régime dit *anormal* ou *sous-diffusif*. Dans ce régime, l'écart quadratique moyen est donné par :

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle \sim t^\nu, \quad (\text{II.2})$$

où l'exposant  $\nu$  est inférieur à 1. Si le système a une longueur de corrélation finie que l'on note  $l_0^2$ , alors, on peut le subdiviser en petits domaines de taille  $l_0$ , non corrélés les uns aux autres. Ainsi, la particule test va être piégée dans ces domaines pendant un temps qui en moyenne va être donné par la formule :

$$\tau \sim \frac{l_0^2}{\kappa_e}. \quad (\text{II.3})$$

$\tau$  est simplement le temps moyen mis par la particule pour parcourir la distance  $l_0$ . Ainsi, quand  $\kappa_e$  tend vers 0, le temps moyen pour s'échapper des pièges va diverger à la manière dont les échelles de temps divergent lors d'une transition vitreuse. On verra dans les chapitres suivants, que l'on peut même retrouver dans certains cas une loi du type Vogel-Fulcher-Tammann, que nous avons introduite au chapitre 1 pour interpréter les expériences sur les liquides vitreux.

Dans cette optique, nous allons étudier deux types de systèmes désordonnés. Dans un premier temps, le désordre se présentera sous la forme d'un champ aléatoire dans lequel la particule va diffuser. Le deuxième type de problème étudié dans cette thèse sera un système dans lequel c'est la diffusivité du milieu même qui sera aléatoire et dépendra de la position.

## 1.1 Problème du potentiel aléatoire

Le premier type de désordre auquel on va s'intéresser dans cette thèse est la présence d'un champ aléatoire dans lequel les particules vont diffuser. Il pourra être créé par exemple par la somme des interactions engendrées par toutes les autres particules. Tout au long du manuscrit, on parlera du problème de potentiel aléatoire, ou (PA). Si la masse de la particule est négligeable, ou de manière équivalente, si la viscosité est très grande, alors on peut négliger le terme inertiel et le problème est décrit par l'équation stochastique différentielle (aussi appelée équation de Langevin) suivante :

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\lambda_0 \nabla V(\phi(\mathbf{x}(t))) + \sqrt{\kappa_0} \boldsymbol{\eta}(t). \quad (\text{II.4})$$

---

<sup>2</sup>Elle sera fixée par le champ étudié qui sera toujours corrélé sur de courtes distances.

Le formalisme de Langevin fut introduit premièrement [51] pour rendre compte du mouvement d'une particule soumise à une force newtonienne déterministe et à une force fluctuante due aux chocs engendrés par un bain de molécules ; on parle de mouvement Brownien. Ce phénomène tient son nom du botaniste Robert Brown qui en 1827, pour la première fois, observa à l'intérieur d'un grain de pollen, de petites particules animées d'un mouvement apparemment chaotique. Dans notre cas, les choses sont plus compliquées car la force n'est plus déterministe mais aléatoire à cause de la présence du désordre. Ainsi, le premier terme est donné par le gradient d'un potentiel  $V$ , fonction quelconque d'un champ aléatoire  $\phi(\mathbf{x})$ , avec une constante de couplage  $\lambda_0$ . Ce champ aura souvent une origine physique et il est donc raisonnable que la statistique de  $\phi$  soit Gaussienne. En effet, la loi normale est très stable et constitue un attracteur pour les autres distributions. D'après le théorème de la limite centrale, une superposition de  $N$  distributions avec une variance finie engendre une statistique Gaussienne pourvu que  $N \rightarrow \infty$ . Les résultats physiques sont alors universels et indépendants des détails microscopiques du système, ce qui nous permet de choisir une statistique Gaussienne pour  $\phi$ . Dans tout le manuscrit, le champ aura une valeur moyenne nulle et la fonction de corrélation suivante :

$$\langle \phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{y}) \rangle = \Delta(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|). \quad (\text{II.5})$$

Les potentiels que nous allons étudier auront toujours des fonctions de corrélation à courte portée. De plus par souci de simplicité, on choisira (II.5) telle que  $\Delta(0) = 1$ . Sur la figure II.2 est représentée une réalisation de ce champ en 2 dimensions. De cette définition, on peut dire

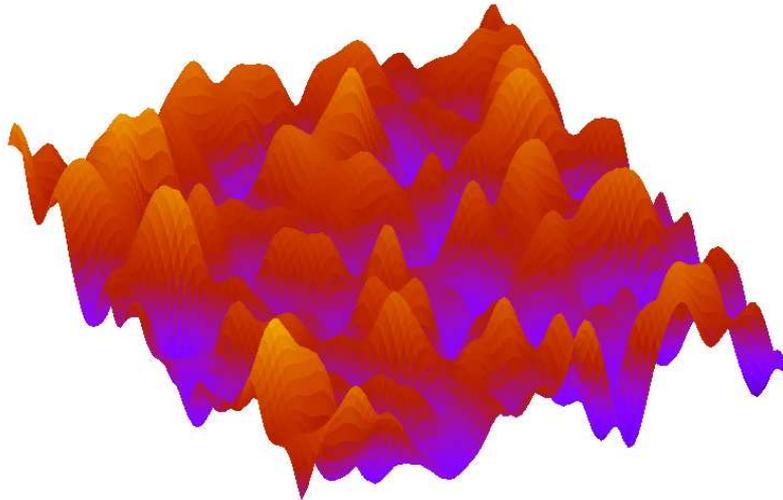


FIG. II.2 – Une réalisation du champ  $\phi$  en 2 dimensions.

que le champ  $\phi$  est isotrope et statistiquement invariant par translation. Les champs qui ont une statistique non isotrope sont aussi intéressants à étudier [52] mais ne font pas l'objet de cette thèse. Le second terme représente le bruit engendré par le bain thermique, cette force fluctuante

est décrite au travers du vecteur  $\boldsymbol{\eta}(t)$ . Un choix naturel est de supposer que le processus de collisions qui engendrent ce bruit est Markovien, il n'y a pas d'effet *mémoire*, et les corrélations entre deux chocs successifs sont nuls. On parle alors de bruit blanc que l'on choisit Gaussien, avec une moyenne nulle et une fonction de corrélation donnée par :

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (\text{II.6})$$

Il est clair que ce choix est arbitraire et la plupart des bruits que l'on rencontre ne sont pas blancs mais colorés (la distribution n'est pas uniforme dans l'espace des fréquences). Cela dit, le choix d'un bruit blanc reste une très bonne approximation que nous appliquerons tout au long de ce manuscrit.  $\kappa_0$  est ici la diffusivité locale qui correspond dans ce cas à la constante de diffusion du système en l'absence du désordre. La relation d'Einstein qui relie la force à l'amplitude des fluctuations due au bruit est donnée dans les unités appropriées (la constante de Boltzman est fixée à  $k_b = 1$ ) par :

$$\frac{\lambda_0}{\kappa_0} = \frac{1}{T} = \beta, \quad (\text{II.7})$$

où  $\beta$  est l'inverse de la température absolue  $T$ . Cette relation nous permet alors de ré-écrire (II.4) sous une forme où la température apparaît explicitement

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\kappa_0 \beta \nabla V(\phi(\mathbf{x}(t))) + \sqrt{\kappa_0} \boldsymbol{\eta}(t). \quad (\text{II.8})$$

C'est sous cette forme que nous étudierons par la suite le problème (PA). Il existe deux conventions différentes pour définir correctement les équations stochastiques différentielles (SDE<sup>3</sup>) comme l'équation de Langevin (II.8). Cette différence provient du fait que l'on peut définir deux types d'intégrales stochastiques, Ito et Stratanovich [53], qui vont engendrer chacune une convention différente pour écrire une SDE. De manière générale, on peut écrire une SDE suivant les deux interprétations :

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= a_i(\mathbf{x}, t) + b_{ij}(\mathbf{x}, t) \xi_i(t), \quad \text{pour Ito,} \\ \frac{dx_i}{dt} &= \alpha_i(\mathbf{x}, t) + \beta_{ij}(\mathbf{x}, t) \xi_i(t), \quad \text{pour Stratanovich.} \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

Où nous appliquons les règles de sommation sur les indices répétés d'Einstein. De plus,  $a$ ,  $b$ ,  $\alpha$  et  $\beta$  vont dépendre de façon quelconque de  $\mathbf{x}$  et  $t$ , et  $\boldsymbol{\xi}$  va être un bruit blanc gaussien (II.6). Heureusement, ces deux conventions pour le calcul stochastique peuvent être réinterprétées dans le langage de l'autre [53], ce qui donne :

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \left[ a_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2} b_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial b_{ij}(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} \right] + b_{ij}(\mathbf{x}, t) \xi_i(t), \quad \text{SDE équivalente,} \\ \frac{dx_i}{dt} &= \left[ \alpha_i(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2} \beta_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \beta_{ij}(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} \right] + \beta_{ij}(\mathbf{x}, t) \xi_i(t), \quad \text{SDE équivalente.} \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

On voit qu'il est donc important de faire un choix entre ces deux interprétations dans le calcul, bien que l'on puisse toujours basculer de l'une à l'autre grâce à la formule (II.10). Ce choix va conditionner la forme de la SDE mais aussi les calculs. Ainsi, pour une fonction quelconque  $f$

<sup>3</sup>SDE pour *Stochastic Differential Equation*

de  $\mathbf{x}$ , la forme que va prendre la dérivée temporelle va dépendre de la convention choisie. Avec la convention de Stratanovich, les règles usuelles du calcul différentiel s'appliquent,

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t}, \quad (\text{II.11})$$

où on applique la convention d'Einstein sur la sommation des indices répétés. Cependant, avec la convention de Ito, les choses sont un peu plus complexes et la dérivée temporelle de  $f$  est donnée par

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial x_i}{\partial t} \frac{\partial x_j}{\partial t}. \quad (\text{II.12})$$

Une autre manière de formaliser le problème (PA) est de l'écrire sous la forme d'une équation de Fokker-Planck. Cette équation a pour origine les travaux fondateurs, dans les années 1910, de Fokker [54] et Planck [55] sur le mouvement Brownien et la théorie des fluctuations. Ce point de vue est complémentaire de celui des SDE et, de manière générale, pour comprendre pleinement la nature des processus diffusifs, les deux points de vue sont nécessaires. Cette équation nous donne alors l'évolution temporelle de la densité de probabilité  $\rho(\mathbf{x}, t)$  de trouver la particule à la position  $\mathbf{x}$ , au temps  $t$ . Contrairement aux SDE, il s'agit ici d'une équation déterministe de la densité de probabilité, et dans le cas général, elle va prendre la forme

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla_i [A_i(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t)] + \frac{1}{2} \nabla_i \nabla_j [B_{ij}(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t)], \quad (\text{II.13})$$

où le premier terme correspond à un terme convectif, et le second, à un terme diffusif. Alors, le processus stochastique décrit par une probabilité satisfaisant (II.13) est équivalent, avec la convention de Ito, à la SDE suivante

$$\frac{dx_i}{dt} = A_i(\mathbf{x}, t) + \sqrt{B_{ij}(\mathbf{x}, t)} \xi_i(t). \quad (\text{II.14})$$

En choisissant maintenant la convention de Ito pour l'équation de Langevin (II.8) du problème (PA), on peut alors écrire l'équation de Fokker-Planck associée,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \kappa_0 [\nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) + \beta \nabla(\rho(\mathbf{x}, t) \nabla V(\phi(\mathbf{x})))] = H_{PA} \rho(\mathbf{x}, t). \quad (\text{II.15})$$

On définit ainsi l'opérateur positif  $H_{PA}$  pour le processus de diffusion dans un potentiel aléatoire. A l'équilibre,  $\rho$  ne dépend plus du temps, et on peut résoudre facilement (II.15). Dans un volume  $V$  fini, on trouve

$$\rho_{eq}(\mathbf{x}) = \frac{\exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x})))}{Z}, \quad (\text{II.16})$$

où  $Z$  est la fonction canonique de partition pour ce problème donné par

$$Z = \int_V d\mathbf{x} \exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x}))). \quad (\text{II.17})$$

La constante de diffusion  $\kappa_e$  pour ce système, quand elle existe, peut alors être extraite (comme pour le cas sans désordre (II.1)) de l'écart quadratique moyen au temps long ( $t \rightarrow \infty$ ) par la formule

$$\overline{\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle} = 2D\kappa_e t. \quad (\text{II.18})$$

Ici,  $\bar{\cdot}$  correspond à la moyenne sur le bruit thermique, et  $\langle \cdot \rangle$  à la moyenne sur le désordre. Ces conventions ne seront pas toujours respectées tout au long de ce manuscrit, mais quand la signification ne sera pas évidente, elle sera explicitée directement.

## 1.2 Problème de la diffusivité aléatoire

Le second type de désordre auquel on va s'intéresser provient du milieu même. La particule est libre mais la diffusivité devient, elle, aléatoire et va dépendre de la position de la particule. Tout au long de ce manuscrit, on parlera du problème de diffusivité aléatoire ou (DA). L'intérêt de ce problème provient principalement du lien mathématique, que l'on explicitera au paragraphe suivant, qui existe avec le problème (PA). Comme précédemment, ce problème peut se décrire au travers d'une équation stochastique différentielle :

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \nabla\kappa(\mathbf{x}(t)) + \sqrt{\kappa(\mathbf{x}(t))}\boldsymbol{\eta}(t). \quad (\text{II.19})$$

L'équation de Langevin ainsi obtenue, contrairement au problème précédent, possède un bruit multiplicatif, mais, on choisit le même bruit  $\boldsymbol{\eta}(t)$  avec le corrélateur défini par l'équation (II.6). Ce problème est tout à fait général et  $\kappa(\mathbf{x})$  peut avoir une statistique quelconque et comme dans le problème (PA), on va utiliser le champ  $\phi(\mathbf{x})$  défini dans le paragraphe (1.1) pour déterminer  $\kappa(\mathbf{x})$ . Ainsi, en général, la diffusivité va être une fonction quelconque du champ Gaussien  $\phi(\mathbf{x})$  et un choix possible est par exemple

$$\kappa(\mathbf{x}) = \kappa_0(1 + \alpha \tanh(\lambda\phi(\mathbf{x}))) \quad |\alpha| \leq 1. \quad (\text{II.20})$$

Dans ce cas, on retrouve un problème de percolation pour  $\alpha = 1$ . Comme précédemment, le processus décrit par l'équation (II.19), dans la convention de Ito, peut être ré-écrit sous la forme de l'équation de Fokker-Planck suivante

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla\kappa(\mathbf{x})\nabla\rho(\mathbf{x}, t) = H_{DA}\rho(\mathbf{x}, t). \quad (\text{II.21})$$

On définit ainsi l'opérateur positif  $H_{DA}$  pour le processus de diffusion dans un milieu à diffusivité aléatoire. A l'équilibre,  $\partial_t\rho = 0$  ce qui nous donne dans un volume  $V$

$$\rho_{eq}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V}. \quad (\text{II.22})$$

La distribution d'équilibre de ce processus est plate et aux temps longs, lorsque l'équilibre est atteint, toutes les positions sont équiprobables. Du point de vue des simulations, ceci est très important. En effet, l'une des plus grandes difficultés lors des simulations est de s'assurer que l'on a bien atteint le régime asymptotique et que l'on est bien à l'équilibre, pour pouvoir mesurer la constante de diffusion  $\kappa_e$  correctement. Dans le cas du problème (DA), si on distribue uniformément les positions initiales des particules, on est déjà très proche de l'équilibre, ce qui permet de limiter le temps des simulations par rapport au problème (PA). Ceci est encore plus vrai près d'une transition vitreuse où la dynamique ralentit dramatiquement. On mesurera alors la constante de diffusion  $\kappa_e$ , quand elle existe, par la formule (II.18).

## 1.3 Lien formel entre ces deux problèmes

Bien que ces deux problèmes soient différents et que leurs dynamiques mènent à des mesures d'équilibre totalement différentes, il existe un lien mathématique formel entre eux. En effet on

va montrer que les constantes de diffusion associées à ces deux problèmes sont reliées [56]. Pour cela, on va revenir au problème de diffusivité aléatoire (DA). Dans ce cas, on a vu que la diffusivité est une fonction quelconque de  $\phi(\mathbf{x})$ , sans perte de généralité, nous pouvons alors écrire

$$\kappa(\mathbf{x}) = \kappa_0 \exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x}))), \quad (\text{II.23})$$

où  $V$  est une fonction quelconque du champ aléatoire  $\phi(\mathbf{x})$  défini au paragraphe (1.1). On choisit la fonction  $V$  telle qu'elle corresponde au problème (PA). Si on reprend l'équation de Langevin (II.19) pour le processus (DA) en utilisant la nouvelle définition de la diffusivité (II.23) on obtient :

$$d\mathbf{x}(t) = \sqrt{\kappa_0 \exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x}(t))))} \boldsymbol{\eta}(t) dt - \kappa_0 \beta \exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x}(t)))) \nabla \phi(\mathbf{x}(t)) dt. \quad (\text{II.24})$$

L'astuce est de voir que le processus (DA) peut être vu comme un processus (PA) grâce à un changement de variable temporelle. Pour cela, on va définir une nouvelle variable de temps  $\tau$  aléatoire de la forme suivante :

$$\tau = \int_0^t ds \exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x}_s))). \quad (\text{II.25})$$

Cette nouvelle variable est monotone, elle correspond donc bien à un temps. Elle est cependant aléatoire, car elle dépend explicitement du champ  $\phi$ . De par la définition que l'on a choisi pour le bruit, on peut écrire que  $\boldsymbol{\eta}(t) = \boldsymbol{\sigma}/\sqrt{t}$ , où chaque composante du vecteur  $\boldsymbol{\sigma}$  est une variable aléatoire Gaussienne de moyenne nulle et de variance égale à deux. Dans ce cas, on peut ré-écrire (II.24) au travers de  $\tau$  et on obtient :

$$\frac{d\mathbf{x}(\tau)}{d\tau} = -\kappa_0 \beta \nabla V(\phi(\mathbf{x}(\tau))) + \sqrt{\kappa_0} \boldsymbol{\eta}(\tau) \quad (\text{II.26})$$

Cette équation correspond exactement à l'équation (II.8) exprimée en termes du nouveau temps  $\tau$ , et par définition, la constante de diffusion associée à ce problème doit être donnée par l'équation (II.18). De plus, la constante de diffusion associée au problème décrit par l'équation (II.24) est donnée par la même équation, ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} \overline{\langle (\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle} &= 2D\kappa_e^{(PA)}\tau, \\ \overline{\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle} &= 2D\kappa_e^{(DA)}t, \end{aligned} \quad (\text{II.27})$$

où on note respectivement  $\kappa_e^{(PA)}$  et  $\kappa_e^{(DA)}$ , la constante de diffusion du problème (PA) et (DA). Il est clair que ces constantes de diffusion vont être différentes, cependant, les écarts quadratiques moyens de  $\mathbf{x}(t)$  et  $\mathbf{x}(\tau)$  doivent être les mêmes et si on compare ces deux expressions, on trouve :

$$\kappa_e^{(DA)} = \kappa_e^{(PA)} \frac{\tau}{t} = \frac{\kappa_e^{(PA)}}{t} \int_0^t ds \exp[-\beta V(\phi(\mathbf{x}(s)))]. \quad (\text{II.28})$$

Aux temps longs, le système est à l'équilibre et il a donc exploré tout l'espace des phases. De plus, pour le processus (DA), la mesure d'équilibre est plate (équation (II.22)), ce qui nous permet d'écrire :

$$\frac{1}{t} \int_0^t ds \exp[-\beta V(\phi(\mathbf{x}(s)))] \rightarrow \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{x} \exp[-\beta V(\phi(\mathbf{x}))]. \quad (\text{II.29})$$

Dans (II.29), l'intégrale sur le volume correspond à une moyenne sur l'espace. D'après le principe d'ergodicité, pour des temps suffisamment longs, lorsque l'équilibre thermodynamique est atteint, la particule a exploré tout l'espace des phases et on peut alors remplacer la moyenne spatiale par une moyenne sur le désordre. Il vient donc finalement pour (II.28)

$$\kappa_e^{(DA)} = \kappa_e^{(PA)} \langle \exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x}))) \rangle. \quad (\text{II.30})$$

Ce résultat est très important et il sera abondamment utilisé tout au long de cette thèse. En effet, si l'on est capable de résoudre l'un des deux problèmes et d'en extraire la constante de diffusion, alors on peut facilement en déduire la constante de diffusion de l'autre problème associé. De plus, du point de vue des simulations, près d'une transition, il sera plus intéressant de simuler le problème (DA) qui atteint l'équilibre beaucoup plus facilement et ainsi en extraire la constante de diffusion du problème (PA) plus dur à simuler.

## 1.4 Méthodes numériques

Dans cette thèse, vont être développés un certain nombre de cadres théoriques qui utiliseront pour la plupart des méthodes d'approximation pour calculer les propriétés à long temps des problèmes décrits par les équations (II.8) et (II.19). Dans le but de valider ces résultats, il est donc nécessaire de pouvoir générer des données numériques et donc de pouvoir simuler correctement ces équations. Les algorithmes utilisés dans cette thèse seront basés sur une version discrète des équations stochastiques différentielles qui s'intégreront avec une précision à l'ordre  $\Delta t^n$  voulu, ici  $\Delta t$  sera le pas de temps discret. Les trajectoires ainsi obtenues seront moyennées sur le bruit thermique (moyenne thermodynamique) mais aussi sur le désordre afin de calculer les quantités voulues. L'algorithme prendra la forme d'une procédure de Runge-Kutta stochastique, ce qui est bien plus compliqué que pour une équation différentielle ordinaire à cause d'un nombre plus grand de contraintes à satisfaire pour s'assurer que l'évolution est bien correcte à l'ordre en  $\Delta t^n$  voulu. Ce type d'algorithme a été développé dans [56–58], et un point de vue mathématique plus rigoureux peut être trouvé dans [59, 60].

La forme la plus générale que peut prendre l'équation d'évolution de la densité de probabilité  $\rho(\mathbf{x}, t)$  de la particule est donnée par l'équation de Fokker-Planck suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot (\kappa(\mathbf{x}) \nabla - \mathbf{u}(\mathbf{x})) \rho(\mathbf{x}, t) = H \rho(\mathbf{x}, t), \quad (\text{II.31})$$

où  $\kappa(\mathbf{x})$  est un champ de diffusivité aléatoire et  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  un champ de vitesse aléatoire statique ( $u$  ne dépend pas du temps). Chacun de ces deux champs peut avoir une statistique qui sera définie par leur fonction d'autocorrélation respective. Il est d'ailleurs possible d'étendre ces résultats au cas où  $u$  dépend du temps, ce qui arrive par exemple en présence de flux turbulent, mais ceci reste en dehors du cadre de cette thèse. Il est clair que cette équation reproduit et généralise les deux problèmes étudiés. En effet, si on fixe  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0$ , on retrouve l'équation (II.21) du problème (DA), et si on choisit  $\kappa(\mathbf{x}) = \kappa_x$  et que l'on note  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\nabla V(\phi(\mathbf{x}))$ , on obtient l'équation (II.15) du problème (PA).

On considère  $N$  particules aux positions  $x_i(t), i = 1, 2, \dots, N$ , au temps  $t$ , distribuées suivant  $\rho(\mathbf{x}, t)$ . L'équation d'évolution des positions de chaque particule au temps  $t + \Delta t$  qui assure la bonne évolution de  $\rho(\mathbf{x}, t)$  définie par (II.31), à l'ordre  $O(\Delta t)$ , est donnée par :

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}(t) + (\nabla \kappa(\mathbf{x}) + \mathbf{u}(\mathbf{x})) \Delta t + \sqrt{2\kappa(\mathbf{x}) \Delta t} \boldsymbol{\eta}, \quad (\text{II.32})$$

où  $\boldsymbol{\eta}$  est un vecteur dont chaque composante est une variable aléatoire Gaussienne indépendante, de moyenne nulle et de variance égale à un. Dans les simulations, le pas de temps  $\Delta t$  sera le plus souvent de l'ordre de 0.01. Malheureusement, avec cet algorithme, l'erreur se propage en  $\Delta t$  et les simulations devront être réalisées sur des temps longs (ce qui est encore plus vrai proche d'une transition vitreuse où la dynamique pour atteindre l'équilibre est de plus en plus lente), ce qui le rend trop imprécis. Dans ce cas, il nous faut construire un algorithme plus précis, au moins jusqu'à l'ordre  $O(\Delta t^2)$ . Pour cela, on va utiliser des pas de temps intermédiaires pour construire le pas final de  $\Delta t$  dans la procédure de Runge-Kutta stochastique. Si  $f$  est une fonction quelconque de  $\mathbf{x}$ , alors sa valeur moyenne, à l'instant  $t$ , va être donnée par :

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle_t = \int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, t), \quad (\text{II.33})$$

où  $\rho(\mathbf{x}, t)$  est la probabilité de trouver une particule à la position  $\mathbf{x}$  et au temps  $t$ , donnée par l'équation (II.31). Pour calculer la valeur moyenne de  $f(\mathbf{x})$  à l'instant suivant,  $t + \Delta t$ , il nous faut pouvoir écrire  $\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ . A partir de l'équation (II.31), on peut décrire l'évolution de  $\rho$  sous la forme d'un propagateur :

$$\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \exp(\Delta t H) \rho(\mathbf{x}, t), \quad (\text{II.34})$$

Si  $\Delta t \ll 1$ , nous pouvons développer l'exponentielle, ce qui nous donne à l'ordre  $O(\Delta t^3)$  :

$$\langle f \rangle_{t+\Delta t} = \int d\mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t) \left( 1 + \Delta t H + \frac{1}{2} \Delta t^2 H^2 \right) f(\mathbf{x}) + O(\Delta t^3). \quad (\text{II.35})$$

L'évolution discrète de  $\rho$  peut aussi, de manière équivalente, être décrite par une fonction de cœur  $K(\mathbf{x}', t + \Delta t; \mathbf{x}, t)$ . Elle correspond alors à la distribution de probabilité de trouver la particule en  $\mathbf{x}'$  à  $t + \Delta t$ , sachant qu'elle se trouvait en  $\mathbf{x}$  au temps  $t$ . Pour connaître l'évolution de  $\rho$  au temps  $t + \Delta t$ , il suffit alors de sommer sur tous les chemins possibles, ce qui donne

$$\rho(\mathbf{x}', t + \Delta t) = \int d\mathbf{x} K(\mathbf{x}', t + \Delta t; \mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t). \quad (\text{II.36})$$

L'astuce est maintenant de choisir  $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}$  et de supprimer toutes dépendances de  $K$  en  $\mathbf{x}$ ,  $t$  et  $\Delta t$ . Alors  $K$  va s'écrire comme une distribution piquée et centrée autour de  $\boldsymbol{\xi}$  que nous allons noter  $F(\boldsymbol{\xi})$ . En utilisant cette définition dans (II.36), l'évolution de la valeur moyenne de  $f$  au temps  $t + \Delta t$  va s'écrire :

$$\langle f \rangle_{t+\Delta t} = \int d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) F(\boldsymbol{\xi}) \rho(\mathbf{x}, t). \quad (\text{II.37})$$

Comme  $F(\boldsymbol{\xi})$  est piquée autour de  $\boldsymbol{\xi}$ , on peut développer  $f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi})$  en série de Taylor, et après intégration par partie de (II.37), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{t+\Delta t} = \int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) & \left( 1 - \overline{\xi_i} \nabla_i + \frac{1}{2} \overline{\xi_i \xi_j} \nabla_i \nabla_j \right. \\ & \left. - \frac{1}{6} \overline{\xi_i \xi_j \xi_k} \nabla_i \nabla_j \nabla_k + \frac{1}{6} \overline{\xi_i \xi_j \xi_k \xi_l} \nabla_i \nabla_j \nabla_k \nabla_l \right) \rho(\mathbf{x}, t) + O(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (\text{II.38})$$

avec

$$\overline{\xi_{i_1} \dots \xi_{i_n}} = \int d\boldsymbol{\xi} \xi_{i_1} \dots \xi_{i_n} F(\boldsymbol{\xi}). \quad (\text{II.39})$$

Le but est maintenant de choisir des contraintes sur  $F(\boldsymbol{\xi})$  de manière à égaliser les formules (II.35) et (II.38) pour  $\langle f \rangle_{t+\Delta t}$  à tous les ordres en  $\Delta t$ . On voit ici la difficulté de construire un algorithme de Runge-Kutta stochastique : en effet, pour obtenir une précision de  $O(\Delta t^n)$ , l'algorithme va nécessiter un tenseur de  $2n$  contraintes, alors que pour un algorithme non stochastique,  $n$  contraintes suffisent. Ainsi, pour construire les pas intermédiaires de l'algorithme, il faut fixer un certain nombre de valeurs suivant le problème étudié (la solution n'est pas toujours unique). On trouvera plus de détails dans [57], et nous allons ici seulement les résultats du calcul pour les deux problèmes qui nous intéressent ici, (PA) et (DA). Pour le problème (PA) nous obtenons l'algorithme suivant :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t + \Delta t) &= \mathbf{x}(t) + \Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}(t) + u(\mathbf{x}(t) + \Delta \mathbf{x}_1)\Delta t + \sqrt{\kappa_0 \Delta t}(\boldsymbol{\eta}_1 + \boldsymbol{\eta}_2), \\ \text{avec } \Delta \mathbf{x}_1 &= u(\mathbf{x}(t))\frac{\Delta t}{2} + \sqrt{\kappa_0 \Delta t}\boldsymbol{\eta}_1, \end{aligned} \quad (\text{II.40})$$

où  $\boldsymbol{\eta}_1$  et  $\boldsymbol{\eta}_2$  sont des variables aléatoires Gaussiennes indépendantes de moyenne nulle et de variance égale à un pour chaque composante. Pour le problème (DA), les choses sont un peu plus compliquées et nous avons :

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \nabla \kappa(\mathbf{y}_1)\Delta t + \sqrt{\Delta t} \left\{ \sqrt{\kappa(\mathbf{x})}\boldsymbol{\eta}_1 + \left[ \alpha_1 \sqrt{\kappa(\mathbf{y}_2)} + \alpha_2 \sqrt{\kappa(\mathbf{y}_3)} \right] \boldsymbol{\eta}_2 \right\}. \quad (\text{II.41})$$

Où les paramètres  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont donnés par

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}(\sqrt{2} + 1); \quad \alpha_2 = -\frac{1}{2}(\sqrt{2} - 1), \quad (\text{II.42})$$

et les pas intermédiaires par

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_1 &= \mathbf{x} + \frac{1}{2}\nabla \kappa(\mathbf{x})\Delta t + \sqrt{\kappa(\mathbf{x})\Delta t}\boldsymbol{\eta}_1, \\ \mathbf{y}_2 &= \mathbf{x} + \frac{1}{2}\nabla \kappa(\mathbf{x})\Delta t + \sqrt{2\kappa(\mathbf{x})\Delta t}\boldsymbol{\eta}_1, \\ \mathbf{y}_3 &= \mathbf{x} + \frac{1}{2}\nabla \kappa(\mathbf{x})\Delta t - \sqrt{2\kappa(\mathbf{x})\Delta t}\boldsymbol{\eta}_1. \end{aligned} \quad (\text{II.43})$$

## 2 Modèle de pièges

Nous allons maintenant nous pencher sur le deuxième modèle introduit précédemment. Ce modèle ne se limite pas aux résultats que l'on présente ici, et il a de nombreux champs d'application. La version unidimensionnelle a, par exemple, des applications concernant les propriétés de transport dans les chaînes désordonnées [37, 61], mais aussi dans la dynamique des bulles de dénaturation dans les séquences aléatoires d'ADN [62].

### 2.1 Description du modèle

Si on considère un système désordonné quelconque, comme précédemment, on s'attend à ce que le paysage de l'énergie soit accidenté. De ce fait, les minima locaux du champ vont jouer le rôle de pièges et capter la particule pendant un certain temps  $\tau$ . On peut alors définir une énergie seuil  $E_0$  qui correspond à l'énergie minimale nécessaire pour sauter d'un piège à l'autre. En dessous de ce seuil, les pièges sont déconnectés et les particules ne pourront s'échapper des pièges de profondeur  $\Delta E = E - E_0$  que par activation thermique. Ainsi, à la température

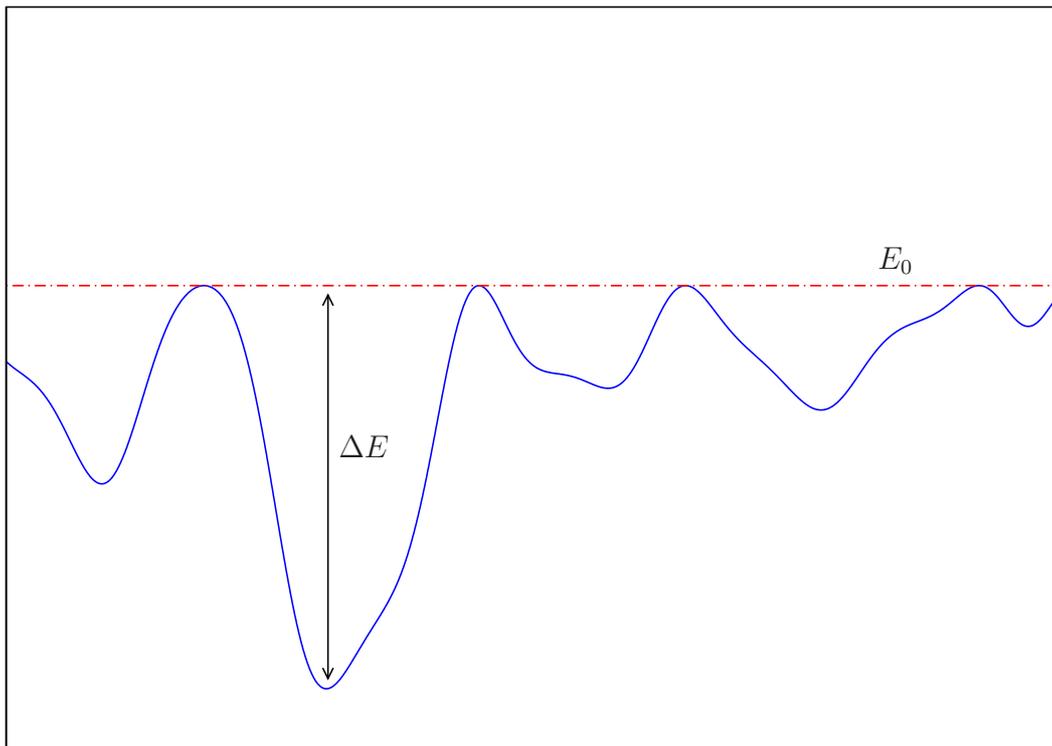


FIG. II.3 – Exemple de paysage d'énergie, en une dimension, où les pièges sont donnés par les minima.

$T = \beta^{-1}$ , le choix le plus naturel est que chaque particule peut s'échapper avec une probabilité distribuée suivant une loi d'Arrhénius

$$\tau = \tau_0 \exp(\beta \Delta E). \quad (\text{II.44})$$

La distribution des temps de piégeage est alors donnée entièrement par la distribution des barrières d'énergie  $\Delta E$ . Pour la connaître, il faut revenir aux détails du modèle désordonné initial, responsable du paysage d'énergie. Plusieurs modèles suggèrent qu'à très basse température, la distribution est exponentielle et possède la forme générique suivante

$$\rho(\Delta E) = \frac{C}{T} \exp\left(\frac{\mu \Delta E}{T}\right), \quad (\text{II.45})$$

où  $C$  est une constante et  $\mu$  un paramètre qui dépend de la température et qui sera fixé par le modèle. Ce choix est loin d'être arbitraire, et on peut montrer qu'à très basse température, la distribution des  $\Delta E$  dans le modèle SK (Sherrington-Kirkpatrick) [3] ou le REM<sup>4</sup> [63–65], est donné par la forme (II.45). Dans le cas de ce dernier, on montre même que  $\mu = \frac{T}{T_g}$ , où  $T_g$  est la température de transition vitreuse introduite au chapitre 1, ce qui correspond bien au fait que dans ce problème, l'énergie libre est indépendante de la température. De même, on retrouve exactement ce résultat dans le modèle de force aléatoire en une dimension [66]. De manière générale, ce choix est soutenu par la queue exponentielle de la distribution de Gumbel, qui constitue une classe d'universalité pour la statistique des valeurs extrêmes [67]. En utilisant

<sup>4</sup>REM pour Random Energy Model (modèle des énergies aléatoires) introduit par Derrida [63]



## 2.2 Mise en évidence d'une transition

Ce problème pour une distribution arbitraire  $\rho(\tau)$  a été profondément étudié [37, 68], mais pour cette thèse, seules les propriétés de diffusion vont nous intéresser. On note  $N$ , le nombre de pas réalisés par le marcheur pendant un temps  $t$ . L'écart quadratique moyen pour la  $i$ ème composante de la position est alors donné par la formule

$$\langle X_i^2 \rangle = \langle l_i^2 \rangle N \quad (N \rightarrow \infty), \quad (\text{II.47})$$

où  $\langle l_i^2 \rangle$  est la distance au carré moyenne d'un saut dans la direction  $i$ . Dans la limite du désordre recuit,  $t$  est alors simplement donné par la somme de variables aléatoires indépendantes  $\tau_i$  tel que

$$t = \sum_{i=1}^N \tau_i. \quad (\text{II.48})$$

Si  $\langle \tau \rangle$  est finie, la diffusion est normale et si on néglige les fluctuations autour de la moyenne, le temps total  $t$  se comporte simplement comme  $t \sim N \langle \tau \rangle$ . On peut alors ré-écrire (II.47) comme

$$\langle X_i^2 \rangle = 2D_i t, \quad (\text{II.49})$$

avec  $D_i = \frac{\langle l_i^2 \rangle}{2 \langle \tau \rangle}$ , ce qui est juste une autre manière d'écrire (II.3). Dans la limite trempée, si  $\langle \tau \rangle$  est finie, les corrélations entre les  $\tau_i$  n'ont pas d'importance et le comportement est là aussi diffusif avec le même résultat pour l'écart quadratique moyen. Cela dit, nous verrons dans le prochain chapitre qu'il existe des corrections sous-linéaires qui peuvent devenir importantes et qui vont changer d'une approximation à l'autre. Si on regarde maintenant la distribution (II.46) de près, il est évident que pour  $0 < \mu \leq 1$ , la moyenne de  $\tau$  va diverger ( $\langle \tau \rangle \rightarrow \infty$ ). Dans ce cas, la constante de diffusion  $D_i$  va s'annuler et on va passer d'un régime diffusif à un régime sous diffusif où l'écart quadratique moyen sera donné par la formule (II.2). Il y a donc dans ce modèle phénoménologique pour la dynamique de systèmes complexes et désordonnés une vraie transition vitreuse dynamique et une brisure d'ergodicité car le temps pour explorer l'ensemble du système devient infini. Dans cette phase, on peut montrer que des comportements tels que les effets de vieillissement, présentés dans le chapitre 1 et caractéristiques d'une phase vitreuse, sont bien présents [5, 40, 42, 43, 45, 46]. Cependant, c'est le calcul de l'exposant  $\nu$  dans la phase anormale qui va réellement nous intéresser ici.

## 2.3 Calcul de l'exposant anormal

La difficulté ici est de pouvoir prévoir quel va être le comportement de  $t$  après un grand nombre de pas  $N$ . Pour cela, la question que l'on doit se poser est de savoir quelle sera la distribution limite  $P(t)$  telle que

$$Prob[t_1 \leq t \leq t_2] \longrightarrow \int_{t_1}^{t_2} P(t) dt, \quad (\text{II.50})$$

quand  $t$  est donné par la somme de  $N$  variables aléatoires  $\tau_i$  indépendantes et toutes distribuées suivant la même loi de probabilité (II.46). Ce problème est un classique de la théorie des probabilités et la plupart des résultats dans ce domaine sont dus à Khintchine et Levy [69–71]. La distribution limite la plus robuste est la loi normale ou Gaussienne, en effet, si et seulement

si  $\rho(\tau)$  a une variance finie ( $\sigma = \langle \tau^2 \rangle - \langle \tau \rangle^2$ ),  $P(x)$  tend vers une distribution Gaussienne. Ce théorème est une autre forme du CLT et peut s'écrire

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tau_i = \langle \tau \rangle + \frac{\sigma}{\sqrt{N}}. \quad (\text{II.51})$$

Ainsi, toute distribution qui décroît plus vite que  $\tau^{-3}$  appartient alors au bassin d'attraction de la distribution Gaussienne. Ce résultat est très puissant et explique pourquoi dans la nature et en physique plus particulièrement la loi Gaussienne est omniprésente. Cependant, pour  $0 < \mu \leq 1$ , la variance et même la moyenne  $\langle \tau \rangle$  divergent (En fait, on ne peut plus appliquer la forme classique du CTL quand  $\mu < 2$ , car le second moment diverge; ceci sera plus amplement détaillé dans le prochain chapitre). Il nous faut donc calculer la nouvelle loi stable et pour cela, on utilise les propriétés d'invariance par convolution. La distribution d'une somme de 2 variables indépendantes est donnée par la convolution de leur distribution de probabilité. La loi stable sera alors celle laissée invariante par ce processus. De plus, comme dans l'espace de Fourier, le produit de convolution de deux fonctions est seulement le produit des transformées de Fourier, trouver la loi stable est bien plus simple en terme de fonction caractéristique. Dans cet esprit, nous définissons une nouvelle fonction  $S_\alpha$  tel que :

$$S_\alpha = \frac{1}{N^\alpha} \sum_{i=1}^N \tau_i, \quad (\text{II.52})$$

où  $\alpha$  est un nombre quelconque. On calcule alors la transformée de Fourier de la distribution limite  $P(S_\alpha)$ , et si nous posons  $k_\alpha = -\frac{k}{N^\alpha}$ , nous allons trouver :

$$P(k_\alpha) = [\langle \exp(ik_\alpha \tau) \rangle]^N. \quad (\text{II.53})$$

Nous pouvons alors ré-écrire la moyenne dans (II.53) comme

$$\langle \exp(ik_\alpha \tau) \rangle = \int_0^\infty \rho(\tau) \exp(ik_\alpha \tau) d\tau = 1 + \int_0^\infty \rho(\tau) d\tau [\exp(ik_\alpha \tau) - 1], \quad (\text{II.54})$$

et si nous effectuons le changement de variable  $k_\alpha \tau = u$ , il vient finalement

$$\langle \exp(ik_\alpha \tau) \rangle = 1 + k_\alpha^\mu \int_0^\infty \frac{C}{u^{1+\mu}} (\exp(iu) - 1) du, \quad (\text{II.55})$$

où  $C$  est la constante de normalisation de  $\rho(\tau)$ . L'intégrale converge maintenant vers une valeur que l'on note  $B_\mu$  et donnée par [72]

$$B_\mu = \exp\left(-i\frac{\pi\mu}{2}\right) \frac{\pi}{\mu \sin(\pi\mu)\Gamma(\mu)}, \quad (\text{II.56})$$

où  $\Gamma(\mu)$  est simplement la fonction gamma définie par  $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$ . Il vient alors finalement pour (II.53)

$$P(k) = \left(1 - \frac{k^\mu}{N^{\alpha\mu}} B_\mu\right)^N. \quad (\text{II.57})$$

$P(S_\alpha)$  sera alors une loi stable (c'est à dire invariante par convolution), seulement si sa fonction caractéristique peut s'écrire sous la forme [37]

$$P(k) = \exp(i\gamma k - C|k|^\mu [1 + i\beta \text{sign}(k)\omega(k, \mu)]), \quad (\text{II.58})$$

où  $\mu, \beta, \gamma$  et  $C$  sont des nombres réels. Les deux paramètres importants sont alors  $\mu$  et  $\beta$ , et la loi stable ainsi obtenue se note  $L_{\mu, \beta}$ . Il s'agit communément de la loi de Levy . Dans notre cas,  $P(k)$  satisfait à cette condition, seulement si  $\mu\alpha = 1$ , ce qui signifie que :

$$\alpha = \frac{1}{\mu}. \quad (\text{II.59})$$

La diffusion est anormale, néanmoins on peut maintenant appliquer une version généralisée du théorème de la limite centrale pour lequel la loi stable est maintenant donnée par la distribution de Levy  $L_{\mu, 1}$  que l'on note simplement  $L_{\mu}$ . Quand  $N \rightarrow \infty$ ,  $S_{1/\mu}$  va alors converger, et nous allons pouvoir maintenant calculer les exposants anormaux.

### 2.3.a Cas recuit

Dans cette limite, on a vu que le temps total après  $N$  sauts est donné simplement par la somme de  $N$  variables aléatoires  $\tau$  (II.48). Nous pouvons alors ré-écrire (II.48) comme :

$$t = N^{1/\mu} \frac{1}{N^{1/\mu}} \sum_{i=1}^N \tau_i = N^{1/\mu} S_{1/\mu}. \quad (\text{II.60})$$

Dans le régime asymptotique (quand  $N$  est grand),  $S_{1/\mu}$  converge et en utilisant (II.47) il vient finalement

$$\langle X_i^2 \rangle \sim t^\mu. \quad (\text{II.61})$$

L'exposant de diffusion anormale  $\nu$  (équation II.2) est égal, dans cette approximation, à  $\mu$ . Le comportement sous-diffusif va donc directement dépendre du modèle microscopique qui soutend le modèle de pièges, et pour le REM, l'exposant va être par exemple donné par  $\nu = T/T_g$ .

### 2.3.b Cas trempé

Dans cette limite, les  $\tau_i$  sont fixés une fois pour toutes, nous devons donc traiter rigoureusement les corrélations dans la somme (II.48). Une manière de traiter ce problème est alors d'estimer le nombre de variables  $\tau_i$  effectivement indépendantes. Le détail du calcul est donné dans [37], et le nombre moyen de sites différents visités après  $N$  sauts, est alors donné par la formule :

$$S_N \sim \begin{cases} N^{1/2}, & D = 1, \\ N/\ln(N), & D = 2, \\ N, & D \geq 3, \end{cases} \quad \text{quand } N \rightarrow \infty. \quad (\text{II.62})$$

Aux temps longs, le nombre de sauts devient très grand et nous pouvons appliquer la formule (II.62). Le nombre de fois où un site sera visité est alors donné par  $N/S_N$ , et en dimension une, quand  $N \rightarrow \infty$ , ce nombre va diverger (en effet le marcheur aléatoire revient toujours à sa position d'origine et visite ainsi les sites un nombre infini de fois). En deux dimensions il diverge seulement logarithmiquement alors qu'en dimension trois ou plus il reste fini. On va donc s'attendre à ce que les corrélations soient vraiment importantes en une et deux dimensions. Ainsi, en dimension une, le temps total va être donné par  $\sqrt{N}$  fois la somme de  $\sqrt{N}$  temps  $\tau_i$  associé aux  $\sqrt{N}$  sites indépendants qui seront visités  $\sqrt{N}$  fois. Nous avons alors :

$$t = \sqrt{N} \sum_{i=1}^{\sqrt{N}} \tau_i. \quad (\text{II.63})$$

On peut alors ré-écrire (II.48), comme une somme de  $\sqrt{N}$  nombres aléatoires indépendants ce qui nous donne :

$$t = \sqrt{N} \sqrt{N^{1/\mu}} \frac{1}{\sqrt{N^{1/\mu}}} \sum_{i=1}^{\sqrt{N}} \tau_i = N^{\frac{\mu+1}{2\mu}} S_{1/\mu}. \quad (\text{II.64})$$

Comme dans le cas recuit, dans le régime asymptotique (quand  $N$  est grand),  $S_{1/\mu}$  converge. Finalement, en dimension une, on trouve pour la diffusion un comportement anormal et l'écart quadratique moyen est donné par la formule :

$$\langle X_i^2 \rangle \sim t^{\frac{2\mu}{\mu+1}}. \quad (\text{II.65})$$

L'exposant anormal, dans le cas trempé, est donc donné par  $\nu = 2\mu/(\mu + 1)$ . Par un calcul similaire [73, 74], on peut alors prédire le comportement de l'écart quadratique moyen, quelle que soit la dimension et on trouve :

$$\langle \mathbf{X}(t)^2 \rangle \sim \begin{cases} t^{\frac{2\mu}{\mu+1}}, & D = 1, \\ t^\mu (\ln(t))^{1-\mu}, & D = 2, \\ t^\mu, & D \geq 3. \end{cases} \quad (\text{II.66})$$

En une dimension, le comportement prédit est complètement différent de l'approximation recuite, et en deux dimension, nous obtenons une correction logarithmique. Dans les systèmes à basse dimensionnalité, il est donc important de savoir dans quelle limite il faut traiter le désordre. Ceci dit, en dimension trois ou plus, nous retrouvons le même exposant  $\nu$  que dans la limite recuite. En effet, nous avons vu que, dans ce cas, le marcheur aléatoire visite un nombre fini de fois chaque site, ce qui implique que les corrélations ne vont plus jouer de rôle fondamental. Aux temps longs, nous pourrions alors simplifier le problème en le traitant dans l'approximation recuite.

### 3 Résultats importants pour les milieux désordonnés

Maintenant que les problèmes qui vont nous intéresser dans cette thèse sont clairement présentés, on va se pencher sur quelques résultats importants. Une quantité cruciale que l'on va chercher à calculer est la constante de diffusion en présence de désordre  $\kappa_e$ . Elle pourra en effet nous renseigner sur le comportement diffusif du système mais aussi sur sa dynamique et la présence d'une transition vitreuse. Numériquement, on peut l'extraire des simulations en calculant l'écart quadratique moyen, cependant, nous nous intéressons ici à son calcul analytique et pour cela, nous allons nous pencher sur la statique d'un milieu qui possède une diffusivité aléatoire. La diffusivité effective de ce modèle va alors correspondre à  $\kappa_e^{(DA)}$  et à l'équilibre, l'équation de Fokker-Planck est donnée par (II.21)

$$\nabla \cdot \kappa(\mathbf{x}) \nabla \rho(\mathbf{x}) = 0. \quad (\text{II.67})$$

Nous pouvons alors ré-écrire (II.67) en introduisant un courant  $\mathbf{J}(\mathbf{x})$  dépendant de la position tel que

$$\kappa(\mathbf{x})\nabla\rho(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x}). \quad (\text{II.68})$$

Avec la condition d'incompressibilité  $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ . L'équation (II.68) est déjà connue dans le milieu de l'hydrodynamique comme la loi semi-empirique de Darcy [30], pour un fluide incompressible dans un milieu poreux. Dans ce cas,  $\rho(\mathbf{x})$  joue le rôle du champ de pression hydrodynamique et cette loi fait le lien entre le courant à l'équilibre  $\mathbf{J}(\mathbf{x})$  et le gradient du champ local de pression hydrodynamique. Ce problème revient aussi à calculer la conductivité effective, ou la constante diélectrique effective d'un milieu aléatoire. Dans ce cas,  $\kappa(\mathbf{x})$  ne joue pas le rôle de diffusivité locale, mais celui, respectivement, de conductivité ou de constante diélectrique locale. Ce problème a été extensivement étudié et on peut calculer explicitement, en une et deux dimensions, sa diffusivité effective, qui va correspondre à la constante de diffusion du problème (DA). Si nous moyennons maintenant l'équation (II.68) sur le désordre, le courant à l'équilibre moyen est définie par :

$$\langle \mathbf{J}(\mathbf{x}) \rangle = \langle \kappa(\mathbf{x})\nabla\rho(\mathbf{x}) \rangle = \kappa_{eff}\langle \nabla\rho(\mathbf{x}) \rangle. \quad (\text{II.69})$$

Cette équation sert aussi de définition pour la diffusivité effective  $\kappa_{eff}$  de ce problème. A basse dimension, on peut alors calculer exactement la diffusivité effective.

## 3.1 Résultats à une dimension

### 3.1.a Calcul de la constante de diffusion

A une dimension, de la condition d'incompressibilité, il vient que le courant est constant et ne dépend plus de la position,  $\mathbf{J}(\mathbf{x}) = J$ . Nous pouvons alors prendre simplement la moyenne sur le désordre et (II.68) s'écrit alors,

$$\langle \partial_x \rho(x) \rangle = J \langle \kappa(x)^{-1} \rangle. \quad (\text{II.70})$$

En comparant les équations (II.69) et (II.70), il est alors évident que la diffusivité effective à une dimension va s'écrire comme

$$\kappa_{eff} = \langle \kappa(x)^{-1} \rangle^{-1}. \quad (\text{II.71})$$

Ainsi, dans ce cas simple, la diffusivité effective qui correspond à la constante de diffusion du problème (PA) est donnée par la moyenne harmonique de  $\kappa(x)$ . Au paragraphe (1.3), on a vu que, sans perte de généralité, si la diffusivité est donnée par l'équation (II.23), alors la constante de diffusion du problème (DA) est reliée a celle du problème (PA) par la formule (II.30). Alors, la constante de diffusion  $\kappa_e^{(PA)}$  est donnée par la relation :

$$\kappa_e^{(PA)} = \frac{\kappa_0}{\langle \exp(\beta V(\phi)) \rangle \langle \exp(-\beta V(\phi)) \rangle}. \quad (\text{II.72})$$

Pour calculer  $\kappa_e^{(PA)}$ , il va donc être nécessaire d'évaluer les deux termes de la formule (II.72). La moyenne sur le désordre s'exprime simplement comme :

$$\langle \exp(\pm\beta V(\phi)) \rangle = \int p(\phi) d\phi \exp(\pm\beta V(\phi)). \quad (\text{II.73})$$

Où  $\phi$  est le champ aléatoire Gaussien de moyenne nulle introduit dans le premier paragraphe. Dans ces conditions, la distribution du désordre  $p(\phi)$  va être donnée par la formule :

$$p(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\phi^2}{2}\right). \quad (\text{II.74})$$

Ce résultat relativement simple peut aussi s'obtenir via des arguments de temps de premier passage appliqués au problème (PA) [75, 76]. On entend alors par temps de premier passage, le temps moyen mis par une particule pour atteindre la distance  $L$  pour la première fois. Il est intéressant de remarquer que cette formule est invariante par rapport à un changement de signe du potentiel  $V$ .

### 3.1.b Application au modèle Gaussien

Comme nous l'avons vu précédemment, un choix naturel pour  $V$  est de prendre un potentiel purement Gaussien. Ce choix va ainsi nous servir de fil rouge tout au long de ce manuscrit, et dans ce cas,  $V(\phi) = \phi$ . Nous allons alors pouvoir facilement évaluer la formule (II.72) et trouver :

$$\kappa_e^{(PA)} = \kappa_0 \exp(-\beta^2). \quad (\text{II.75})$$

Ce résultat est très important, car il montre que dans le modèle (PA) en dimension une, la constante de diffusion reste finie à température finie et elle ne s'annule qu'à  $T = 0$ . La diffusion reste donc toujours normale et il n'y a pas de transition. Même à très basse température, la particule, piégée dans les minima du champ, pourra toujours surmonter les barrières de potentiel et diffuser.

## 3.2 Résultats à deux dimensions

### 3.2.a Calcul de la constante de diffusion

En ce qui concerne le potentiel général  $V(\phi)$  introduit dans le paragraphe 1, en dimension supérieure à un, à ma connaissance il n'existe pas de résultat analytique exact. Cependant, pour une forme de désordre appropriée, on peut calculer en deux dimensions la constante de diffusion. Ce calcul, comme en une dimension, repose sur le lien entre les problèmes (PA) et (DA) et s'obtient grâce à un théorème de dualité [77–79]. Pour établir ce résultat, on se place dans le cas où la perméabilité  $\kappa(\mathbf{x})$  est statistiquement équivalente à  $\kappa'(\mathbf{x}) = \kappa_0^2 / \kappa(\mathbf{x})^5$ . Ceci est clairement vérifié quand la perméabilité est donnée par la formule (II.23) et si le potentiel  $V(\phi)$  est statistiquement équivalent à  $-V(\phi)$ . Dans ce cas, en deux dimensions, l'équation (II.67) est satisfaite par l'introduction d'un champ  $\rho^*$ , dual de  $\rho$  par la formule :

$$\kappa(\mathbf{x}) \nabla \rho(\mathbf{x}) = \kappa_0 \mathbf{n} \wedge \nabla \rho^*(\mathbf{x}). \quad (\text{II.76})$$

Où  $\mathbf{n}$  est ici un vecteur unitaire, orthogonal au plan bidimensionnel dans lequel se situe le problème. Nous pouvons alors facilement vérifier qu'en prenant la divergence de chaque côté de l'expression, on retrouve bien (II.67) (en effet  $\nabla \cdot (\mathbf{n} \wedge \nabla \rho^*) = \nabla \rho^* \nabla \wedge (\mathbf{n}) - \mathbf{n} \nabla \wedge (\nabla \rho^*) = 0$ ). Si nous prenons maintenant le rotationnel de (II.76), alors nous obtenons une équation similaire

$$\kappa'(\mathbf{x}) \nabla \rho^*(\mathbf{x}) = -\kappa_0 \mathbf{n} \wedge \nabla \rho(\mathbf{x}), \quad (\text{II.77})$$

ce qui implique que

---

<sup>5</sup>Cela signifie que si on moyenne sur le désordre, le résultat sera identique :  $\langle \kappa(\mathbf{x}) \rangle = \langle \kappa'(\mathbf{x}) \rangle$

$$\nabla(\kappa'(\mathbf{x})\nabla\rho^*(\mathbf{x})) = 0. \quad (\text{II.78})$$

Le champ dual  $\rho^*$  est donc régi par la même équation que le champ original  $\rho$ , à la différence que la diffusivité locale est maintenant donnée par  $\kappa'$ . Cependant,  $\kappa(\mathbf{x})$  et  $\kappa'(\mathbf{x})$  sont statistiquement équivalents, et si nous moyennons sur le désordre, dans le même esprit que l'équation (II.69) nous allons trouver

$$\begin{aligned} \langle \kappa(\mathbf{x})\nabla\rho(\mathbf{x}) \rangle &= \kappa_{eff}\langle \nabla\rho(\mathbf{x}) \rangle, \\ \langle \kappa'(\mathbf{x})\nabla\rho^*(\mathbf{x}) \rangle &= \kappa_{eff}\langle \nabla\rho^*(\mathbf{x}) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{II.79})$$

Où  $\kappa_{eff}$ , correspondant à la diffusivité effective, est la même du fait de l'invariance statistique. Nous pouvons alors moyenner sur le désordre les équations (II.76) et (II.77) et appliquer le résultat (II.79) pour finalement avoir

$$\begin{aligned} \kappa_{eff}\langle \nabla\rho(\mathbf{x}) \rangle &= \kappa_0\mathbf{n} \wedge \langle \nabla\rho^*(\mathbf{x}) \rangle, \\ \kappa_{eff}\langle \nabla\rho^*(\mathbf{x}) \rangle &= -\kappa_0\mathbf{n} \wedge \langle \nabla\rho(\mathbf{x}) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{II.80})$$

La seule solution pour satisfaire ces deux équations est alors,  $\kappa_{eff} = \kappa_0$ . Ainsi, en deux dimensions, quand cette dualité statistique est présente, la diffusivité effective est simplement donnée par la constante  $\kappa_0$ . Cependant, la diffusivité effective  $\kappa_{eff}$ , est ici équivalente à la constante de diffusion  $\kappa_e^{(DA)}$  du problème (DA). Nous pouvons alors appliquer une fois encore la relation (II.30) et en extraire la constante de diffusion pour le problème (PA). En deux dimensions, nous obtenons alors la relation exacte suivante :

$$\kappa_e^{(PA)} = \frac{\kappa_0}{\langle \exp(-\beta V(\phi)) \rangle}. \quad (\text{II.81})$$

#### 3.2.b Application au modèle Gaussien

Dans le cas naturel où  $V(\phi)$  est purement Gaussien ( $V(\phi) = \phi$ ), on peut de manière évidente appliquer la relation (II.81). En effet, pour un champ  $\phi$  Gaussien, de valeur moyenne nulle,  $\phi$  et  $-\phi$  sont statistiquement équivalents, ce qui nous permet d'exploiter l'argument de dualité. Si nous calculons la moyenne comme dans le cas à une dimension, nous trouvons finalement le résultat :

$$\kappa_e^{(PA)} = \kappa_0 \exp\left(-\frac{\beta^2}{2}\right). \quad (\text{II.82})$$

Là encore, la constante de diffusion reste finie à température finie. On remarque cependant qu'à la même température, la particule va diffuser plus rapidement à deux dimensions. Ceci est tout à fait logique car, à deux dimensions, la particule n'a pas besoin de franchir toutes les barrières de potentiel mais peut les contourner. Pour aller plus loin analytiquement, il faut faire alors appel à des procédures approchées. En utilisant par exemple la théorie des perturbations pour un potentiel Gaussien isotrope [52, 56, 80], mais aussi non isotrope [56, 81] ou des calculs de groupe de renormalisation [26, 56, 80, 82] (ces méthodes seront traitées plus en détail dans le chapitre 4). Sans rentrer dans les détails, ces calculs suggèrent fortement l'absence de transition à température finie à trois dimensions. La statistique du modèle (PA) peut aussi être résolue par une approche variationnelle en dimension finie, qui devient exacte dans la limite où le nombre de dimensions spatiales  $D$  devient infini, et, quand la fonction de corrélation du champ se comporte comme  $\Delta(x) = Df(x^2/D)$  [83–85]. Alors, si la fonction de corrélation est à courte

portée, on peut montrer l'existence d'une transition vitreuse structurelle pour une température  $T_C$  non nulle [86–88]. Cette transition est due à l'apparition d'un nombre exponentiellement grand d'états métastables du système. De plus, l'existence de cette transition est indépendante de la forme précise de la dynamique tant qu'elle reste locale [86–88]. Elle n'est bien sûr pas une transition thermodynamique au sens strict, mais marque un saut entre une dynamique où la diffusion est normale et caractérisée par une constante de diffusion finie qui s'annule à  $T_C$  [89] et un régime basse température où des effets de vieillissement apparaissent. Cependant, on peut facilement se convaincre que cette transition est, d'une certaine manière, une pathologie due à la limite où  $D$  tend vers l'infini. En effet, dans cette limite, le système va finir par rencontrer des barrières d'énergie qui vont diverger, ce qui va l'empêcher d'explorer tout l'espace des phases, le contraignant à rester constamment hors équilibre et entraînant ainsi une transition vitreuse. Dans un système de dimension finie, ces barrières seront toujours de taille finie et à temps long, le système atteindra toujours l'équilibre. Pour le modèle (PA), avec un champ purement Gaussien, on ne s'attend donc pas à observer de transition.

## 4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons donc introduit différents paradigmes (milieux désordonnés, modèles de piège) pour décrire la transition vitreuse. Nous en avons extrait des modèles, notamment ceux de potentiel aléatoire (PA) et de diffusivité aléatoire (DA), que nous avons pu relier l'un à l'autre au travers de la relation (II.30). Nous avons aussi présenté les algorithmes stochastiques qui vont nous permettre par la suite de simuler ces problèmes. Dans le cas du modèle de piège, nous avons mis en évidence la présence d'une transition dynamique pour  $\mu < 1$ , dans laquelle la constante de diffusion s'annule et le système devient sous diffusif. Cette transition a alors toutes les caractéristiques d'une transition vitreuse. Nous avons finalement développé les outils théoriques pour calculer exactement les constantes de diffusion des problèmes (PA) et (DA) en dimension une et deux. Ainsi, dans le cas naturel où le potentiel aléatoire possède une statistique Gaussienne, nous avons montré qu'il n'existe aucune transition à température finie. Ce résultat est certes décevant, nous espérons cependant, si la statistique du potentiel est plus complexe, pouvoir mettre en évidence une dynamique plus riche.

\* \*  
\*

# Diffusion dans un potentiel aléatoire Gaussien au carré

*It is more important to have beauty in one's equations than to have them fit experiment...because the discrepancy may be due to minor features that are not properly taken into account and that will get cleared up with further developments of the theory... It seems that if one is working from the point of view of getting beauty in one's equations, and if one has really a sound insight, one is on a sure line of progress.*

P.A.M. Dirac

Dans ce chapitre, nous allons étudier le problème d'une particule brownienne diffusant dans un potentiel aléatoire  $V$  en dimension 1 et 2. La plupart des résultats que l'on va présenter ici ont été publiés dans [90]. Pour cela, on effectue un choix particulier pour le potentiel  $V$ , motivé par un problème de dipôle diffusant dans un champ électrique  $\mathbf{E}$  aléatoire. Après avoir explicité le modèle, on va montrer l'existence d'une transition vitreuse à température finie  $T_C$ . Pour générer le champ aléatoire Gaussien, nous allons utiliser une méthode standard qui introduit des effets de taille finie dans le calcul de la constante de diffusion. Ces effets engendrent ainsi à basse température une forme d'Arrhenius pour la constante de diffusion. Enfin, dans une troisième partie, nous étudierons la phase basse température, où la diffusion devient anormale, grâce à un modèle de pièges.

## 1 Le modèle étudié

Dans le cas d'un champ purement Gaussien  $V(\phi) = \phi$ , nous avons vu au chapitre précédent que la constante de diffusion ne s'annule jamais à température finie. Il n'y a donc pas de transition vitreuse dans le modèle Gaussien. Cependant, si on choisit une fonction moins triviale pour le champ, les choses sont moins claires. On va donc s'intéresser au problème (PA) avec le choix suivant pour  $V$  :

$$V(\phi(\mathbf{x})) = -\frac{\phi(\mathbf{x})^2}{2}. \tag{III.1}$$

$V(\phi)$  aura donc la statistique d'un champ Gaussien au carré. Sur la figure (III.1) sont représentées deux réalisations de  $V$  en une dimension. Les minima du potentiel vont alors être donnés par les 0 du champ  $\phi$ . Un tel choix peut paraître arbitraire, il est cependant motivé par un problème physique pour lequel on montre qu'il constitue un potentiel effectif.

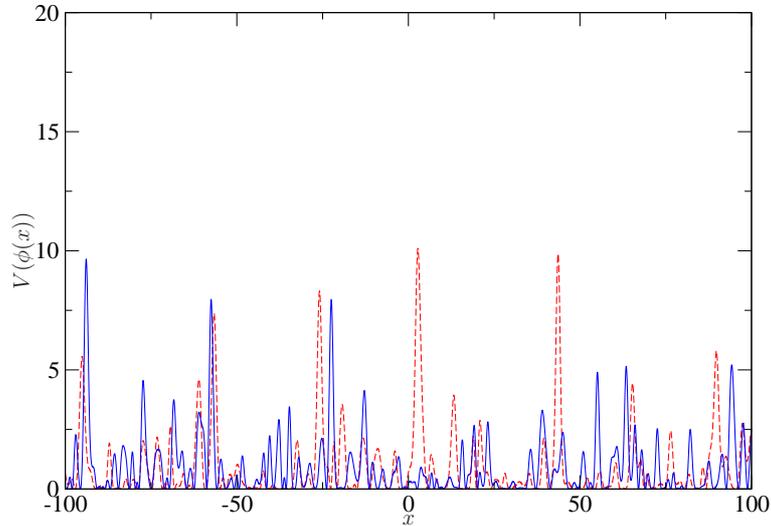


FIG. III.1 – Deux réalisations du champ (III.1) à une dimension, en utilisant la formule (III.7) avec  $N = 128$  modes.

### 1.1 Motivations physiques

Le modèle physique qui a motivé les études présentés dans les chapitres 3, 4 et 5 est celui de dipôles diffusant dans un champ électrique aléatoire  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ , variant spatialement, mais indépendant du temps (ce qui correspond à un désordre gelé) [90, 91]. Ce champ est généré par un potentiel aléatoire  $\phi(\mathbf{x})$  tel que

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla\phi(\mathbf{x}), \tag{III.2}$$

où le potentiel  $\phi(\mathbf{x})$  est défini dans le chapitre 2 et a pour fonction de corrélation (II.5). Si le moment dipolaire, qui est modélisé par deux charges opposées, connectées par un potentiel harmonique, est noté  $\mathbf{p}$ , et  $\mathbf{x}$  est la position du centre de masse du dipôle, alors l'énergie totale de la particule au point  $(\mathbf{p}, \mathbf{x})$  va être donnée par l'hamiltonien suivant :

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\chi}\mathbf{p}^2 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}). \tag{III.3}$$

Le premier terme de l'hamiltonien correspond à l'énergie d'un oscillateur harmonique, où  $\chi$  est simplement la polarisabilité du dipôle. Le second terme, quand à lui, correspond à l'énergie d'interaction entre le dipôle et le champ électrique  $\mathbf{E}$ . A partir de cet hamiltonien, on peut construire et calculer la fonction de partition  $Z$  pour ce système, et si  $\mathbf{x}$  est confiné dans un volume  $V$ , dans un espace à  $D$  dimensions, alors nous avons :

$$Z = \int_V d\mathbf{x} \int_{\mathbb{R}^D} d\mathbf{p} \exp\left(-\beta\frac{\mathbf{p}^2}{2\chi} + \beta\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x})\right). \tag{III.4}$$

Si maintenant, on considère que le dipôle s'adapte instantanément aux variations locales du champ électrique de manière à minimiser l'énergie, alors, nous pouvons obtenir un hamiltonien effectif pour  $\mathbf{x}$ . Pour cela, il suffit d'intégrer (III.4) sur  $\mathbf{p}$  en complétant le carré et en pratiquant une intégrale Gaussienne. A un coefficient de proportionnalité près, nous obtenons

$$Z_{eff} = \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{x} \exp(-\beta H_{eff}(\mathbf{x})), \quad (\text{III.5})$$

où l'hamiltonien effectif dans cette limite est donné par :

$$H_{eff}(\mathbf{x}) = -\frac{\chi \mathbf{E}^2(\mathbf{x})}{2}. \quad (\text{III.6})$$

L'équation (III.6) est presque l'hamiltonien du problème (PA) avec le potentiel donné par (III.1). Ici  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  est le gradient d'un champ Gaussien, cependant, on s'attend à ce que sa statistique soit elle aussi Gaussienne (bien que sa fonction de corrélation soit différente). Si maintenant on fixe la polarisabilité du dipôle  $\chi$  égale à 1, on retrouve exactement dans cette limite le potentiel de l'équation (III.1). Ainsi, le modèle que l'on va étudier dans ce chapitre, correspond au modèle de dipôle diffusant dans un champ électrique aléatoire, dans une limite que l'on va appeler *adiabatique*. Dans le chapitre 5 nous étudierons le problème de dipôle directement, au delà de cette limite.

## 1.2 Le champ Gaussien

Pour étudier numériquement le problème (PA) avec le potentiel (III.1), il faut pouvoir simuler l'équation (II.8), et pour cela, nous disposons des algorithmes présentés dans le chapitre précédent. Cependant, pour simuler le champ Gaussien  $\phi$ , nous allons utiliser une méthode standard mise en place par Kraichnan [92] où on développe le champ en modes de Fourier,

$$\phi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^N \cos(\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x} + \epsilon_n), \quad (\text{III.7})$$

où  $N$  est le nombre de modes dans le développement et  $\epsilon_n$ , une phase aléatoire distribuée uniformément sur  $[0, 2\pi[$ .  $\mathbf{k}_n$ , quant à lui, est un vecteur d'onde aléatoire indépendant, tiré de la distribution suivante :

$$p(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^D} \int d\mathbf{x} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \Delta(\mathbf{x}). \quad (\text{III.8})$$

Pour les simulations, nous choisissons pour fonction de corrélation  $\Delta(\mathbf{x}) = \exp(-\frac{\mathbf{x}^2}{2})$  et dans ces conditions, chaque composante du vecteur  $\mathbf{k}_n$  est une variable aléatoire Gaussienne de moyenne nulle et de variance unité. Dans la limite où le nombre de modes utilisés est grand ( $N \rightarrow \infty$ ), le champ ainsi généré devient Gaussien. Ainsi, le modèle que nous allons simuler n'est pas exactement celui décrit par le potentiel (III.1) mais un modèle un peu différent à cause de la finitude du nombre de modes. On peut alors se demander si cela aura un impact sur les résultats. Pour répondre à cette question, nous pouvons reprendre les résultats présentés dans le chapitre précédent dans le cas d'un champ purement Gaussien ( $V(\phi) = \phi$ ). A une dimension, nous avons montré que la constante de diffusion de ce problème est donnée par la formule (II.72). On peut alors recalculer les moyennes sur le désordre en utilisant la forme (III.7) pour  $\phi$  et comme le champ est statistiquement invariant par translation on trouve :

$$\langle \exp(\pm\beta\phi) \rangle_d = \left[ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\epsilon \exp\left(\pm\beta\sqrt{\frac{2}{N}} \cos(\epsilon)\right) \right]^N = I_0\left(\beta\sqrt{\frac{2}{N}}\right)^N. \quad (\text{III.9})$$

Où  $I_0$  est la fonction de Bessel modifiée d'ordre 0 [72]. A  $z$  petit, la fonction  $I_0$  se comporte comme [72]

$$I_0(z) = 1 + \frac{\frac{1}{4}z^2}{(1!)^2} + \frac{\left(\frac{1}{4}z^2\right)^2}{(2!)^2} + O(z^6), \quad (\text{III.10})$$

et à  $z$  grand comme [72]

$$I_0(z) = \frac{\exp(z)}{\sqrt{2\pi z}} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{z}\right) \right]. \quad (\text{III.11})$$

Si nous utilisons ce résultat, alors la constante de diffusion va finalement s'écrire :

$$\kappa_e^{(PA)} = \kappa_0 I_0\left(\beta\sqrt{\frac{2}{N}}\right)^{-2N}. \quad (\text{III.12})$$

Dans la limite où  $N$  est grand et  $\beta$  reste fini, en utilisant le développement (III.10), nous retrouvons la formule (II.75) pour la constante de diffusion dans le cas purement Gaussien. Ceci nous montre la validité de cette méthode. Cependant, à très basse température, quand  $\beta \gg \sqrt{N}$ , nous pouvons utiliser le comportement asymptotique donné par l'équation (III.11) pour obtenir

$$\kappa_e^{(PA)} = \kappa_0 \left(\frac{8\pi^2\beta^2}{N}\right)^{\frac{N}{2}} \exp(-2\beta\sqrt{2N}) \sim \exp\left(-\frac{2\sqrt{2N}}{T}\right), \quad (\text{III.13})$$

et retrouver la loi d'Arrhenius illustrée par l'équation (II.44). Il est intéressant de noter que dans ce cas, la barrière d'énergie est donnée par  $\Delta E = 2\sqrt{2N}$ , ce qui correspond simplement à la plus grande différence d'énergie possible pour le champ  $\phi$  exprimé en série de Fourier avec  $N$  modes. Nous pouvons également calculer la constante de diffusion à deux dimensions, en utilisant la formule (II.81) établie au chapitre précédent, car on a bien l'équivalence statistique nécessaire<sup>1</sup>. En utilisant alors le développement (III.10) quand  $N \rightarrow \infty$  mais  $\beta$  reste fini, nous retrouvons, comme à une dimension, le résultat exact (II.82) du champ purement Gaussien. Cependant, à très basse température,  $\beta \gg \sqrt{N}$  et en utilisant le comportement asymptotique (III.11), nous obtenons

$$\kappa_e^{(PA)} = \kappa_0 \left(\frac{8\pi^2\beta^2}{N}\right)^{\frac{N}{4}} \exp(-\beta\sqrt{2N}) \sim \exp\left(-\frac{\sqrt{2N}}{T}\right). \quad (\text{III.14})$$

Ici aussi, nous retrouvons la loi d'Arrhenius à très basse température, mais contrairement à une dimension, la barrière d'énergie est donnée par  $\Delta E = \sqrt{2N}$ , ce qui correspond à la moitié de la différence d'énergie de  $\phi$ . Ceci est logique, car en deux dimension, la particule n'a pas besoin de franchir les plus grosses barrières mais peut les contourner. Ainsi, à très basse température, des effets de taille finie commencent à apparaître et le fait que le champ ne soit pas tout à fait Gaussien est à prendre en compte pour le modèle que l'on étudie.

<sup>1</sup>D'après (III.7), il est clair que  $\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle = \langle -\phi(\mathbf{x}) \rangle$

## 2 Mise en évidence d'une transition vitreuse

Le modèle que l'on étudie est donc celui d'une particule diffusant dans un potentiel aléatoire donné par l'équation (III.1). Ce qui nous intéresse, ce sont les propriétés dynamiques de ce système et notamment la constante de diffusion  $\kappa_e^{(PA)}$ . En effet, nous avons vu précédemment que l'on pouvait relier la constante de diffusion aux propriétés de relaxation du système (équation (II.3)) et si elle s'annule, cela va correspondre à un ralentissement dramatique de la dynamique et donc à une divergence du temps de relaxation  $\tau$ . Le fait que la constante de diffusion s'annule est donc une signature dynamique d'une transition vitreuse du modèle.

### 2.1 Résultats analytiques

Dans ce modèle, bien que le champ aléatoire ne soit plus Gaussien, en utilisant les formules du chapitre précédent, il est possible de calculer analytiquement la constante de diffusion en une et deux dimensions. Nous allons alors distinguer deux cas.

#### 2.1.a Cas où $\phi$ est purement Gaussien

Nous avons montré que la constante de diffusion d'une particule dans un potentiel aléatoire à une dimension, qui est statistiquement invariant par translation, est donnée par la formule (II.72). Il faut donc être capable de calculer la moyenne sur le désordre du potentiel  $V$  à chaque point. Dans le cas où  $V$  est donné par (III.1) et que la distribution de  $\phi$  est Gaussienne (équation (II.74)), alors la moyenne sur le désordre va s'écrire

$$\langle \exp(\pm\beta V(\phi)) \rangle_d = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\phi) \exp\left(\pm\beta \frac{\phi^2}{2}\right) = (1 \pm \beta)^{-1/2}. \quad (\text{III.15})$$

En réinjectant ce résultat dans (II.72), il est très facile de montrer que la constante de diffusion de ce problème est donnée par la formule

$$\kappa_e^{(PA)} = \kappa_0 \sqrt{1 - \beta^2}. \quad (\text{III.16})$$

Ce résultat, bien que simple est l'un des plus importants de cette thèse. En effet, contrairement au cas où  $V$  est Gaussien, il existe une température de transition non nulle  $T_C$  pour laquelle la constante de diffusion va s'annuler. De plus, comme (II.72) est symétrique par rapport au changement de signe  $\beta \rightarrow -\beta$ , le résultat (III.16) l'est aussi et la température critique va s'écrire

$$T_C = \frac{1}{\beta_C} = \pm 1. \quad (\text{III.17})$$

Ici, une température négative correspond simplement à un changement de signe du potentiel (III.1). A la température critique  $T_C$ , une transition dynamique a donc lieu entre deux régimes différents. Au dessus de  $T_C$ , le système est diffusif et l'écart quadratique augmente linéairement avec le temps. Alors que en dessous de  $T_C$ , le système est sous-diffusif et l'écart quadratique est donné par la formule (II.2), on parle de diffusion anormale. Cette transition peut être associée à une transition vitreuse structurelle, décrite dans le premier chapitre. En effet, nous pouvons relier la constante de diffusion au temps de relaxation  $\tau$  et quand  $\kappa_e^{(PA)}$  va s'annuler,  $\tau$  va diverger comme dans un verre. Ce résultat n'est pas vraiment surprenant car ce problème peut être relié au modèle de pièges introduit au chapitre précédent, où la position des pièges est donnée ici par la position des minima du potentiel, correspondant aux 0 du champ  $\phi$ , et le temps de piégeage par la formule d'Arrhenius (II.44). De plus, si nous supposons que les

barrières d'énergie sont proportionnelles au potentiel même,  $\Delta E = \alpha \frac{\phi^2}{2}$ , où  $\alpha$  est simplement un coefficient de proportionnalité positif, alors (II.44) devient

$$\tau \sim \tau_0 \exp\left(\frac{\beta\alpha\phi^2}{2}\right). \quad (\text{III.18})$$

Si nous moyennons sur le désordre en utilisant la distribution de  $\phi$  (II.74), alors nous trouvons que  $\bar{\tau}$  va diverger pour  $\beta\alpha > 1$ . Nous obtenons ainsi une transition dynamique à la température  $T_C = \alpha$ . Cette analogie peut-être poussée plus loin et nous allons montrer dans le paragraphe 3, qu'à basse température, ce modèle est effectivement bien décrit par un modèle de piège pour une valeur de  $\alpha$  égale à 1.

Nous pouvons aussi calculer la constante de diffusion à deux dimensions, mais il y a un problème car dans notre cas, il n'y a pas invariance statistique par la transformation  $V(\phi) \rightarrow -V(\phi)$ . Nous ne pouvons donc pas utiliser directement la formule (II.81). Pour contourner ce problème, nous allons définir un nouveau potentiel, fonction de deux champs Gaussien  $\phi$  et  $\phi'$  tel que

$$V(\phi, \phi') = \frac{\phi^2}{2} - \frac{\phi'^2}{2}, \quad (\text{III.19})$$

alors  $V$  devient statistiquement invariant et en appliquant la formule (II.81), nous retrouvons exactement le même résultat qu'à une dimension et  $\kappa_e^{(PA)}$  est donné par l'équation (III.16). Ainsi, avec ce choix astucieux de potentiel, la transition reste présente en deux dimensions à la même température critique (III.17). Dans [91], les auteurs ont étudié le problème du dipôle diffusant dans un potentiel électrostatique Gaussien présenté ici. Dans cette étude, aucun indice numérique de la présence de la transition, dans les simulations à trois dimensions, n'a pu être mis en évidence, ce qui contredit les résultats analytiques obtenus ici. Cependant, pour générer le champ  $\phi$ , les auteurs ont utilisé la méthode de Kraichnan [92] avec un nombre fini de mode  $N$ . Or, nous avons vu que dans le cas purement Gaussien, des effets de taille finie apparaissent à très basse température, il est donc important de comprendre ces effets dans ce modèle pour voir s'ils peuvent être responsables des résultats de [91].

### 2.1.b Cas où $N$ est fini

Pour calculer la constante de diffusion quand le champ  $\phi$  est généré par la formule (III.7), avec un nombre de modes fini, nous allons utiliser le même type de calcul que précédemment. Pour cela, nous allons d'abord effectuer une transformation de Hubbard-Stratanovich, définie par la formule :

$$\exp\left[\frac{x^2}{2}\right] = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp\left[-\frac{y^2}{2} + xy\right]. \quad (\text{III.20})$$

Si nous appliquons cette transformation sur le champ  $\phi$  à l'un des deux termes de la formule (II.72), alors nous obtenons

$$\left\langle \exp\left(\beta \frac{\phi^2}{2}\right) \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \left\langle \exp\left(z\sqrt{\beta}\phi\right) \right\rangle. \quad (\text{III.21})$$

Si  $\phi$  est donné par l'équation (III.7), alors, comme le champ est statistiquement invariant par translation, nous pouvons calculer la moyenne sur le désordre et (III.21) devient :

$$\begin{aligned} \left\langle \exp \left( \beta \frac{\phi^2}{2} \right) \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left( -\frac{z^2}{2} \right) I_0 \left( z \sqrt{\frac{2\beta}{N}} \right)^N \\ &= \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp(-Nf(u)), \end{aligned} \quad (\text{III.22})$$

où nous avons effectué le changement de variable  $u = zN^{-1/2}$ .  $I_0$  est la fonction de Bessel modifiée d'ordre zéro, introduite précédemment, et la fonction  $f(u)$  est donnée par :

$$f(u) = \frac{u^2}{2} - \ln \left[ I_0 \left( u \sqrt{2\beta} \right) \right]. \quad (\text{III.23})$$

Dans la limite où le nombre de modes  $N$  devient grand, nous pouvons alors évaluer l'intégrale (III.22) par la méthode du col, dans laquelle, l'intégrale est dominée par le minimum de  $f$ . Pour cela, nous nous plaçons dans la limite où  $N \rightarrow \infty$  et  $\beta$  reste fini. Cela signifie alors que  $u \rightarrow 0$  et, nous pouvons utiliser le développement de Taylor (III.10) pour  $I_0$ , ce qui nous donne pour  $f$  :

$$f(u) = (1 - \beta) \frac{u^2}{2} + \beta^2 \frac{u^4}{16} + O(u^6). \quad (\text{III.24})$$

Nous voyons alors apparaître une transition dynamique à  $\beta_C = 1$ , mathématiquement équivalente à une transition ferromagnétique en champ moyen ! Dans ce cas,  $f$  joue le rôle de l'énergie libre et  $u$  de l'aimantation moyenne par spin. Pour  $\beta < \beta_C$ , la solution est unique et l'aimantation est nulle, alors que pour  $\beta > \beta_C$  il y a une brisure de symétrie et deux solutions non nulles apparaissent pour l'aimantation. Dans la phase haute température où  $\beta < 1$ ,  $u^* = 0$  est l'unique solution qui minimise  $f$ , nous pouvons alors intégrer (III.22) à l'ordre  $O(N^{-2})$ , ce qui donne :

$$\left\langle \exp \left( \beta \frac{\phi^2}{2} \right) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{1-\beta}} \left[ 1 - \frac{3\beta^2}{16N(1-\beta)^2} + O \left( \frac{1}{N^2} \right) \right]. \quad (\text{III.25})$$

De plus, nous remarquons que pour  $\beta$  négatif, il n'y a pas de transition, et  $u^* = 0$  reste l'unique solution quel que soit  $\beta$ , donc, le terme  $\langle \exp(-\beta \frac{\phi^2}{2}) \rangle$  va se comporter analytiquement quand  $N \rightarrow \infty$ . Il sera alors donné par la formule (III.25) où nous avons appliqué le changement  $\beta \rightarrow -\beta$ . De ces deux expressions, nous pouvons finalement en déduire  $\kappa_e^{(PA)}$ , et dans la phase haute température, nous avons finalement :

$$\kappa_e = \kappa_0 \sqrt{1 - \beta^2} \left[ 1 + \frac{3\beta^2}{8N} \frac{\beta^2 + 1}{(1 - \beta^2)^2} + O \left( \frac{1}{N^2} \right) \right]. \quad (\text{III.26})$$

Dans la limite stricte où  $N \rightarrow \infty$ , nous retrouvons le résultat exact (III.16), ce qui nous montre bien la validité du développement présenté ici. De plus, nous remarquons que loin de la transition (pour  $\beta \ll 1$ ), pour un nombre de modes, classiquement pris dans les simulations de l'ordre de 128, les effets de taille finie sont totalement négligeables. Cependant, au fur et à mesure que l'on se rapproche de la transition, ces effets deviennent de plus en plus importants, à cause du terme en  $(1 - \beta^2)^{-2}$  et un écart significatif avec le cas où  $N$  est infini est à prévoir. Maintenant, quand  $\beta > 1$ , le point col n'est plus à  $u^* = 0$ , et si nous voulons minimiser  $f$ , nous allons trouver deux minima à  $\pm u^*$  (comme dans la transition ferromagnétique où apparaît une aimantation non nulle  $m^*$ ). Et par intégration autour des deux points cols, nous obtenons dans la phase basse température

$$\kappa_e = \frac{\kappa_0}{2} \sqrt{(1 + \beta)|f''(u_c)|} \exp(Nf(u_c)). \quad (\text{III.27})$$

Où le facteur de  $1/2$  provient du fait que l'on a deux intégrales équivalentes à calculer autour de  $+u^*$  et  $-u^*$ . En minimisant l'expression (III.24), nous trouvons que  $u^* = \pm \frac{2}{\beta} \sqrt{\beta - 1}$  et par conséquent :

$$\kappa_e = \frac{\kappa_0}{2} \sqrt{2(\beta^2 - 1)} \exp\left(-N \frac{(\beta - 1)^2}{\beta^2}\right). \quad (\text{III.28})$$

Premièrement, on remarque que l'expression (III.28) n'est nulle que dans la limite où le nombre de modes est infini. Comme pour le cas Gaussien, les effets de taille fini sont réellement très importants à basse température, et dans ce cas, ils effacent toute trace de la transition ! Pour savoir quel va être le comportement à très basse température, nous pouvons utiliser le développement (III.11). Si on minimise alors (III.23) nous trouvons que  $u^* = \sqrt{2\beta}$  et donc

$$\kappa_e = \frac{\kappa_0}{2} \sqrt{(1 + \beta)} \exp(-\beta N) \sim \exp\left(-\frac{N}{T}\right). \quad (\text{III.29})$$

Nous obtenons alors, comme dans le cas Gaussien, une loi d'Arrhénus à très basse température, où la barrière d'énergie,  $\Delta E = N$  est donnée par la différence maximum d'énergie pour  $V$ , construit avec  $N$  modes. Dans ce problème, la transition peut se comprendre dans le paradigme des modèles de piège comme dû à la présence de barrières de potentiel infinies. Il est alors clair que, en présence d'un nombre de mode finis, ces barrières ne divergeront jamais et les particules pourront toujours diffuser par activation thermique à température finie. Ces résultats montrent clairement l'importance des effets de taille finie, qui sont sûrement responsables dans [91] de l'absence de transition dans les simulations. Pour en illustrer les effets, sur la figure (III.2), nous avons tracé, en intégrant numériquement (III.22), la constante de diffusion pour différentes valeurs de  $N$ , en fixant la constante de diffusion sans désordre à  $\kappa_0 = 1$ .

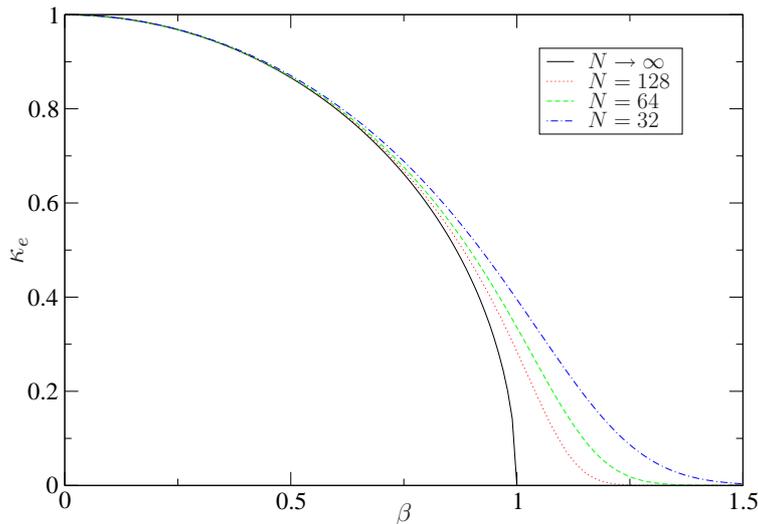


FIG. III.2 – Résultats exacts pour la constante de diffusion  $\kappa_e^{(PA)}$  pour  $V(\phi) = \frac{\phi^2}{2}$ . La ligne pleine correspond au champ Gaussien pur ( $N \rightarrow \infty$ ) et les traits en rouge, vert et bleu, respectivement à  $N = 128, 64$  et  $32$ .

Pour  $N$  fini, la transition à  $\beta_C = 1$  n'est plus présente. Par exemple, pour  $N = 128$ , qui est souvent choisi dans les simulations comme une très bonne approximation,  $\kappa_e(1) \approx 0.3$ , ce qui est toujours d'ordre 1. Enfin, plus on diminue le nombre de modes, plus on s'éloigne de la courbe théorique. Il est aussi intéressant de noter que loin de la transition (de  $\beta = 0$  jusqu'à  $\beta = 0.5$ ) le nombre de modes importe peu et on reproduit très bien le résultat exact quel que soit  $N$ . C'est seulement proche de la transition, quand la dynamique se ralentit et que les effets de taille finie se font sentir.

### 2.2 Études numériques

Pour vérifier ces prédictions analytiques, il faut réaliser des simulations numériques du problème (PA). Pour cela, nous avons vu au chapitre précédent que nous pouvons simuler le processus de Langevin (II.8) grâce à un algorithme de Runge-Kutta à l'ordre  $O(\Delta t^2)$  (II.40). De plus, pour générer le champ  $V(\phi)$  donné par l'équation (III.1), nous utiliserons la méthode (III.7). Pour chaque instance du désordre, nous allons générer des trajectoires pour lesquelles nous allons calculer le second moment ou l'écart quadratique, que nous allons ensuite moyenner ; il s'agit là d'une moyenne thermodynamique. On répète le processus pour chaque instance du désordre que nous moyennons. Cette technique de simulation va nous permettre d'avoir accès au comportement asymptotique. Ainsi, à haute température (au dessus de  $T_C = 1$ ), où la diffusion est normale, nous allons pouvoir calculer la constante de diffusion en ajustant au mieux la formule (II.18) avec les courbes numériques. Clairement, pour être sûr d'avoir atteint le régime asymptotique et donc l'équilibre thermodynamique, il va falloir simuler le processus de manière à avoir diffusé sur une longue distance (une dizaine de longueurs de corrélation). De plus, comme la diffusion devient de plus en plus lente, à mesure que l'on se rapproche de la transition, le temps de simulation pour atteindre l'équilibre devient très grand, ce qui va poser un problème du point de vue du temps de calcul. Dans la phase haute température, les résultats pour l'écart quadratique moyen sont donnés par la figure (III.3). Ils ont été moyennés sur 10 000 trajectoires pour chacune des 200 réalisations du champ  $V$ , créé en utilisant 128 modes. Le temps total des simulations consiste alors à 10 000 pas d'intégrations, en utilisant un pas de temps  $\Delta t = 0.1$  dans l'équation de Runge-Kutta du second ordre. Pour finir, nous fixons la constante de diffusion sans désordre à  $\kappa_0 = 1$  par souci de simplicité. Comme attendu, lorsque nous baissons la température et que nous nous rapprochons de la transition, les particules diffusent de moins en moins loin. Nous allons alors mesurer la constante de diffusion à partir de la moitié des simulations ( $t = 500$ ), pour être sûr d'avoir atteint l'équilibre, grâce à la formule (II.18). Cependant, à faible dimensionnalité, cette formule n'est pas exacte et il faut prendre en compte des corrections au terme linéaire qui peuvent devenir importantes proches de la transition.

#### 2.2.a Importance des corrections en faible dimension

Pour un simple marcheur aléatoire sur un réseau qui a une probabilité  $p$  de sauter à chaque pas de temps sur un site voisin, nous pouvons montrer que l'écart quadratique moyen, suivant la dimension d'espace, va être donné par la formule (II.18) avec des termes correctifs [93]

$$\begin{aligned}
 \langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle &= 2\kappa_e t + O(\sqrt{t}) \quad D = 1, \\
 &= 4\kappa_e t + O(\ln(t)) \quad D = 2, \\
 &= 2D\kappa_e t + O\left(t^{-\frac{d}{2}+1}\right) \quad D \geq 3.
 \end{aligned}
 \tag{III.30}$$

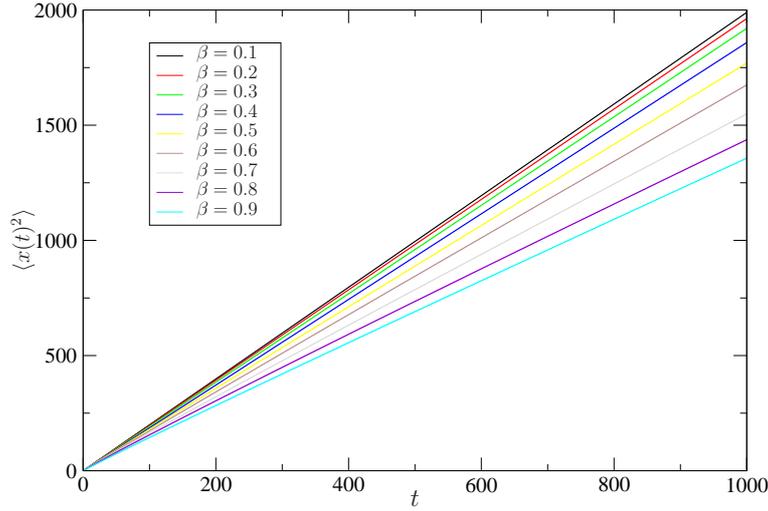


FIG. III.3 – Simulation de l'écart quadratique moyen par un processus de Runge-Kutta à l'ordre deux, en une dimension, donné par (II.40), pour différentes valeurs de  $\beta$ .

Ainsi, même dans ce cas simple et sans désordre, à faible dimensionnalité, ces corrections sont à prendre en compte. Elle sont dues au fait qu'en une et deux dimensions, le marcheur aléatoire est récurrent. Nous en avons d'ailleurs vu l'importance dans le chapitre précédent, lorsque nous avons calculé l'exposant anormal  $\nu$ . Ainsi, en dimension une, il revient toujours à sa position d'origine si on attend suffisamment longtemps et en deux dimensions, il s'en éloigne mais très lentement (logarithmiquement). La question que nous pouvons nous poser alors est de savoir si ces corrections sont les mêmes en présence du désordre. Les simulations que nous avons réalisé ont été faites en une dimension, nous allons donc nous placer en dimension une, pour calculer le terme correctif au terme linéaire. Dans le paradigme des modèles de pièges présentés dans le chapitre précédent, nous avons vu que la particule est piégée dans les minima du potentiel pendant un temps  $\tau$ , et dans ce modèle, la distribution des temps  $\tau_i$ , associé à chaque piège est donnée par une distribution de Lévy (II.46). Pour  $\mu < 1$ ,  $\bar{\tau}$  diverge et la diffusion devient anormale, alors que pour  $\mu > 1$ ,  $\bar{\tau}$  est fini et la diffusion est normale.

Dans cette phase, pour calculer les corrections, il nous suffit alors d'appliquer le théorème de la limite centrale CLT donné par l'équation (II.51). Nous avons aussi vu, dans le chapitre précédent, que le désordre peut être traité dans deux limites distinctes qui en faible dimension vont engendrer des résultats différents. Le désordre recuit, où on attribue une nouvelle valeur  $\tau_i$  à chaque fois que l'on arrive sur le site  $i$ , et le désordre trempé, où on garde définitivement une valeur  $\tau_i$  associée au site  $i$ . Pour le désordre recuit, après  $N$  sauts, le temps total est simplement donné par la somme de  $N$  variables aléatoire (II.48), et si nous appliquons le CLT, nous trouvons :

$$t = N\bar{\tau} + \sigma\sqrt{N}. \quad (\text{III.31})$$

Si nous inversons maintenant cette relation, en se rappelant la formule (II.47) pour l'écart quadratique moyen, nous trouvons :

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2\kappa_e t + O\left(\sqrt{t}\right), \text{ avec } \kappa_e = \frac{\langle l^2 \rangle}{2\bar{\tau}}. \quad (\text{III.32})$$

Ainsi, en une dimension, dans le cas d'un désordre recuit, nous trouvons une correction en  $\sqrt{t}$

par rapport au comportement linéaire. Ceci est exactement la correction attendue en l'absence de désordre (III.30). Cependant pour le désordre trempé, nous allons voir que même dans cette phase, à une dimension, des différences vont apparaître. Dans ce cas, après  $N$  sauts, nous avons vu que le marcheur a en moyenne visité seulement  $\sqrt{N}$  sites distincts  $\sqrt{N}$  fois (II.62). Alors, le temps total est donné par la formule (II.63) et en appliquant le CLT, nous trouvons :

$$t = N\bar{\tau} + \sigma N^{3/4}. \quad (\text{III.33})$$

En inversant la aussi cette relation, et en utilisant la formule (II.47), l'écart quadratique moyen est donné par

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2\kappa_e t + O(t^{3/4}). \quad (\text{III.34})$$

Dans ce cas, la correction au comportement linéaire est différente de la formule (III.30). Le désordre joue ici un rôle important, et le terme de correction va alors décroître plus lentement dans ce cas.

Cependant, tout n'est pas si simple. En effet, dans ce calcul, un détail important a été masqué. Le CLT ne peut s'appliquer que si la variance ( $\sigma = \overline{\tau^2} - \bar{\tau}^2$ ) est finie. Or, si nous regardons de plus près la distribution (II.46), certes pour  $\mu > 1$ , la moyenne est finie, mais pour  $1 < \mu < 2$ , le second moment est divergent ! Les résultats (III.32), pour un désordre recuit, et (III.34), pour un désordre trempé, ne sont alors réellement valables que pour  $\mu > 2$ , où la variance est finie, et la loi stable est la loi normale. Dans la fenêtre  $1 < \mu < 2$ , on quitte le bassin d'attraction de la loi normale et il faut, comme dans le chapitre précédent calculer la nouvelle loi stable. En appliquant les arguments du chapitre 2, nous trouvons de la même façon, que le processus  $S_\alpha$  va admettre une loi limite seulement si  $\alpha = 1$ , et  $S_1$  va alors converger vers [37]

$$S_1 = \bar{\tau} + O(N^{\mu-1}). \quad (\text{III.35})$$

### 2.2.b Cas recuit

Après  $N$  sauts, le temps total est simplement donné par la somme de  $N$  variables aléatoires  $\tau$  (II.48). Nous pouvons alors ré-écrire à l'aide de (III.35), (II.48) comme

$$t = N \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tau_i \right) = N\bar{\tau} + O(N^{\frac{1}{\mu}}). \quad (\text{III.36})$$

Si nous inversons maintenant cette relation, nous trouvons finalement que pour  $1 \leq \mu \leq 2$ , l'écart quadratique moyen va se comporter comme

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2\kappa_e t + O\left(t^{\frac{1}{\mu}}\right). \quad (\text{III.37})$$

La présence du désordre influe donc sur le comportement du terme correctif ! Il existe alors deux régimes normaux de diffusion. L'un dit de *haute température*, où le rôle du désordre est négligeable et qui correspond au cas où  $\mu > 2$ , et l'autre, dit de *basse température*, où le désordre engendre une dynamique plus lente (le terme correctif est plus important que dans le cas sans désordre), qui correspond au cas où  $1 \leq \mu \leq 2$ . Ainsi, à une dimension, pour le désordre recuit, nous pouvons résumer le comportement de l'écart quadratique moyen par l'équation suivante

$$\langle X(t)^2 \rangle \sim \begin{cases} t^\mu, & \text{pour } \mu < 1, \\ 2\kappa_e t + O(t^{1/\mu}), & \text{pour } 1 \leq \mu \leq 2, \\ 2\kappa_e t + O(\sqrt{t}), & \text{pour } \mu > 2. \end{cases} \quad (\text{III.38})$$

### 2.2.c Cas trempé

Nous effectuons le même calcul pour le désordre trempé, et après  $N$  sauts, le temps total est maintenant donné par la formule (II.63). Si nous appliquons alors le résultat (III.35), (II.63) devient

$$t = \sqrt{N}\sqrt{N} \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{\sqrt{N}} \tau_i \right) = N \left( \bar{\tau} + O\left(\sqrt{N}^{\frac{1}{\mu}-1}\right) \right) = N\bar{\tau} + O\left(N^{\frac{1}{2\mu}+\frac{1}{2}}\right). \quad (\text{III.39})$$

Si nous inversons une dernière fois cette relation, nous trouvons finalement que pour  $1 \leq \mu \leq 2$ , l'écart quadratique moyen va se comporter comme

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2\kappa_e t + O\left(t^{\frac{\mu+1}{2\mu}}\right). \quad (\text{III.40})$$

Ici aussi, le désordre influe sur le comportement correctif, et il existe une transition entre un régime normal à *haute température* et un régime anormal à *basse température*. A une dimension, nous trouvons aussi une nette différence entre le désordre trempé et recuit, et à basse température, l'exposant correctif varie de  $\frac{1}{\mu}$  à  $\frac{\mu+1}{2\mu}$ , à cause des corrélations induites par le marcheur aléatoire. Nous pouvons finalement résumer les résultats obtenus pour un désordre trempé en une dimension, par la formule suivante

$$\langle X(t)^2 \rangle \sim \begin{cases} t^{\frac{2\mu}{\mu+1}}, & \text{pour } \mu < 1, \\ 2\kappa_e t + O\left(t^{\frac{\mu+1}{2\mu}}\right), & \text{pour } 1 < \mu < 2, \\ 2\kappa_e t + O\left(t^{3/4}\right), & \text{pour } \mu > 2. \end{cases} \quad (\text{III.41})$$

Le désordre dans notre problème provient d'un potentiel aléatoire gelé. Si nous voulons donc correctement le décrire à l'aide d'un modèle de piège, il faut traiter la variable aléatoire  $\tau_i$  comme une variable gelée et l'écart quadratique moyen va être donné par la formule (III.41). De plus, dans le prochain paragraphe, nous allons montrer que ce modèle correspond à un modèle de piège pour lequel  $\mu = \beta^{-1}$ , à un terme logarithmique près. Cela signifie que dans notre modèle, l'écart quadratique dans la phase normale va être donné par

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2\kappa_e^{(PA)} t + O(t^\theta), \quad \text{avec } \theta = \begin{cases} 3/4, & \text{pour } \beta < \frac{1}{2}, \\ \frac{\beta+1}{2}, & \text{pour } \frac{1}{2} \leq \beta \leq 1. \end{cases} \quad (\text{III.42})$$

Ce résultat est très important, car si nous ne prenons pas en compte la bonne correction au régime linéaire dans les simulations, nous allons mesurer une constante de diffusion fautive. Nous remarquons que plus on se rapproche de la transition à  $T_C = 1$ , plus le terme correctif devient grand, pour, à la transition, devenir du même ordre de grandeur que le terme linéaire. Ceci montre bien que la dynamique se ralentit au fur et à mesure que nous refroidissons, et il faut laisser évoluer le système de plus en plus longtemps pour atteindre le régime asymptotique et donc l'équilibre thermodynamique.

## 2.2.d Résultats

Pour extraire la constante de diffusion des simulations, il nous suffit alors maintenant d'ajuster au mieux l'équation (III.42) aux courbes de diffusion numérique tracées sur la figure III.3. Il s'avère alors crucial de choisir le bon exposant  $\theta$ , car les résultats pour la constante de diffusion vont changer qualitativement. Nous traçons sur la figure III.4 les résultats numériques pour

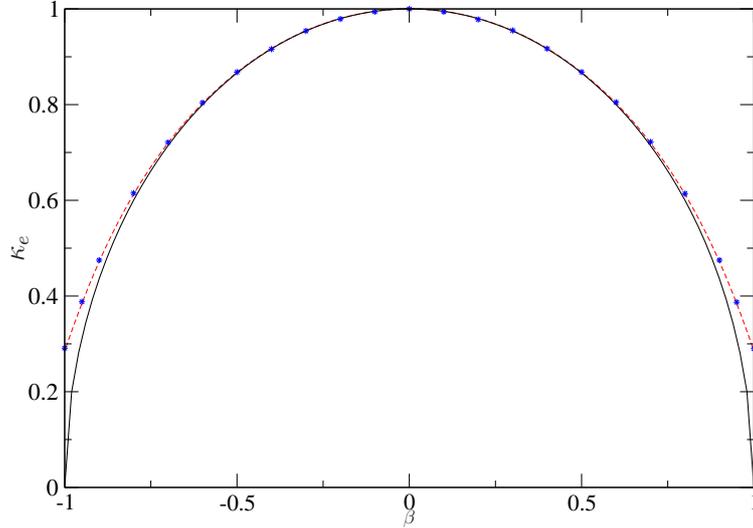


FIG. III.4 – Comparaison entre les résultats analytiques (III.16) (trait plein noir) et (III.22) (tirets rouges) et les résultats numériques (étoiles bleues) de  $\kappa_e^{(PA)}$  en une dimension.

$\beta \in [-1, 1]$  en comparaison avec le résultat analytique exact (III.16) et le résultat intégré de l'équation (III.22) pour le nombre de modes exact utilisé pour les simulation, ici  $N = 128$ . Les résultats numériques sont alors en parfait accord avec le résultat analytique pour un nombre fini de modes. Ainsi, la finitude de  $N$  vient masquer la transition qui est pourtant bien présente à  $\beta_c = 1$ , comme le montre la courbe noire. Nous avons aussi vérifié que si nous augmentons le nombre de modes dans les simulations, les données numériques se rapprochent bien de la courbe théorique pour  $N \rightarrow \infty$ . Ce résultat, en accord avec [91] explique pourquoi aucune transition n'est observée dans les études numériques lorsque la méthode de Kraichnan (III.7) est utilisée pour générer le champ. Enfin, nous remarquons que comme attendu, à une dimension, le résultat est symétrique par renversement du signe du potentiel. Pour nous assurer que l'approche que nous avons choisie pour le résultat (III.42) est correcte, nous avons effectué une autre série de mesures. En partant des courbes de diffusion de la figure III.3, nous avons ajusté au mieux la formule (III.42) en fixant cette fois la constante de diffusion à sa valeur théorique pour le nombre de modes utilisé, ici  $N = 128$ . Nous laissons alors varier l'exposant  $\theta$  et le pré-facteur de manière à reproduire au mieux les données numériques. Les résultats sont reportés sur la figure (III.5). L'accord entre la prédiction analytique et les simulations est très bon, et la transition entre les deux régimes est nettement présente, ce qui justifie l'approche utilisée et montre bien le lien qu'il existe entre le problème (PA) et le modèle de piège. Cependant, à très haute température ( $\beta \sim 0.1$ ), nous remarquons un net écart. Ceci est logique, car à haute température, les effets du désordre deviennent négligeables et l'exposant  $\theta$  va tendre vers sa valeur en l'absence de désordre, 0.5 quand  $\beta$  tend vers 0.

Nous avons donc montré que pour le problème (PA), si le potentiel aléatoire est donné par le carré d'un champ Gaussien (III.1), dans la phase haute température, nous pouvons définir un

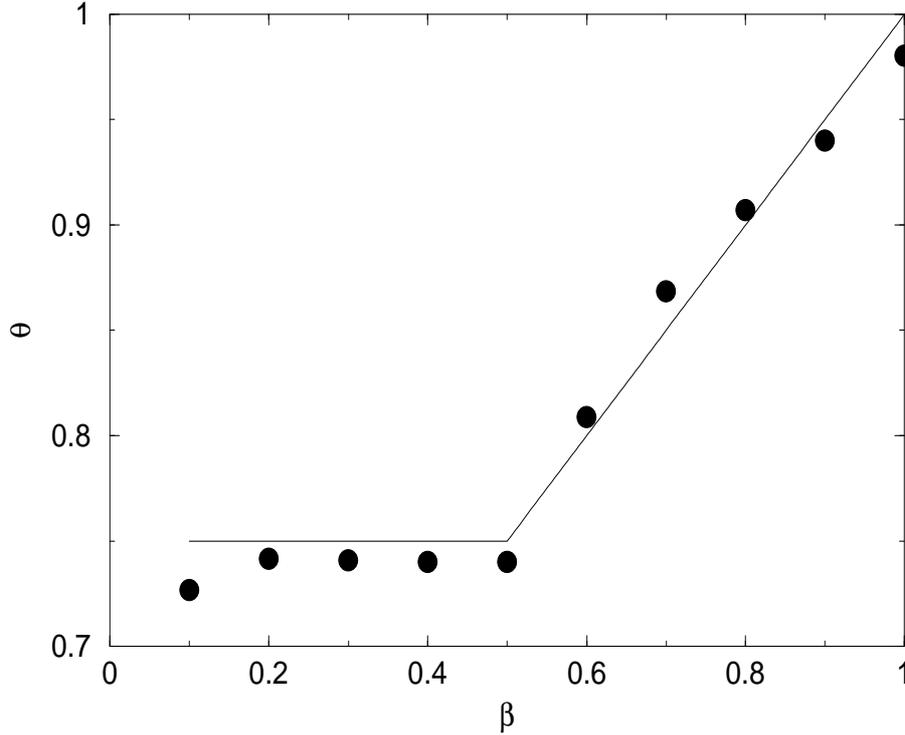


FIG. III.5 – Ajustement de l'exposant  $\theta$  sur les simulations (cercles), comparé à l'exposant prédit par l'équation (III.42) en fonction de  $\beta$

temps de relaxation  $\tau$  (II.3). Celui-ci va alors diverger pour une température critique  $T_C = 1$  comme

$$\tau \sim \frac{1}{(T - T_C)^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{III.43})$$

Cependant, quand le potentiel est construit à partir d'un nombre fini de modes, nous trouvons que dans la phase basse température  $T < T_C$ ,

$$\tau \sim \exp\left(\frac{N\Delta\epsilon(T)}{T}\right) \quad (\text{III.44})$$

où  $N\Delta\epsilon(T)$  s'interprète comme une barrière d'énergie dépendante de la température. Ainsi, en dimension une, cette barrière est donnée par la différence de potentiel maximum entre deux points, alors qu'en deux dimensions, elle est donnée seulement par la moitié. Enfin, nous avons mis en évidence un lien entre le problème (PA) et un modèle de piège qui nous a permis de calculer l'exposant correctif dans la phase normale. On va donc maintenant exploiter ce lien dans la phase sous-diffusive.

### 3 Étude de la phase basse température

En dessous de la température critique  $T_C = 1$ , on rentre dans une phase sous-diffusive, dite anormale, où le comportement temporel de l'écart quadratique moyen devient sous-linéaire et est donné par la formule (II.2). Cette phase est alors caractérisé par son exposant  $\nu$  tel que  $\nu < 1$ . Nous avons vu dans le paragraphe précédent, qu'il existe un lien entre le problème

(PA) et le modèle de piège, nous allons donc l'exploiter pour calculer  $\nu$ . Ainsi, à très basse température, nous avons vu que la particule va être piégée dans les minima du potentiel  $V$ . Le temps de piégeage  $\tau$  va être donné par la formule d'Arrhénius (II.44) dans laquelle la statistique des barrières d'énergie est proportionnelle à celle du potentiel même. Alors,  $\tau$  est donné par la formule (III.18) et si la distribution de  $\phi$  est donnée par (II.74), la distribution de  $\tau$  ce calcul grâce à la formule  $p(\tau)d\tau = p(\phi)d\phi$  et s'écrit

$$\rho(\tau) = \frac{\tau_0^{\frac{1}{\alpha\beta}}}{\tau^{1+\frac{1}{\alpha\beta}} \sqrt{\pi\alpha\beta \ln\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)}}. \quad (\text{III.45})$$

La distribution de temps de piégeage obtenue est presque la distribution de Levy (II.46) introduite dans le modèle de piège, au terme logarithmique près. Par analogie entre les deux distributions, nous pouvons écrire que  $\mu = \frac{1}{\alpha\beta}$ . De plus, pour un marcheur aléatoire dont la distribution de saut est donnée par (III.45), la valeur moyenne de  $\tau$  va diverger pour une température critique  $T_C = \alpha$ , générant ainsi une transition dynamique. Ces deux problèmes partageront donc la même température critique et seront totalement reliés, si et seulement si  $\alpha = 1$ . Nous pouvons alors utiliser le résultat (II.66) du modèle de piège pour calculer l'exposant  $\nu$  et nous obtenons à une dimension

$$\nu = \frac{2}{1 + \beta}. \quad (\text{III.46})$$

Cependant, cet argument est loin de prouver quoi que ce soit. Pour cela, nous allons calculer l'exposant  $\nu$  par une autre méthode et montrer que le résultat coïncide exactement avec le modèle de piège pour  $\alpha = 1$ .

#### 3.1 Temps de premier passage

À une dimension, on peut obtenir des renseignements sur les propriétés de transport en étudiant le temps de premier passage. Cela correspond au temps moyen que met la particule pour atteindre la distance  $L$  pour la première fois. Ce calcul peut être utilisé pour déterminer la constante de diffusion dans un potentiel à une dimension [75] ou pour trouver l'exposant d'une diffusion anormale dans un potentiel Gaussien avec une corrélation à longue distance (logarithmique) [94]. On note alors  $T(L)$ , la moyenne thermique (qui correspond à la moyenne sur les réalisations du bruit blanc) du temps auquel la particule test, démarrante à l'origine, atteint pour la première fois le point situé à la distance  $L$ .  $T(L)$  est donc exactement le temps de premier passage et, pour simplifier le calcul, on ne considère la diffusion que dans le demi-plan positif en établissant une condition au bord réfléchissante en  $x = 0$ . Sur la figure III.6 est représentée une trajectoire possible en deux dimensions. Nous mesurons alors  $T$ , lorsque la particule atteint la distance  $L$  pour la première fois. Dans ces conditions, on peut montrer [94] qu'en présence d'un potentiel  $V$ , le temps de premier passage est donné, en dimension une, par la formule

$$T(L) = \int_0^L dy dx \Theta(y - x) \exp(\beta V(\psi(y)) - \beta V(\psi(x))). \quad (\text{III.47})$$

Où  $\Theta(y - x)$  est simplement la fonction de Heaviside définie par :

$$\begin{aligned} \Theta(y - x) &= 0 \text{ si } y < x, \\ &= 1 \text{ si } y \geq x. \end{aligned} \quad (\text{III.48})$$

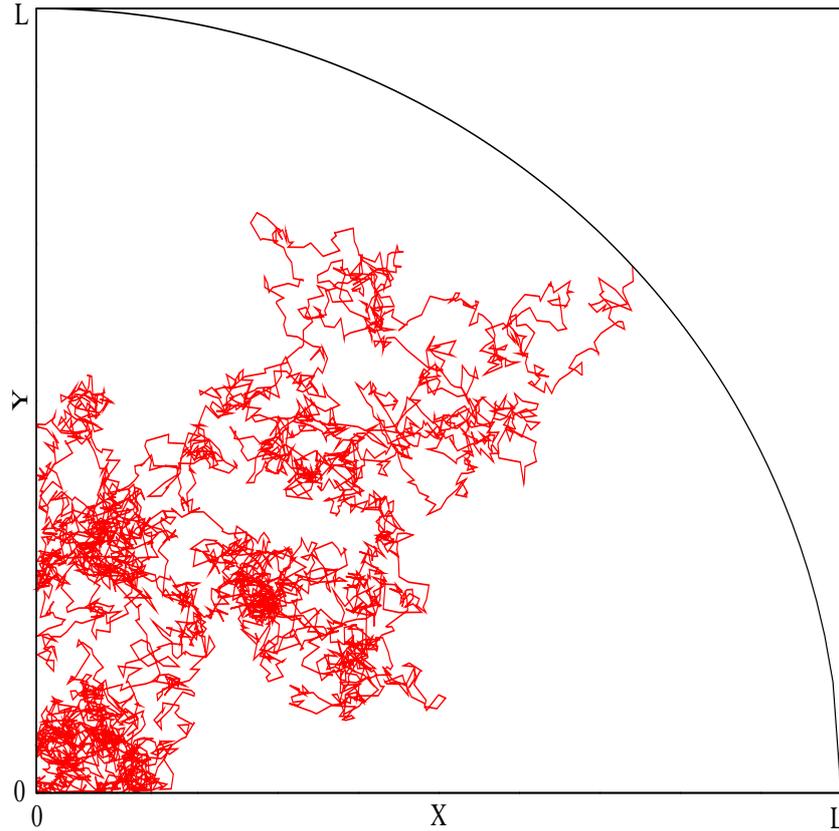


FIG. III.6 – Exemple de trajectoire en deux dimensions, avec des conditions aux bords réfléchissantes pour le calcul du temps de premier passage.

Ainsi, la valeur de  $T(L)$  va dépendre de la réalisation du potentiel  $V$  et il va donc falloir moyenner sur le désordre. Pour ce faire, nous allons maintenant faire appel à la théorie des répliques, souvent utilisé dans les systèmes désordonnés [3]. Elle consiste alors à répliquer  $n$  fois le système, et à chaque réplique, on associe une réalisation du désordre. On s'attend alors à ce que le système soit symétrique par changement d'indice de réplique (elles sont invisibles les unes aux autres), cependant, dans les systèmes vitreux, cette symétrie va être brisée suivant des scénarii plus ou moins compliqués. Cette méthode n'est pas vraiment rigoureuse mathématiquement, elle est cependant très efficace et prédit correctement de nombreux résultats. Ainsi, nous réalisons  $n$  répliques du système initial que nous étiquetons  $a, b, \dots$ , et nous définissons une nouvelle quantité  $T(L)^n$ , produit du temps de premier passage de chaque réplique. Si nous moyennons alors cette quantité sur le désordre, (III.47) devient

$$\langle T(L)^n \rangle = \int_0^L \prod_{a=1}^n dy_a dx_a \Theta(y_a - x_a) \left\langle \exp \frac{\beta}{2} \sum_{a=1}^n [\phi^2(y_a) - \phi^2(x_a)] \right\rangle. \quad (\text{III.49})$$

Si nous sommes capable de calculer l'intégrale (III.49), alors en utilisant l'astuce des répliques, on peut en fixant  $n = 1, 2, \dots$  calculer n'importe quel moment de  $T$ . Pour cela, nous allons définir un nouveau vecteur  $\Phi$ , à  $2n$  composantes, dans l'espace des répliques tel que

$$\Phi = (\Phi(y_1), \dots, \Phi(y_n), \Phi(x_1), \dots, \Phi(x_n)), \quad (\text{III.50})$$

### 3. ÉTUDE DE LA PHASE BASSE TEMPÉRATURE

et la matrice symétrique,  $2n \times 2n$ ,  $\mathbf{\Lambda}$  telle que

$$\Lambda_{ab} = \begin{cases} \delta_{ab} & \text{pour } 1 \leq a, b \leq n, \\ -\delta_{ab} & \text{pour } n+1 \leq a, b \leq 2n, \\ 0 & \text{partout ailleurs.} \end{cases} \quad (\text{III.51})$$

Alors, la somme sur les répliques dans l'exponentielle de l'équation (III.49) va être donnée, dans ce nouveau langage par

$$\sum_{a=1}^n (\phi^2(y_a) - \phi^2(x_a)) = \mathbf{\Phi} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Phi}, \quad (\text{III.52})$$

et la moyenne sur le désordre dans l'équation (III.49) se réduit à

$$\left\langle \exp \left( \frac{\beta}{2} \mathbf{\Phi} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Phi} \right) \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{\Phi} P(\mathbf{\Phi}) \exp \left( \frac{\beta}{2} \mathbf{\Phi} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Phi} \right). \quad (\text{III.53})$$

Ici  $P(\mathbf{\Phi})$  est seulement la généralisation de la distribution (II.74) dans l'espace des répliques et s'écrit

$$P(\mathbf{\Phi}) = \frac{(\det \mathbf{A})^{-1/2}}{(2\pi)^n} \exp \left( -\frac{1}{2} \mathbf{\Phi} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{\Phi} \right), \quad (\text{III.54})$$

où  $\mathbf{A}$  correspond à la matrice de corrélation de  $\mathbf{\Phi}$ . Il s'agit d'une matrice symétrique de taille  $2n \times 2n$ , tel que  $A_{ab} = \Delta(y_a - y_b)$ . La fonction de corrélation  $\Delta$  est alors celle définie dans le chapitre précédent, pour le champ  $\phi$ , avec la notation  $x_a = y_{n+a}$ . Nous pouvons alors intégrer explicitement sur  $\mathbf{\Phi}$  et la formule (III.49) s'écrit finalement

$$\langle T(L)^n \rangle = \int_0^L \prod_{a=1}^n dy_a dx_a \Theta(y_a - x_a) \det(\mathbf{I} - \beta \mathbf{A} \mathbf{\Lambda}) \quad (\text{III.55})$$

Ici,  $\mathbf{I}$ , correspond à la matrice identité. Nous pouvons alors, dans un premier temps, calculer le premier moment de  $T$  en fixant  $n = 1$ . Ce choix peut paraître étonnant car nous avons calculé l'intégrale (III.53) en moyennant sur le désordre pour  $n$  grand. Cependant, les résultats, bien que manquant de rigueur mathématique, sont en accord avec les calculs que l'on peut effectuer par d'autres méthodes. Dans ce cas, le temps de premier passage est alors donné par la formule

$$\langle T(L) \rangle = \int_0^L dy dx \Theta(y - x) (1 - \beta^2 \Delta^2(0) + \beta^2 \Delta^2(y - x))^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{III.56})$$

Dans la phase normale, pour  $\beta < 1$ , dans la limite où  $L$  est grand, cela donne finalement

$$\langle T(L) \rangle = \frac{L^2}{2\sqrt{1 - \beta^2}} - LC, \quad (\text{III.57})$$

avec

$$C = \int_0^{\infty} dz \left[ 1 - \left( 1 + \frac{\beta^2 \Delta^2(z)}{1 - \beta^2 \Delta^2(0)} \right)^{-\frac{1}{2}} \right]. \quad (\text{III.58})$$

Ainsi, lorsque le temps de premier passage est fini, dans la phase haute température, où  $\beta < 1$ , si nous ne gardons que le terme principal en  $L^2$  dans (III.57), alors  $L^2 \sim 2\sqrt{1 - \beta^2} \langle T(L) \rangle$  et nous retrouvons la constante de diffusion correcte (III.16) calculée précédemment. De plus,

si nous regardons de plus près la double intégrale (III.56), en supposant que  $\Delta(x)$  décroît de façon monotone (ce qui est le cas dans les simulations), alors  $\langle T(L) \rangle$  reste fini seulement si  $\Delta(L)^2 > (\beta^2 - 1)/\beta^2$ . Clairement, dans la phase haute température,  $\beta < 1$  et le second membre de l'inégalité est toujours négatif, ce qui implique que la condition est toujours respectée et  $\langle T(L) \rangle$  est fini. Cependant, dans la phase basse température, il va maintenant exister une échelle de distance critique  $L_C$  dépendante de la température, telle que pour  $L < L_C$ ,  $\langle T(L) \rangle$  est fini, et pour  $L > L_C$ , il diverge. Comme  $\Delta$  est une fonction monotone,  $L_C$  va décroître avec la température, ce qui correspond bien à l'image que l'on utilise pour interpréter les expériences sur les verres de spins [95–97], où le système se gèle progressivement sur des échelles de longueur de plus en plus grandes.

Dans l'esprit des arguments utilisés dans [94] pour un potentiel Gaussien à longue portée et en une dimension, nous pouvons prédire l'exposant de diffusion anormale dans la phase basse température  $\nu$  (bien que le développement présenté ici soit moins rigoureux). Pour cela, il faut d'abord remarquer que les termes qui causent la divergence, lorsque l'on se rapproche de la transition, dans l'équation (III.56) sont ceux pour lesquels  $x$  et  $y$  sont très éloignés ( $L$  grand) et donc décorrélés. De plus, pour des températures positives, nous nous attendons à ce que dans (III.47), le temps de premier passage soit dominé par les maxima de  $\phi$ , que l'on note  $y_*$ . Ainsi, pour le calcul de répliques, dans la moyenne (III.55), les termes les plus divergents vont apparaître, pour tout  $a$ , à  $y_a = y_*$ . Enfin, nous nous attendons à ce que de nombreuses valeurs de  $x$  contribuent au terme le plus divergent de (III.55), et elles vont correspondre aux zéros du champ,  $\phi(x) = 0$ . En général, ces points vont alors être bien séparés et éloignés de  $y_*$ , donc sur la plupart de l'espace des répliques,  $|x_a - x_b| \gg 1$  et  $|x_a - y_*| \gg 1$ . Nous pouvons alors approximer dans l'intégrale (III.55) les fonctions de corrélation par  $\Delta(x_a - x_b) \approx 0$  et  $\Delta(x_a - y_*) \approx 0$  et dans ces conditions, écrire finalement

$$\langle T(L)^n \rangle \approx \int_0^L dy_* \int_0^{y_*} \prod_{a=1}^n dx_a \det(\mathbf{I} + \beta \mathbf{B} \mathbf{\Lambda})^{-1/2} \approx \det(\mathbf{I} + \beta \mathbf{B} \mathbf{\Lambda})^{-1/2} \frac{L^{n+1}}{n+1}, \quad (\text{III.59})$$

où la matrice symétrique de taille  $2n \times 2n$ ,  $\mathbf{B}$  s'écrit

$$B_{ab} = \begin{cases} -1 & \text{pour } 1 \leq a, b \leq n, \\ \delta_{ab} & \text{pour } n+1 \leq a, b \leq 2n, \\ 0 & \text{partout ailleurs.} \end{cases} \quad (\text{III.60})$$

Les valeurs propres de  $\mathbf{B}$  sont alors faciles à calculer et nous en trouvons trois distinctes.  $\lambda_1 = -n\beta$  une fois,  $\lambda_2 = 0$ ,  $n-1$  fois et  $\lambda_3 = 1$ ,  $n$  fois. Nous pouvons alors calculer le déterminant et au final, (III.59) devient

$$\langle T(L)^n \rangle \approx \frac{L^{n+1}}{(1+n)(1-n\beta)^{1/2}(1+\beta)^{n/2}}. \quad (\text{III.61})$$

Nous remarquons que si nous choisissons l'exposant  $n$  égal à 1, alors nous retrouverons exactement le terme dominant de (III.57) et la constante de diffusion (III.16), ce qui tend à valider notre raisonnement. Si nous nous plaçons dans la limite où  $n$  tend vers  $\frac{1}{\beta}$ , nous trouvons que l'équation (III.61) diverge et le terme associé est bien la contribution principale dans le calcul de la double intégrale (III.49). Dans cette limite, nous obtenons finalement

$$\langle T(L)^{\frac{1}{\beta}} \rangle \sim L^{1+\frac{1}{\beta}}, \quad (\text{III.62})$$

et donc, dimensionnellement, nous trouvons

$$\langle x(t)^2 \rangle \sim t^{\frac{2}{1+\beta}}. \quad (\text{III.63})$$

Ce résultat est très important, car il montre que l'exposant anormal est donné par  $\nu = \frac{2}{1+\beta}$ , ce qui correspond exactement au résultat (III.46) pour le modèle de piège effectif avec  $\alpha = 1$ . Ainsi, ce calcul montre que le problème (PA) peut effectivement être décrit par un modèle de piège effectif dont la valeur de  $\alpha$  doit être égale à 1 pour reproduire les bons résultats. De la même manière, nous pouvons aussi nous intéresser au comportement de diffusion anormale en présence d'un champ externe. Dans ce cas, le potentiel devient  $\frac{1}{2}\phi^2 - hx$ , et par le même raisonnement que précédemment, pour  $L$  grand, nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle T(L)^n \rangle &\approx \int_0^L dy_\star \int_0^{y_\star} \prod_{a=1}^n dx_a \exp\left(-nhy_\star + \sum_{a=1}^n hx_a\right) \det(\mathbf{I} + \beta\mathbf{B}\mathbf{\Lambda})^{-1/2} \\ &\approx \det(\mathbf{I} + \beta\mathbf{B}\mathbf{\Lambda})^{-1/2} \frac{L}{(\beta h)^n}. \end{aligned} \quad (\text{III.64})$$

A la limite où  $n$  tend vers  $\frac{1}{\beta}$ , dimensionnellement, il vient

$$\langle x(t)^2 \rangle \sim h^\beta t^\beta. \quad (\text{III.65})$$

Ce résultat est en parfait accord avec d'autres résultats plus anciens [37], tant pour l'exposant temporel que pour l'exposant associé au champ  $h$ . Tout ceci nous montre bien la pertinence de notre approche et justifie le choix de  $\alpha = 1$  pour le modèle de piège effectif.

### 3.2 Modèle de pièges

Pour valider tous les résultats présentés dans les paragraphes précédents, il faut pouvoir simuler le problème (PA) dans la phase basse température. Pour cela, nous pouvons utiliser les algorithmes de Runge-Kutta, développés au chapitre précédent, mais pour atteindre le régime asymptotique à très basse température, il faut diffuser sur de grandes distances. Cependant, comme la diffusion se fait de plus en plus lentement, le temps nécessaire pour simuler le processus jusqu'à l'équilibre devient beaucoup trop grand et d'un point de vue computationnel, les algorithmes deviennent trop gourmands. Pour contourner ce problème, nous allons utiliser le lien qui existe entre le problème (PA) et le modèle de pièges. Ainsi, à très basse température, nous nous attendons à ce que la phase anormale soit décrite par un modèle de pièges en une dimension, comme vu précédemment. Cependant, le choix des paramètres à utiliser n'est pas très clair. Nous avons alors construit un modèle effectif de pièges, directement extrait des réalisations du potentiel aléatoire. La procédure que nous utilisons est la suivante : nous prenons une réalisation du potentiel  $V$  sur un intervalle suffisamment grand. A chaque minimum  $i$ , nous associons un piège à la position  $x_i$ . Nous calculons ensuite la barrière d'énergie qu'il faut franchir pour sauter sur le minimum le plus proche à gauche ( $i-1$ ), et à droite ( $i+1$ ), et ces deux barrières d'énergie sont alors notées respectivement  $\Delta E_i^{(g)}$  et  $\Delta E_i^{(d)}$ . La particule peut alors sauter, à gauche ou à droite avec un temps de piégeage aléatoire  $\tau_i^{(g/d)}$  exponentiellement distribué. La valeur moyenne est alors bien donnée par la loi d'Arrhénius (II.44),  $\tau_i^{(g/d)} = \exp\left(\beta\Delta E_i^{(g/d)}\right)$  (l'échelle de temps totale est ici inutile pour déterminer l'exposant anormal). Sur la figure III.7, nous pouvons voir comment cette procédure prend forme pour une réalisation quelconque du

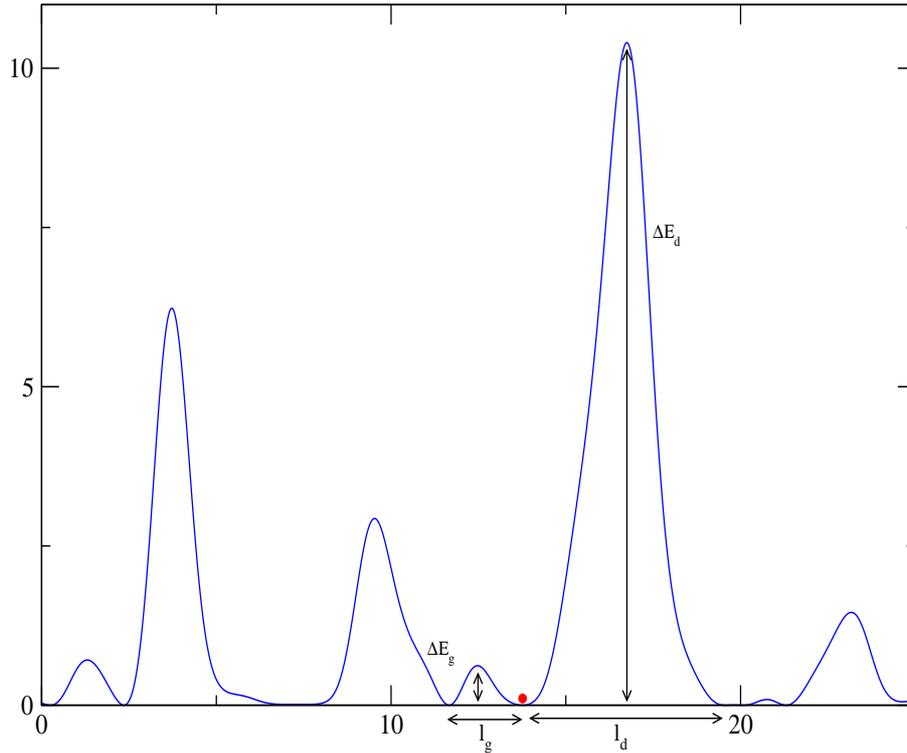


FIG. III.7 – Procédure de construction pour le modèle de pièges effectif dans la phase basse température.

potentiel. Ainsi, nous générons pour chaque site  $i$ , numériquement, un  $\tau_i^{(g/d)}$  et la particule saute sur le site correspondant au temps le plus court d'une distance  $l_i^{(g/d)}$ , qui correspond respectivement à  $x_i - x_{i-1}$  et  $x_{i+1} - x_i$ . Le temps dans les simulations est alors augmenté du temps de saut. Dans ces conditions, nous sommes sûr que le système a diffusé suffisamment loin pour atteindre l'équilibre et, le temps total de simulation est indépendant du temps physique, ce qui nous permet d'atteindre le régime asymptotique. Comme le désordre est trempé, les barrières d'énergie  $\Delta E_i^{(g/d)}$  et les distances  $l_i^{(g/d)}$  sont associées de façon permanente aux sites  $i$ .

### 3.3 Résultats numériques

En suivant la procédure établie au paragraphe précédent, nous générons les barrières d'énergie  $\Delta E^{(g/d)}$  et les distances de saut associées  $l^{(g/d)}$ . Le champ  $\phi$  est alors construit en utilisant l'équation (III.7) avec un grand nombre de modes ( $N \sim 10\,000$ ) pour éviter les effets de taille finie. Nous appliquons la procédure sur 1 million de réalisations du désordre et les données sont stockées dans un fichier. Nous traçons alors sur la figure III.8.a les distributions des distances de saut  $l^g$  et  $l^d$  et sur la figure III.8.b, les distributions des barrières d'énergie  $\Delta E^g$  et  $\Delta E^d$  ainsi obtenues. On note que  $l_g$  et  $l_d$  ainsi que  $\Delta E_g$  et  $\Delta E_d$  sont statistiquement équivalents car ils ont la même distribution. Il y a donc une symétrie entre la droite et la gauche ce qui assure l'absence de biais dans la modélisation du marcheur aléatoire. De plus, il est intéressant de remarquer que si nous normalisons les échelles de distance pour que le maximum de  $P(l)$  soit en  $l_{max} = 1$ , alors  $P(l)$  va s'ajuster exactement à la distribution dite GOE<sup>2</sup> donnée par la

<sup>2</sup>Correspond à l'ensemble des matrices orthogonales Gaussiennes

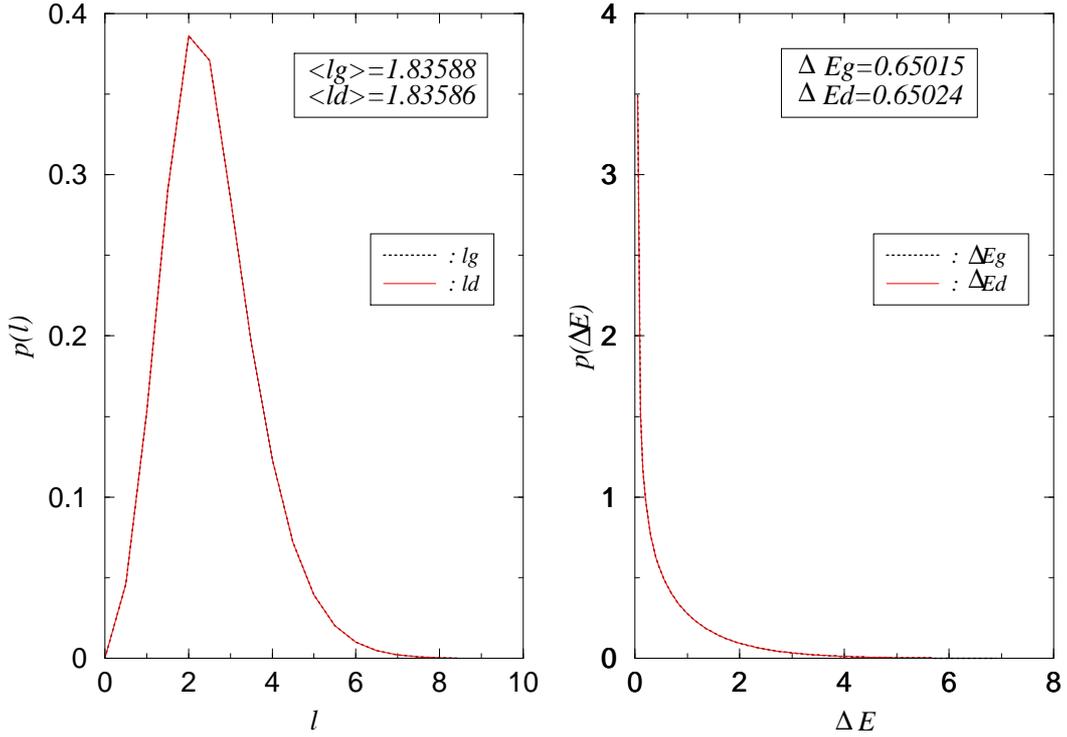


FIG. III.8 – a (à gauche) : Distribution de  $l_g$  et  $l_d$  pour 1 000 000 champs. - b (à droite) : Distribution de  $\Delta E_g$  et  $\Delta E_d$  pour 1 000 000 champs.

formule

$$P_{GOE}(l) = \frac{l\pi}{2} \exp\left(-\pi \frac{l^2}{4}\right). \quad (\text{III.66})$$

Ce type de distribution apparaît dans le cadre de la théorie des matrices aléatoires [98], et représente la distribution des distances entre les valeurs propres des matrices aléatoires appartenant à l'ensemble GOE. Cet ensemble traduit une symétrie de translation pour des matrices hermitiennes réelles qui est clairement présente dans notre potentiel aléatoire. Nous remarquons enfin, que la distribution des barrières d'énergie suit une loi de décroissance exponentielle similaire à celles obtenues dans d'autres modèles comme le REM ou le modèle SK pour les verres de spins (II.45).

Sur la figure III.9, est représenté le résultat des simulations confronté à la prédiction analytique pour  $\alpha = 1$  donnée par l'équation (III.46). Le premier jeu de simulations, donné par les cercles rouges, est réalisé par l'intégration directe de l'équation de Langevin par la méthode de Runge-Kutta, en utilisant les mêmes paramètres que dans la phase haute température. Le second jeu de simulations, donné par les étoiles bleues, correspond lui à la simulation du modèle de pièges effectif présenté ici, moyenné sur 10 000 réalisations. Dans les deux cas, nous traçons l'écart quadratique moyen dont on extrait la valeur de l'exposant  $\nu$  en ajustant au mieux la formule (II.2). Pour les simulations de l'équation de Langevin, la valeur de l'exposant mesuré est proche de la valeur prédite par (III.46) jusqu'à  $\beta \sim 1.5$ , où elle s'en écarte significativement. La dynamique se ralentit énormément et cet écart peut s'expliquer par le fait que l'on ne poursuit pas les simulations suffisamment longtemps pour atteindre l'équilibre. En effet, lorsque nous simulons le modèle de pièges effectifs, où le temps de simulation n'est plus un problème, l'accord est vraiment amélioré et reste excellent, même à très basse température. Le

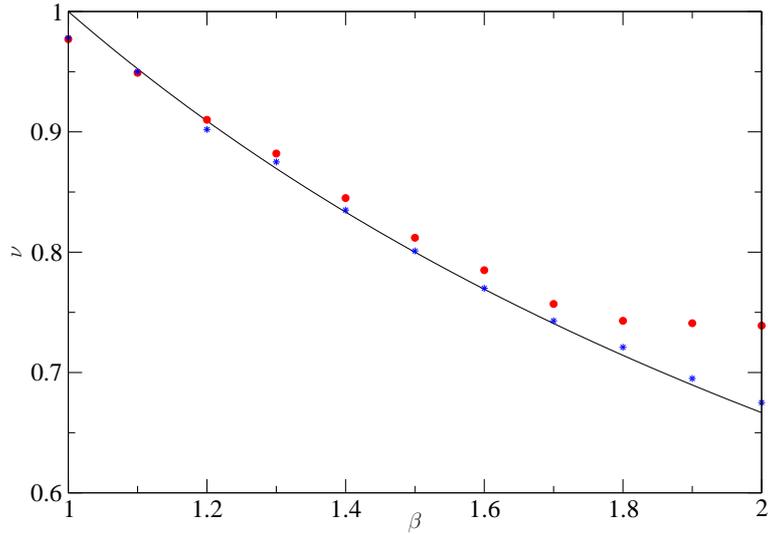


FIG. III.9 – Résultats pour l'exposant de diffusion anormale  $\nu$  en une dimension pour le modèle de pièges effectifs (étoiles bleues), la simulation directe de l'équation stochastique (cercles rouges) et la prédiction analytique  $\nu = 2/(1 + \beta)$  (ligne solide).

très bon accord entre les simulations et le calcul analytique basé sur la théorie des répliques montre explicitement que la valeur de  $\alpha$  associée au modèle de piège dans l'équation (III.18) est effectivement égale à 1.

## 4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le problème de potentiel aléatoire (PA) pour un potentiel Gaussien au carré. Ce problème apparaît alors comme un modèle effectif pour le problème de dipôle diffusant dans un champ électrique aléatoire, dans une limite adiabatique. Nous avons montré, exactement, en dimension une et deux, la présence d'une transition dynamique pour une température critique  $T_c = \pm 1$ . Cette transition est alors caractérisée par l'annulation de la constante de diffusion du système, et comme pour le modèle de pièges, elle est typique d'une transition vitreuse. Afin de tester nos résultats analytiques, nous avons alors réalisé des simulations numériques pour lesquelles nous avons utilisé un nombre fini de modes pour créer le champ. Nous avons alors montré que dans ce cas, la transition va être masquée. Nous avons donc calculé analytiquement la constante de diffusion qui, à basse température, se comporte comme une loi d'Arrhénius. Pour finir, nous avons exploré la phase basse température où le comportement diffusif est alors anormal. Nous avons alors pu retrouver l'exposant  $\nu$  par un calcul de temps de premier passage utilisant la théorie des répliques, que nous avons confirmée par des simulations directes et un modèle de pièges effectifs. Ces calculs ayant été réalisés à faible dimension, il est alors intéressant de savoir si la transition va survivre dans ce modèle en dimensions plus grandes, et pour cela, nous allons maintenant traiter une généralisation de ce problème.

\* \*  
\*

# Diffusion dans un potentiel non-Gaussien généralisé

*You will have to brace yourselves for this - not because it is difficult to understand, but because it is absolutely ridiculous : All we do is draw little arrows on a piece of paper.*

**Richard Feynman**

Dans le chapitre précédent, nous avons montré que pour le problème (PA), lorsque l'on choisit un potentiel spécial, donné par l'équation (III.1), il va exister une température critique non nulle  $T_C$ . En effet, en dimension une, et dans un cas spécial en dimension deux, nous avons pu calculer exactement la constante de diffusion et nous avons montré qu'elle s'annulait à  $T_C$ . Ce choix pour le potentiel a été motivé par le problème de dipôles diffusant dans un champ électrique aléatoire. Alors, nous avons vu que, dans une limite dite *adiabatique*, ce système est équivalent au problème (PA) avec le potentiel effectif (III.1), qui possède donc une statistique non-Gaussienne. D'autres études de diffusion dans des potentiels non-Gaussien existent aussi [99, 100]. Dans ces études, le potentiel est généré par des particules dont la position est distribuée aléatoirement, et elle interagissent alors via un potentiel déterministe. Dans ce système, les particules vont jouer le rôle de diffuseur et l'approximation naïve d'une statistique Gaussienne pour le potentiel aléatoire ne va plus être valable à très basse température, même quand la densité de sites diffuseurs est très grande, tant que les interactions sont à longue portée. Ceci s'explique simplement par le fait que, bien que le potentiel typique, donné par la somme des interactions indépendantes générées par chaque diffuseur doit être Gaussienne, à basse température, la particule est piégée dans les minima, qui correspondent à des valeurs extrêmes du potentiel et leur statistique n'est pas Gaussienne (le CLT ne s'applique que proche de la moyenne). Ces exemples montrent bien que dans certains problèmes, l'étude de potentiels aléatoires non-Gaussiens est tout à fait pertinente. Ainsi, dans ce chapitre, nous allons nous intéresser au cas général où  $V$  est une fonction quelconque de  $\phi$  (le potentiel étudié au chapitre précédent devient donc ici un cas particulier). La plupart des résultats présentés ici ont été publiés dans [101].

Pour pouvoir calculer la constante de diffusion du problème (PA) pour un potentiel général  $V$  en dimension quelconque, il faut pouvoir utiliser des méthodes approchées qui simplifient

suffisamment le problème pour pouvoir effectuer des prédictions analytiques tout en capturant l'essentiel de la physique. On peut alors utiliser des techniques dites perturbatives [52, 56, 80], ou bien des méthodes plus raffinées telles que le groupe de renormalisation. Cependant, une application directe du groupe de renormalisation auto-similaire à ce modèle au premier ordre (une boucle) n'est pas sensible à la statistique non-Gaussienne du potentiel aléatoire et ne prédit pas de transition dynamique associée au passage entre un comportement diffusif normal et un comportement sous-diffusif du transport. Pour résoudre ce problème, nous allons nous baser sur le lien mathématique mis en évidence dans le chapitre 2 entre les problèmes (PA) et (DA), dont le résultat principal est alors donné par l'équation (II.30) que l'on ré-écrit ici par souci de clarté

$$\kappa_e^{(PA)} = \frac{\kappa_e^{(DA)}}{\langle \exp(-\beta V(\phi(\mathbf{x}))) \rangle}. \quad (\text{IV.1})$$

Cette analogie nous permet alors de reformuler l'approche du groupe de renormalisation (RG<sup>1</sup>) auto-similaire, en simplifiant son flot. Nous pouvons ainsi retrouver des résultats connus et prédire le comportement de la constante de diffusion en dimension quelconque. De plus, notre analyse va nous permettre de retrouver un résultat approximé très souvent utilisé pour calculer la perméabilité effective de milieux poreux aléatoires [25–30]. Pour calculer la constante de diffusion en présence du potentiel aléatoire  $V$ , il suffit alors de calculer  $\kappa_e^{(DA)}$ , qui peut être déduit d'un problème statique. Dans ce cas, la fonction de Green,  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , du problème (DA) est donnée par l'équation

$$\nabla \cdot \exp(-\beta V(\phi)) \nabla G = -\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{IV.2})$$

La fonction de Green correspond ici à la distribution de probabilité de l'état stationnaire pour une source unité, placée à l'origine. Il est intéressant d'écrire le problème sous cette forme, car on peut de manière assez simple implémenter des analyses perturbatives. Comme le système est statistiquement invariant par translation, sans perte de généralité, on peut fixer  $\mathbf{x}' = 0$  et si on note  $\tilde{G}(\mathbf{k})$ , la transformée de Fourier de  $G(\mathbf{x})$ , alors nous pouvons extraire la constante de diffusion  $\kappa_e^{(DA)}$  du comportement à longue distance, ou de manière équivalente à petit vecteur d'onde, de la fonction de Green [52, 80, 82, 102]

$$\langle \tilde{G}(\mathbf{k}) \rangle \sim \frac{1}{\kappa_e^{(DA)} \mathbf{k}^2}, \quad \text{pour } |\mathbf{k}| \rightarrow 0, \quad (\text{IV.3})$$

où  $\langle \cdot \rangle$  signifie que nous avons moyenné sur le désordre introduit par le potentiel  $V$ . Ainsi, si on peut calculer  $\langle \tilde{G}(\mathbf{k}) \rangle$ , nous pouvons en déduire directement la constante de diffusion recherchée. Dans un premier temps, nous allons présenter différentes méthodes perturbatives pour calculer la constante de diffusion de problèmes de types (PA). Puis, on s'intéressera plus particulièrement au problème (PA) en présence d'un potentiel quelconque, que nous résoudrons grâce au groupe de renormalisation auto-similaire. Ensuite, nous étudierons un cas spécial que l'on comparera avec des études numériques poussées, et enfin, nous conclurons en mettant en évidence un lien entre une quantité dynamique, la constante de diffusion, et une quantité statique, l'excès d'entropie.

---

<sup>1</sup>RG pour *renormalization group*

# 1 Méthodes perturbatives

## 1.1 Méthode diagrammatique pour un faible désordre

Lorsque la température devient élevée ( $\beta \rightarrow 0$ ), ou de manière équivalente, quand la constante de couplage du potentiel aléatoire  $\lambda_0$  est faible, nous rentrons dans le régime de faible désordre. Dans ce régime, nous pouvons alors développer une théorie de perturbation dont le paramètre d'expansion sera  $\beta$ , ou de façon équivalente  $\lambda_0$ . Pour cela, l'objet que nous allons calculer est la fonction de Green  $G(\mathbf{x})$ , et dans le problème (PA), elle sera donnée, de manière générale, par l'équation :

$$\kappa_0 \nabla^2 G(\mathbf{x}) + \lambda_0 \nabla \psi \cdot \nabla G(\mathbf{x}) = -\delta(\mathbf{x}), \quad (\text{IV.4})$$

où  $\kappa_0$  est la constante de diffusion sans désordre et  $\lambda_0$ , la constante de couplage du champ relié à la température par la relation de fluctuation-dissipation d'Einstein (II.7).  $\psi$  est alors un champ aléatoire quelconque, dont la fonction de corrélation est donnée par

$$\langle \psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{y}) \rangle = D(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (\text{IV.5})$$

### 1.1.a La méthode

Si nous prenons la transformée de Fourier de l'équation (IV.4), nous pouvons alors écrire

$$\tilde{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\kappa_0 \mathbf{k}^2} - \frac{\lambda_0}{\kappa_0 \mathbf{k}^2} \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{\psi}(\mathbf{q}) \tilde{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad (\text{IV.6})$$

où  $\tilde{G}(\mathbf{k})$  et  $\tilde{\psi}(\mathbf{q})$  sont respectivement les transformées de Fourier de la fonction de Green  $G(\mathbf{x})$  et du champ aléatoire  $\psi(\mathbf{x})$ . Cette équation définit alors de manière auto-consistante  $\tilde{G}(\mathbf{k})$ , que nous pouvons calculer par itérations successives. Ceci peut être fait diagrammatiquement, l'intégrale s'écrit à l'aide de diagrammes que l'on peut calculer grâce à des règles dites de Feynman, car elles furent premièrement introduites par le physicien Richard Feynman à la fin des années 40, dans le cadre de la théorie quantique des champs. A chaque itération, les diagrammes se complexifient et apportent un poids  $\lambda_0/\kappa_0$  supplémentaire, qui va constituer le paramètre perturbatif. Dans le régime de faible désordre, ce processus va alors converger et il sera nécessaire de ne calculer qu'un nombre fini de diagrammes. Il nous faut maintenant moyenner la fonction de Green sur le désordre engendré par le champ  $\psi$ . Ce faisant, nous allons introduire un tout nouveau jeu de diagrammes de Feynman dont la topologie et les règles de calcul qui en découlent vont directement dépendre de la nature du désordre. Les diagrammes peuvent alors être resommés à partir des diagrammes irréductibles à une particule pour obtenir la relation

$$\langle \tilde{G}(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{\kappa_0 \mathbf{k}^2 - \Sigma(\mathbf{k})}, \quad (\text{IV.7})$$

où  $\Sigma(\mathbf{k})$  correspond à la *self-energie*<sup>2</sup> qui est donnée par la somme de tous les diagrammes irréductibles à une particule; le nombre de ces diagrammes est bien sûr infini, mais leurs contributions étant de plus en plus faibles, nous pouvons tronquer la somme à l'ordre voulu. On entend par irréductible, un diagramme que l'on ne peut pas décomposer en plusieurs autres diagrammes plus élémentaires. De plus, pour le problème de potentiel aléatoire, nous pouvons

---

<sup>2</sup>l'énergie propre

écrire une équation équivalente à (IV.3), et pour  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ ,  $\langle \tilde{G}(\mathbf{k}) \rangle$  doit avoir le comportement asymptotique suivant

$$\langle \tilde{G}(\mathbf{k}) \rangle \sim \frac{1}{\kappa_e^{(PA)} \mathbf{k}^2}. \quad (\text{IV.8})$$

En comparant alors la formule (IV.7) et le développement asymptotique (IV.8), nous obtenons finalement

$$\kappa_e^{(PA)} = \kappa_0 - \left. \frac{d}{d\mathbf{k}^2} \Sigma(\mathbf{k}) \right|_{\mathbf{k}=0}. \quad (\text{IV.9})$$

Il nous reste alors à calculer  $\Sigma(\mathbf{k})$  en évaluant les diagrammes irréductibles et en utilisant le théorème de Wick. Ici les règles de Feynman, pour cette théorie de perturbation, vont être données par :

- 1 - Le moment total à chaque vertex est conservé.
- 2 - A chaque ligne horizontale qui possède un vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ , correspond le propagateur  $1/\kappa_0 \mathbf{k}^2$ .
- 3 - A chaque ligne en pointillé qui possède un vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ , correspond un facteur  $-\lambda_0 \mathbf{q}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{\psi}(\mathbf{q})$ , où  $\mathbf{k}$  est le vecteur d'onde entrant.
- 4 - On intègre chaque ligne en pointillé de vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ , avec la mesure  $d^D q / (2\pi)^D$ .

Pour aller plus loin dans ce calcul, il faut maintenant choisir une statistique pour le champ  $\psi$ . Alors, comme première application, on peut regarder le cas où le champ  $\psi$  est purement Gaussien.

### 1.1.b Application au cas Gaussien

Dans ce cas, le champ  $\psi$  va simplement être égal au champ  $\phi$  introduit dans le chapitre 2 et sa fonction de corrélation est donnée par l'équation (II.5). Dans ce cas, on trouve que le seul diagramme irréductible, qui contribue au premier ordre [52, 80], est donné par la figure (IV.1). Nous pouvons ainsi calculer la self énergie, et à l'ordre  $O(\lambda_0^2)$ , nous obtenons

$$\Sigma^1(\mathbf{k}) = -\frac{\lambda_0^2}{\kappa_0} \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{\tilde{\Delta}(\mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2}. \quad (\text{IV.10})$$

Pour en déduire la constante de diffusion, nous ne sommes intéressés que par le comportement de la self énergie quand  $\mathbf{k}$  tend vers 0. Ainsi, dans cette limite, on peut développer (IV.10) et à l'ordre  $O(\mathbf{k}^2)$ , nous pouvons écrire

$$\Sigma^1(\mathbf{k}) \approx \frac{\lambda_0^2}{\kappa_0} \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \tilde{\Delta}(\mathbf{q}) \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})^2}{q^2}. \quad (\text{IV.11})$$

En utilisant maintenant l'équation (IV.9), il vient alors facilement, qu'à l'ordre  $O(\lambda_0^2)$ , la constante de diffusion va être donné par la formule

$$\kappa_e^{(PA)} \approx \kappa_0 \left( 1 - \frac{\lambda_0^2}{D \kappa_0^2} \Delta(0) \right). \quad (\text{IV.12})$$

Nous pouvons alors comparer ce résultat à ceux, exacts, obtenus dans le chapitre 2 pour le modèle de potentiel aléatoire en basse dimensionnalité. Ainsi, pour  $D = 1$  et  $2$ , en gardant à

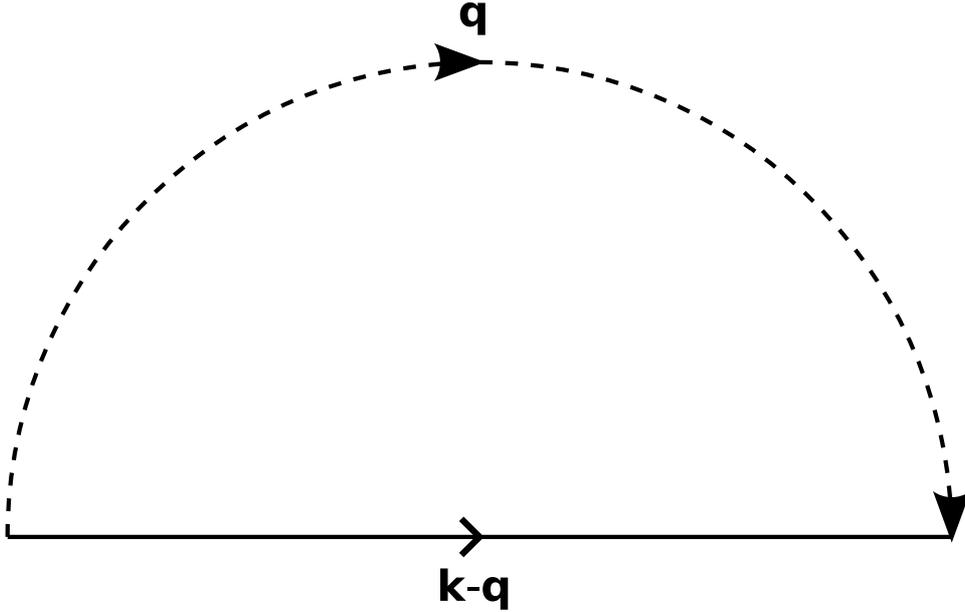


FIG. IV.1 – Seul diagramme contribuant à la self énergie  $\Sigma(\mathbf{k})$ , au premier ordre.

l'esprit que  $\lambda_0$  et  $\beta$  sont reliés par la relation d'Einstein ( $\lambda_0 = \beta\kappa_0$ ), alors l'équation (IV.12) est exactement le premier terme du développement de (II.75) pour  $D = 1$  et (II.82) pour  $D = 2$ , quand la température est très grande (ce qui correspond bien à la limite de faible désordre). Cette méthode de calcul étant approximative, nous ne pouvons prétendre retrouver les résultats exacts, cependant, si nous sommes capables de calculer des ordres de plus en plus grands dans le développement perturbatif de la self énergie, nous pouvons espérer, dans le régime de faible désordre, obtenir de bons résultats. Nous pouvons par exemple calculer la self énergie au second ordre, le détail de ce calcul est donné dans [52, 56], ce qui donne à l'ordre  $O(\lambda_0^4)$

$$\kappa_e^{(PA)} \approx \kappa_0 \left( 1 - \frac{\lambda_0^2}{D\kappa_0^2} \Delta(0) + \frac{\lambda_0^4}{2D^2\kappa_0^4} \Delta^2(0) \right). \quad (\text{IV.13})$$

Le terme supplémentaire ainsi obtenu, correspond exactement au terme suivant dans le développement en série de l'exponentielle dans les équations (II.75) et (II.82), ce qui démontre bien la validité de cette méthode. Cela dit, à chaque ordre, le nombre de diagrammes qu'il faut prendre en compte augmente et le calcul se complexifie, ce qui va limiter la portée de cette technique. Elle a pourtant le mérite de pouvoir prédire une valeur approximative pour la constante de diffusion en dimension supérieure à deux, où aucun résultat exact n'est disponible. Cependant, cette méthode n'est pas la seule à notre disposition et nous allons montrer que nous pouvons aussi calculer la constante de diffusion grâce à une méthode dite de *groupe de renormalisation*.

## 1.2 Groupe de renormalisation

### 1.2.a Idée générale

La méthode de groupe de renormalisation fut introduite pour la première fois par Wilson<sup>3</sup> en 1971 [103], pour étudier les propriétés de systèmes proches d'un point critique, où les méthodes de perturbation traditionnelle échouent. Cette méthode eut son premier grand succès en

<sup>3</sup>il obtient d'ailleurs le prix Nobel en 1982 pour ce travail.

résolvant le problème de l'effet Kondo en 1975 [104] et, de nos jours, son champ d'application a été étendu à de nombreux domaines tels que la physique du solide, la mécanique des fluides et même la cosmologie. L'idée de base de la théorie du groupe de renormalisation est très simple. Elle consiste à réduire systématiquement le nombre de degrés de liberté en intégrant sur les fluctuations de courtes longueurs d'ondes. En effet, proche d'un point critique, la longueur de corrélation du système que l'on note  $\xi$  diverge, les fluctuations ont alors toutes les tailles possibles et quelle que soit l'échelle, le système reste analogue. On définit donc un nouveau modèle, sur une nouvelle échelle, et de nouveaux paramètres effectifs, renormalisés pour tenir compte des degrés de liberté de plus petite échelle. Au système physique initial, on fait donc correspondre un nouveau système qui possède le même comportement à longue distance. Cependant, il existe une longueur naturelle pour chaque système qui, par exemple, dans le cas d'un système sur réseau est le pas, et après avoir appliqué cette transformation, il va être multiplié par un nombre positif  $k$ . Il est donc nécessaire d'accompagner la transformation du groupe de renormalisation par une dilatation de l'unité de longueur du système pour pouvoir comparer les deux modèles. Pour le comprendre, on peut s'imaginer deux microscopes  $M1$  et  $M2$ . Le premier a une résolution de l'ordre de  $\lambda$  et peut donc visualiser des détails à cette échelle. Le second, quant à lui, a une résolution de l'ordre de  $k\lambda$  (avec  $k > 1$ ), elle est donc moins bonne. On passe alors de  $M1$  à  $M2$  en intégrant sur tous les détails à petite échelle, invisible à  $M2$ . Les échelles sont ensuite dilatées en supposant que le grandissement de  $M1$  est égal à  $k$  fois celui de  $M2$ . Finalement, il faut itérer ce processus de transformation jusqu'à ce que nous atteignons la taille du système.

Une bonne illustration de cette méthode est le spin d'Ising en deux dimensions sur un réseau carré. Ce problème académique a été résolu exactement par Onsager en 1944 [105], mais reste néanmoins un bon test pour comprendre et vérifier les performances du RG. A chaque nœud du

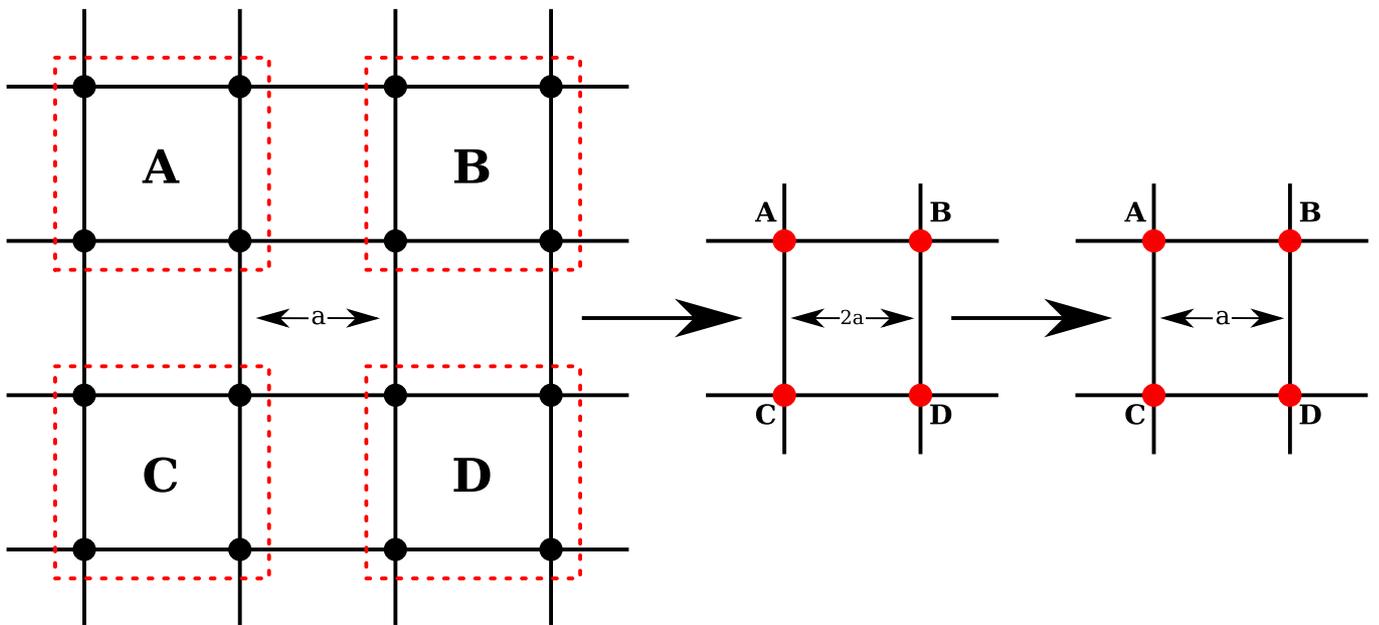


FIG. IV.2 – Transformation du RG pour le spin d'Ising en deux dimensions sur un réseau carré. Les plaquettes de spins forment un super spin sur un réseau dont les échelles de distance sont dilatées.

réseau, séparé d'une distance  $a$ , est associé un spin  $+1$  ou  $-1$ . Comme l'illustre la figure IV.2,

la transformation du groupe de renormalisation va s'effectuer en deux étapes. Tout d'abord, on forme des blocs de quatre spins ( $A, B, C$  et  $D$ ) que l'on va remplacer par un super spin de valeur  $+1$  si la somme des spins sur la plaquette est positive et  $-1$  si elle est négative (la valeur est choisie aléatoirement si la somme est nulle). Ces super spins que l'on va noter  $S_A, S_B, \dots$  vont alors vivre sur un nouveau réseau de distance  $2a$ . Dans un deuxième temps, on va revenir au réseau initial en dilatant l'unité de longueur par 2. Le système de super spin obtenu possède alors le même comportement à longue distance. Chaque application de la transformation du

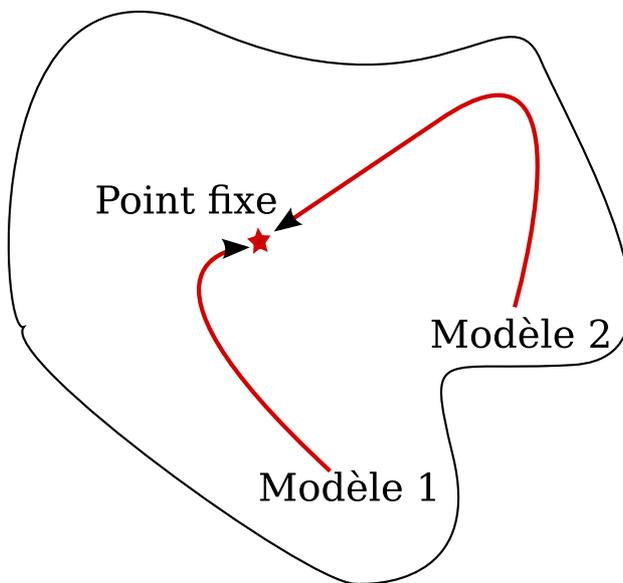


FIG. IV.3 – Représentation du bassin d'attraction d'un point fixe. Tout les modèles qui appartiennent à ce bassin vont se situer dans la même classe d'universalité.

RG va donc renormaliser les paramètres du modèle. On s'attend alors à ce qu'il y ait un point fixe vers lequel les paramètres vont s'écouler. Ainsi, si on applique un nombre fini de fois la transformation, le système va s'écouler vers le point fixe en suivant un certain flot, voir figure IV.3. De manière générale, si on est capable d'écrire l'équation du flot vers le point fixe et de la résoudre, on peut calculer toutes les quantités du problème. Apparaît alors une nouvelle notion très importante, en effet, plusieurs modèles microscopiquement différents vont avoir le même point fixe et donc les mêmes exposants critiques, comme le montre la figure IV.3. On peut ainsi classer les modèles suivant qu'ils appartiennent au bassin d'attraction de tel ou tel point fixe. On parle alors de classe d'universalité.

### 1.2.b Application aux milieux aléatoires

Comme nous l'avons vu précédemment, la méthode du groupe de renormalisation est la plus fiable quand elle est utilisée au voisinage d'un point critique du système, décrivant une transition de phase continue. Ainsi, l'idée d'universalité nous assure que le calcul des exposants critiques ne va pas dépendre des détails microscopiques du modèle, ce qui nous donne une base théorique plutôt solide. Cependant, nous pouvons adapter ces méthodes aux systèmes possédant du désordre, bien qu'il n'y ait pas ici, à proprement parler, de concept d'universalité. Lorsque la diffusion est anormale, on peut par exemple, adapter les arguments du RG pour calculer l'exposant anormal  $\nu$  [56] de l'équation (II.2). En ce qui nous concerne, nous allons plutôt nous en servir pour prédire le comportement de la constante de diffusion  $\kappa_e^{(PA)}$  pour le

problème de potentiel aléatoire. Pour cela, nous nous basons sur la supposition que les équations différentielles effectives gouvernant le flot à grande échelle prennent la même forme qu'à petite échelle. Ainsi, les coefficients de ces équations seront déduits en intégrant les effets du désordre à courte distance, comme dans un RG normal. Pour expliciter cette méthode, nous allons traiter

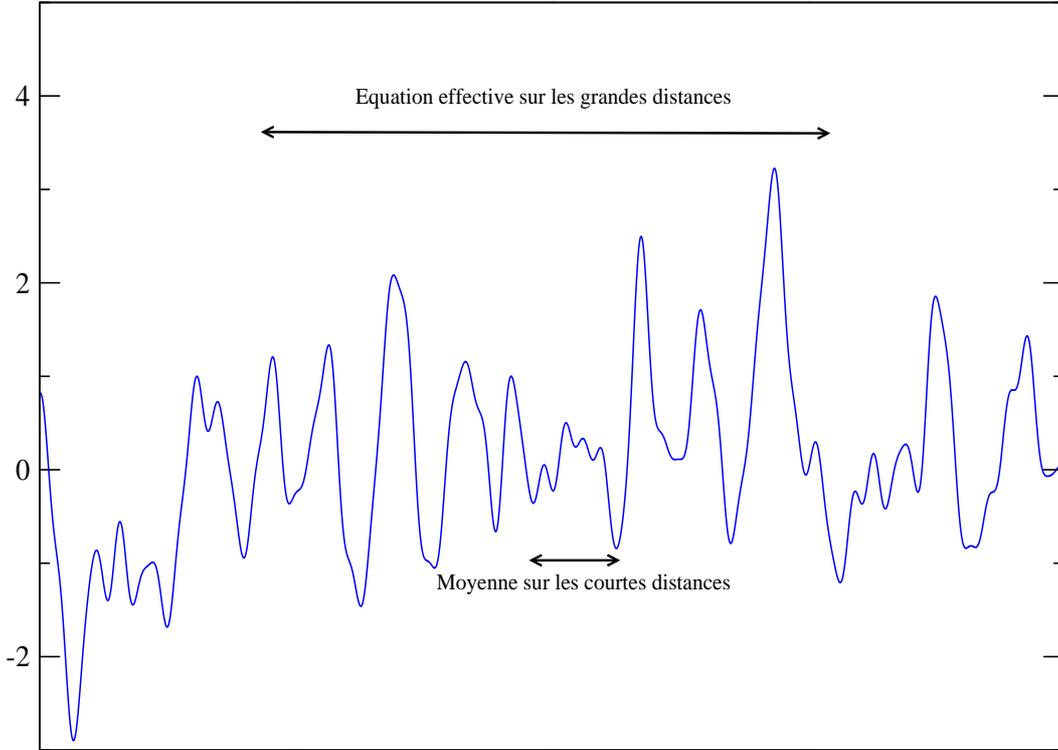


FIG. IV.4 – Exemple de procédure de renormalisation en présence de désordre. On moyenne sur les fluctuations du champ à petite échelle pour écrire une équation effective à plus grande échelle.

le cas simple du problème de potentiel aléatoire Gaussien, discuté précédemment en théorie des perturbations. Il nous faut alors moyenner sur les composantes à très courte distance du champ, comme l'illustre la figure IV.4. Pour cela, il est commode de définir un vecteur d'onde  $\Lambda$  qui va correspondre à une coupure entre les échelles de distance, et comme nous voulons moyenner sur les courtes distances,  $\Lambda$  sera très grand. Ainsi, par analogie avec le spectre du visible,  $\Lambda$  définit une échelle de coupure dite *ultra-violette*, car elle correspond aux très hautes fréquences. Nous pouvons alors décomposer le champ  $\phi$  jusqu'au vecteur d'onde de coupure  $\Lambda$  en utilisant sa transformée de Fourier inverse, nous obtenons alors

$$\phi_\Lambda(\mathbf{x}) = \int_{|\mathbf{q}| < \Lambda} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}). \quad (\text{IV.14})$$

Où  $\tilde{\phi}(\mathbf{k})$  correspond à la transformée de Fourier de  $\phi(\mathbf{x})$ .  $\phi_\Lambda(\mathbf{x})$  correspond alors presque à  $\phi(\mathbf{x})$ , on a seulement supprimé les très hautes fréquences. Nous pouvons alors moyenner le comportement à haute fréquence du champ, et écrire une équation renormalisée de la même forme que (IV.4), pour des échelles de distance plus grande (supérieure à  $\Lambda^{-1}$ ), pour la partie du champ qui reste  $\phi_\Lambda(\mathbf{x})$ . L'équation pour la fonction de Green moyennée sur les hautes fréquences  $G_\Lambda$ , va alors s'écrire

$$\kappa(\Lambda) \nabla^2 G_\Lambda(\mathbf{x}) + \lambda_0 \nabla \phi_\Lambda \cdot \nabla G_\Lambda(\mathbf{x}) = -\delta(\mathbf{x}), \quad (\text{IV.15})$$

où  $\kappa(\Lambda)$  est la diffusivité du système, renormalisée après avoir été moyenné sur les grandes valeurs du vecteur d'onde ( $|\mathbf{q}| > \Lambda$ ). En principe, l'équation que satisfait  $G_\Lambda$  doit être plus compliquée que (IV.15), car lorsque nous moyennons, nous introduisons de nouveaux termes, linéaires en  $G_\Lambda$ , mais en puissances et dérivées d'ordre plus élevé de  $\phi_\Lambda$ . Nous choisissons alors de négliger ces termes supplémentaires qui ne devraient pas jouer de rôle significatif à l'ordre  $O(\delta\Lambda)$  auquel nous allons effectuer ce calcul. La prochaine étape est alors de répéter cette procédure et de moyennner les composantes de  $\phi$  qui se trouvent dans la tranche de vecteurs d'ondes telle que  $|\mathbf{q}| \in (\Lambda, \Lambda - \delta\Lambda)$ , avec  $\delta\Lambda \rightarrow 0$ . Ce qui va entraîner la renormalisation de  $\kappa(\Lambda)$ . Pour comprendre dans quelle mesure, nous pouvons écrire une équation similaire à (IV.9) pour  $\kappa(\Lambda)$ , ce qui donne

$$\kappa(\Lambda) = \kappa_0 - \left. \frac{d}{d\mathbf{k}^2} \Sigma_\Lambda(\mathbf{k}) \right|_{\mathbf{k}=0}. \quad (\text{IV.16})$$

Ici,  $\Sigma_\Lambda(\mathbf{k})$  correspond à la self-energie définie précédemment, évaluée sur le champ tronqué à  $\Lambda$ . Nous pouvons alors moyennner sur la tranche d'épaisseur  $\delta\Lambda$ , et à l'ordre  $O(\delta\Lambda)$ , le seul diagramme qui contribue est encore donné par la figure IV.1, et nous trouvons finalement

$$\Sigma_{\Lambda-\delta\Lambda}(\mathbf{k}) = \Sigma_\Lambda(\mathbf{k}) - \lambda_0^2 \int_{\Lambda-\delta\Lambda < |\mathbf{q}| < \Lambda} \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{\tilde{\Delta}(\mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}{\kappa(\Lambda) (\mathbf{k} - \mathbf{q})^2}. \quad (\text{IV.17})$$

Comme nous avons supposé que nous sommes partis de l'équation (IV.15), il apparaît un facteur  $\kappa(\Lambda)$  dans l'intégrale et non  $\kappa_0$ . De plus, comme précédemment, pour comparer ce résultat avec (IV.16), il faut se placer dans la limite où  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ . Nous pouvons donc ré-écrire l'intégrale sur la tranche à l'ordre  $O(\mathbf{k}^2)$ , et nous obtenons

$$\Sigma_{\Lambda-\delta\Lambda}(\mathbf{k}) - \Sigma_\Lambda(\mathbf{k}) = \frac{\lambda_0^2}{(2\pi)^D D \kappa(\Lambda)} \mathbf{k}^2 S_D \Lambda^{D-1} \tilde{\Delta}(\Lambda) \delta\Lambda + O(\mathbf{k}^2, \delta\Lambda). \quad (\text{IV.18})$$

Où  $S_D$  correspond à l'aire d'une sphère de rayon un en  $D$  dimensions. Alors, dans la limite où la tranche du champ tend vers 0, c'est-à-dire quand  $\delta\Lambda \rightarrow 0$ , nous pouvons, en utilisant (IV.16) et (IV.18), en déduire l'équation du flot de renormalisation de la diffusivité qui va s'écrire

$$\frac{d\kappa(\Lambda)}{d\Lambda} = \frac{\lambda_0^2}{(2\pi)^D D \kappa(\Lambda)} S_D \Lambda^{D-1} \tilde{\Delta}(\Lambda). \quad (\text{IV.19})$$

Nous pouvons maintenant résoudre l'équation différentielle pour  $\kappa(\Lambda)$  avec comme condition initiale  $\kappa(\infty) = \kappa_0$ . La constante de diffusion effective du problème est alors donnée simplement par  $\kappa(0)$ , par la relation

$$\begin{aligned} \kappa_e^{(PA)} = \kappa(0) &= \kappa_0 \left( 1 - \frac{2\lambda_0^2}{\kappa_0^2 D (2\pi)^D} S_D \int_0^\infty d\Lambda' \Lambda'^{D-1} \tilde{\Delta}(\Lambda') \right)^{1/2}, \\ &= \kappa_0 \left( 1 - \frac{2\lambda_0^2}{\kappa_0^2 D} \Delta(0) \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{IV.20})$$

Ce résultat est alors tout à fait consistant avec celui obtenu par la méthode des perturbations au premier ordre. En effet, pour  $\lambda_0/\kappa_0 \ll 1$ , le développement de (IV.20) redonne exactement (IV.12). Cependant, ce résultat, comparé aux résultats exacts (II.75) et (II.82), donne un moins bon accord que la théorie des perturbations au premier ordre ! De plus, ce calcul semble prédire une transition dynamique dans laquelle  $\kappa_e^{(PA)}$  s'annule, de la même façon que dans le cas du

potentiel Gaussien au carré étudié dans le chapitre précédent. Ceci s'explique par le fait que dans le calcul, nous n'avons pas renormalisé le paramètre  $\lambda_0$  que nous avons gardé constant. Si on l'autorise alors à varier avec  $\Lambda$ , avec la condition  $\lambda(\infty) = \lambda_0$ , on retrouve le résultat exact en une et deux dimensions [80]. Pour cela, il faut utiliser une hypothèse d'auto-similarité, qui impose que la statistique du champ aléatoire reste la même à toutes les échelles. En d'autres termes, le champ, lorsqu'il est renormalisé, reste Gaussien.

## 2 Application du groupe de renormalisation auto-similaire

### 2.1 Établissement de l'équation du flot

Pour appliquer les idées présentées dans le paragraphe précédent, nous allons d'abord reformuler brièvement le problème du potentiel aléatoire. Pour cela, nous définissons sans perte de généralité un nouveau potentiel  $\nu$  tel que

$$\nu(\phi) = -\beta V(\phi). \quad (\text{IV.21})$$

L'équation de Langevin (II.8) qui modélise le problème de diffusion dans un potentiel aléatoire va alors être modifiée par la redéfinition du potentiel (IV.21), et elle va s'écrire

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \nabla \nu(\phi(\mathbf{x})) + \boldsymbol{\eta}(t). \quad (\text{IV.22})$$

L'astuce est maintenant d'appliquer les principes du groupe de renormalisation auto-similaire, non pas au problème du potentiel aléatoire décrit par l'équation (IV.22), mais au problème de diffusivité relié. Avec la nouvelle définition du potentiel, la diffusivité dans ce modèle s'écrit alors

$$\kappa(\mathbf{x}) = \exp(\nu(\phi(\mathbf{x}))), \quad (\text{IV.23})$$

et l'équation (IV.2) qui définit la fonction de Green du problème va être modifiée pour donner

$$\nabla \cdot \exp(\nu(\phi)) \nabla G = -\delta(\mathbf{x}). \quad (\text{IV.24})$$

Comme nous l'avons vu, l'idée principale du RG auto-similaire [80,82] est alors de moyennner les composantes à courtes distances du champ aléatoire  $\phi$ , jusqu'à la distance  $\Lambda^{-1}$ , qui correspond à une coupure entre les différentes échelles du champ. Nous allons donc comme précédemment définir un nouveau champ  $\phi_\Lambda$ , portion du champ, tronqué au vecteur d'onde  $\Lambda$  par l'équation (IV.14). de la même manière, nous pouvons définir une tranche du champ  $\phi$ ,  $\delta\phi_\Lambda(\mathbf{x})$  par l'intégrale

$$\delta\phi_\Lambda(\mathbf{x}) = \int_{\Lambda-\delta\Lambda < |\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}). \quad (\text{IV.25})$$

La méthode du groupe de renormalisation auto-similaire consiste alors à intégrer la tranche du champ  $\delta\phi$  en supposant que la partie du champ qui reste  $\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}$  peut être considérée comme constante. Ceci est tout à fait logique, nous intégrons d'abord les modes du champ les plus rapides, ainsi, les autres modes, plus lents, peuvent être considérés comme constants. La fonction de corrélation de la tranche du champ  $\delta\phi_\Lambda$  va alors être donnée par la formule

$$\langle \delta\phi_\Lambda(\mathbf{x}) \delta\phi_\Lambda(\mathbf{y}) \rangle = \Delta_{\delta\Lambda}(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (\text{IV.26})$$

Et sa transformée de Fourier va s'écrire

$$\tilde{\Delta}_{\delta\Lambda}(\mathbf{k}) = \tilde{\Delta}(\mathbf{k})I(|\mathbf{k}|, [\Lambda - \delta\Lambda, \Lambda]), \quad (\text{IV.27})$$

où  $I$  correspond à la fonction indicateur définie par :

$$\begin{aligned} I(x, A) &= 1 \text{ if } x \in A, \\ &= 0 \text{ if } x \notin A. \end{aligned} \quad (\text{IV.28})$$

Ceci implique que la tranche du champ  $\delta\phi_\Lambda$  est formellement de l'ordre de  $\sqrt{\delta\Lambda}$ . Ainsi, à l'ordre  $\delta\Lambda$ , nous pouvons écrire, pour tout point de l'espace

$$\langle \delta\phi_\Lambda^2 \rangle = \delta\mu = \frac{S_D \Lambda^{D-1} \tilde{\Delta}(\Lambda)}{(2\pi)^D} \delta\Lambda. \quad (\text{IV.29})$$

Si nous appliquons maintenant l'hypothèse d'auto-similarité du groupe de renormalisation à la fonction de Green du problème, donnée par l'équation (IV.24), nous nous attendons à ce qu'elle obéisse, après avoir été moyennée sur le champ aléatoire jusqu'au vecteur d'onde  $\Lambda$ , à une équation similaire à (IV.24), renormalisée, de la forme

$$\nabla \cdot \exp(\nu_\Lambda(\phi_\Lambda)) \nabla G_\Lambda = -\delta(\mathbf{x}). \quad (\text{IV.30})$$

Ici,  $G_\Lambda$  correspond à la fonction de Green moyennée sur les modes de  $\phi$  de modules supérieurs à  $\Lambda$ ,  $G_\Lambda = \langle G \rangle_\Lambda$ . Le champ  $\phi_\Lambda$  défini par la transformée de Fourier inverse (IV.14) peut alors s'écrire comme  $\phi_\Lambda = \phi_{\Lambda-\delta\Lambda} + \delta\phi_\Lambda$ . Ainsi, quand  $\delta\Lambda$  tend vers 0, nous pouvons développer le potentiel  $\nu_\Lambda$  autour de  $\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}$ . En gardant à l'esprit que le champ est constant sur des échelles de longueur plus petite, nous pouvons ré-écrire l'équation (IV.30) de  $G_\Lambda$  comme

$$C(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) \nabla \cdot (1 + \nu'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) \delta\phi_\Lambda) \nabla G_\Lambda = -\delta(\mathbf{x}), \quad (\text{IV.31})$$

où  $C(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})$  correspond à

$$C(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) = \exp \left( \nu_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + \frac{\delta\mu}{2} \left( \nu''_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (\nu'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}))^2 \right) \right). \quad (\text{IV.32})$$

Nous pouvons alors définir un nouveau processus dont la fonction de Green notée  $g_\Lambda$  va être satisfaite par l'équation

$$\nabla \cdot (1 + \nu'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) \delta\phi_\Lambda) \nabla g_\Lambda = -\delta(\mathbf{x}). \quad (\text{IV.33})$$

Dans ces conditions, nous pouvons relier, en comparant les équations (IV.31) et (IV.33), les fonctions de Green  $g_\Lambda$  et  $G_\Lambda$  par la relation

$$G_\Lambda = \frac{g_\Lambda}{\exp \left( \nu_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + \frac{\delta\mu}{2} \left( \nu''_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (\nu'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}))^2 \right) \right)}, \quad (\text{IV.34})$$

et finalement, si nous moyennons sur la tranche  $\delta\Lambda$  dans l'expression précédente, nous obtenons

$$G_{\Lambda-\delta\Lambda} = \langle g_\Lambda \rangle_{\delta\Lambda} \exp \left( -\nu_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) - \frac{\delta\mu}{2} \left( \nu''_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (\nu'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}))^2 \right) \right). \quad (\text{IV.35})$$

La moyenne sur la tranche du champ  $\delta\phi_\Lambda$  est alors réalisée par le calcul de  $\langle g_\Lambda \rangle$ . Nous remarquons que l'équation (IV.33), que satisfait  $g_\Lambda$  est similaire à l'équation (IV.4) introduite

pour présenter les méthodes perturbatives dans le paragraphe précédent. Dans ce cas,  $\kappa_0 = 1$  et  $\psi = \nu'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})\delta\phi_\Lambda$ , avec une fonction de corrélation donnée par l'équation (IV.5). Ainsi, comme précédemment, nous allons pouvoir évaluer  $\langle g_\Lambda \rangle$  grâce au comportement, quand  $\mathbf{k}$  tend vers 0, de sa transformée de Fourier par une équation de la forme de (IV.8)

$$\langle \tilde{g}_\Lambda(\mathbf{k}) \rangle \sim \frac{1}{\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})\mathbf{k}^2}, \quad (\text{IV.36})$$

où  $\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})$  correspond à la diffusivité effective, du problème décrit par l'équation (IV.33), pour des vecteurs d'onde inférieure à  $\Lambda - \delta\Lambda$ . De même, nous pouvons aussi écrire une équation similaire à (IV.9) pour  $\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})$ , ce qui va donner

$$\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) = 1 - \left. \frac{d}{d\mathbf{k}^2} \Sigma_{\Lambda-\delta\Lambda}(\mathbf{k}) \right|_{\mathbf{k}=0}. \quad (\text{IV.37})$$

Ici,  $\Sigma_{\Lambda-\delta\Lambda}(\mathbf{k})$  est la self-energie calculée pour le champ  $\phi$  développé jusqu'à  $\Lambda - \delta\Lambda$ . De la même manière qu'au paragraphe précédent, nous pouvons la calculer à l'ordre  $\delta\Lambda$ , car dans ce calcul, seule la fonction de corrélation du champ change. A cet ordre, le seul diagramme irréductible qui contribue est représenté sur la figure IV.1, et nous obtenons finalement

$$\Sigma_{\Lambda-\delta\Lambda}(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \tilde{D}(\mathbf{q}) \frac{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} \approx \frac{\mathbf{k}^2}{D} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \tilde{D}(\mathbf{q}), \quad (\text{IV.38})$$

pour  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ . Dans ce calcul, nous nous sommes limités au premier ordre, et en principe, nous devrions inclure des interactions d'ordre plus élevé. Cette approche ne peut alors clairement pas être exacte, cependant, de façon assez surprenante, nous verrons que les résultats obtenus sont excellents et semblent capturer l'essentiel de la physique du problème. Nous pouvons donc nous limiter au premier ordre dans le calcul de self-energie. Ici, la transformée de Fourier de la fonction de corrélation  $\tilde{D}(\mathbf{q})$  va alors s'écrire

$$\tilde{D}(\mathbf{q}) = \nu'^2_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) \tilde{\Delta}(\Lambda) I(\mathbf{q}, [\Lambda - \delta\Lambda, \Lambda]), \quad (\text{IV.39})$$

ce qui nous donne finalement pour  $\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})$  :

$$\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) = 1 - \frac{\nu'^2_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})}{D} \delta\mu. \quad (\text{IV.40})$$

Si nous remplaçons maintenant dans (IV.35)  $\langle g_\Lambda \rangle_{\delta\Lambda}$ , par sa valeur donnée par l'expression (IV.36), alors pour  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ , nous obtenons

$$\tilde{G}_{\Lambda-\delta\Lambda}(\mathbf{k}) \sim \frac{1}{\mathbf{k}^2 \exp(\nu_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + \frac{\delta\mu}{2} (\nu''_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (1 - \frac{2}{D})\nu'^2_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})))}. \quad (\text{IV.41})$$

Ainsi, le pré-facteur devant  $\mathbf{k}^2$  dans le dénominateur va correspondre à la constante de diffusion du système pour une région de taille  $\Lambda^{-1}$ . De plus, si on prend directement la transformée de Fourier de l'équation (IV.30) qui définit  $G_\Lambda$ , alors pour  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ , nous trouvons

$$\tilde{G}_{\Lambda-\delta\Lambda}(\mathbf{k}) \sim \frac{1}{\exp(\nu_{\Lambda-\delta\Lambda}(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})) \mathbf{k}^2}. \quad (\text{IV.42})$$

Nous pouvons alors identifier les termes dans les exponentielles de (IV.41) et (IV.42), et obtenir finalement, dans la limite où  $\delta\Lambda \rightarrow 0$ , l'équation du flot du potentiel  $\nu(\phi)$

$$\frac{\partial \nu_\Lambda}{\partial \Lambda} = \frac{1}{2} \frac{d\mu}{d\Lambda} \left( \nu''_\Lambda + \left(1 - \frac{2}{D}\right) \nu'^2_\Lambda \right). \quad (\text{IV.43})$$

## 2.2 Calcul de la constante de diffusion

A partir de l'équation du flot du potentiel  $\nu$ , nous allons pouvoir calculer la constante de diffusion du problème de diffusivité aléatoire associé. Pour cela, il est important de noter que la condition au bord pour (IV.43), va être simplement donnée par  $\nu_\infty = \nu$ . Ainsi, si nous sommes capables de résoudre cette équation, alors la constante de diffusion va être extraite du comportement du potentiel en  $\Lambda = 0$ , quand tous les modes du champ ont été moyennés, par la forme

$$\kappa_e^{(DA)} = \exp(\nu_0(0)). \quad (\text{IV.44})$$

Cependant, l'équation du flot du groupe de renormalisation (IV.43) n'est pas linéaire, car elle fait intervenir la dérivée seconde et le carré de la dérivée première du potentiel. De manière générale, cette équation va alors être difficile à résoudre, sauf dans le cas particulier où le potentiel peut s'écrire sous la forme  $\nu = a\phi^2 + b\phi + c$ , où aucune nouvelle interaction n'est introduite. Tout espoir n'est pourtant pas perdu, en effet, nous allons quand même pouvoir calculer la constante de diffusion effective grâce à l'observation suivante. Si nous voulons calculer la moyenne

$$A_0 = \langle \exp(\alpha U(\phi)) \rangle, \quad (\text{IV.45})$$

où  $\alpha$  est un nombre quelconque. Nous pouvons alors, bien que ce soit une méthode triviale, utiliser la procédure du groupe de renormalisation suivante

$$\begin{aligned} A_\Lambda &= \langle \exp(\alpha U(\phi)) \rangle_\Lambda \\ &= \exp(\alpha U_\Lambda(\phi_\Lambda)). \end{aligned} \quad (\text{IV.46})$$

Suivant cette procédure, l'équation du flot de  $U_\Lambda$  est alors facile à trouver, et elle va s'écrire

$$\frac{\partial U_\Lambda}{\partial \Lambda} = \frac{1}{2} \frac{d\mu}{d\Lambda} \left( U''_\Lambda + \alpha U'^2_\Lambda \right). \quad (\text{IV.47})$$

L'équation (IV.43) du flot de  $\nu_\Lambda$  et celle (IV.47) de  $U_\Lambda$  sont tout à fait semblables. Nous pouvons donc par identification écrire

$$\nu_\infty = U_\infty \quad \text{et} \quad \alpha = 1 - \frac{2}{D}. \quad (\text{IV.48})$$

Par conséquent,  $\nu_\Lambda = U_\Lambda$  quel que soit  $\Lambda$ , et en utilisant le résultat (IV.46), nous obtenons finalement que la constante de diffusion du problème DA va être donnée par

$$\begin{aligned} \kappa_e^{(DA)} = \exp(\nu_0(0)) &= \exp\left(\left(1 - \frac{2}{D}\right) \nu_0(0)\right)^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}} \\ &= \left\langle \exp\left(\left(1 - \frac{2}{D}\right) \nu(\phi)\right) \right\rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}. \end{aligned} \quad (\text{IV.49})$$

Si nous nous rappelons maintenant la définition que nous avons introduite pour la diffusivité, exprimée en terme du potentiel  $\nu(\phi)$ , donné par l'équation (IV.23), alors nous pouvons ré-écrire la constante de diffusion du problème DA grâce à la diffusivité aléatoire  $\kappa(\mathbf{x})$ , ce qui donne

$$\kappa_e^{(DA)} = \left\langle \kappa(\mathbf{x})^{1-\frac{2}{D}} \right\rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}. \quad (\text{IV.50})$$

Ce résultat est très important car nous retrouvons ici une approximation largement utilisée dans le milieu de l'hydrologie, pour le calcul de perméabilités effectives, et cette forme est souvent référencée comme la conjecture de Landau-Lifshitz-Matheron [28, 30] (bien que le plus souvent, elle soit plutôt exprimée pour un champ Gaussien, en terme de sa variance locale). Il a été montré que cette formule est exacte en une dimension, mais aussi en deux dimensions, si la diffusivité locale  $\kappa(\mathbf{x})$  est (à un facteur multiplicatif constant près) statistiquement équivalent à son inverse [78, 79, 99]. En effet, si nous répétons tous les arguments précédents pour un système qui possède la diffusivité aléatoire suivante

$$\kappa = \exp(\nu(\phi) - \nu(\phi')), \quad (\text{IV.51})$$

où  $\phi$  et  $\phi'$  sont statistiquement équivalents. Alors, il est clair que  $\kappa(\mathbf{x})$  et  $\kappa(\mathbf{x})^{-1}$  le sont aussi et nous obtenons pour la constante de diffusion,  $\kappa_e^{(DA)} = 1$ . Cela correspond bien au résultat exact en deux dimensions. Dans la communauté de l'hydrologie, la question de savoir si la conjecture de Landau-Lifshitz-Matheron est exacte en dimension trois a animé de nombreux débats pendant quelque temps. Cependant, il a été montré que ce résultat n'est plus exact, dans le cas Gaussien, où  $\nu(\phi) = -\beta\phi$ , à trois dimensions [31]. Une déviation de la conjecture apparaît alors au troisième ordre dans le développement de  $\Sigma$ .

Revenons maintenant au problème initial que nous souhaitons étudier au début de ce chapitre. En utilisant la relation exacte (IV.1) qui relie les problèmes PA et DA, et le résultat approché (IV.50) issu du groupe de renormalisation auto-similaire, nous pouvons maintenant expliciter, de façon générale, la valeur de la constante de diffusion d'une particule soumise à un potentiel aléatoire quelconque  $\nu(\phi)$ , en dimension D :

$$\kappa_e^{(PA)} = \frac{\left\langle \exp \left( \left(1 - \frac{2}{D}\right) \nu(\phi) \right) \right\rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}}{\langle \exp(\nu(\phi)) \rangle}. \quad (\text{IV.52})$$

Cette formule est très importante car, comme nous allons le voir par la suite, elle généralise la plupart des résultats que nous avons montré précédemment. Nous allons donc nous attacher, dans les deux prochains paragraphes, à étudier certains choix de potentiel pour  $\nu(\phi)$ , pour les confronter ensuite à des simulations numériques.

### 3 Cas spéciaux et discussions

Dans ce paragraphe, nous allons nous intéresser à quelques choix possibles de potentiels pour le calcul de  $\kappa_e^{(PA)}$ . Dans un premier temps, nous regarderons le cas où le potentiel est purement Gaussien, puis nous mettrons en évidence une transition dynamique à température non nulle, quelle que soit la dimension d'espace, pour un choix de potentiel bien particulier.

#### 3.1 Le cas purement Gaussien

Tout au long de ce manuscrit, nous nous sommes servis du potentiel Gaussien comme d'un fil conducteur dans notre parcours au travers de l'univers des milieux désordonnés. Non seulement

parce qu'il est un choix naturel, mais aussi, parce qu'il constitue un cas d'école extrêmement étudié, qui nous permet de tester nos résultats. Ainsi, dans un premier temps nous choisissons une fois encore un potentiel purement Gaussien qui va correspondre dans notre langage à  $\nu(\phi) = -\beta\phi$ . Nous pouvons alors calculer exactement (IV.52), ce qui donne

$$\kappa_e^{(PA)} = \exp\left(-\frac{\beta^2}{D}\right). \quad (\text{IV.53})$$

Où nous avons fixé ici, comme nous en avons pris l'habitude dans les chapitres précédents et dans les simulations, la variance du champ à  $\Delta(0) = 1$ . Chose remarquable, nous retrouvons les résultats exacts (II.75) et (II.82) pour un potentiel Gaussien en une et deux dimensions ! Ainsi, ce calcul, qui repose pourtant sur une méthode approchée, semble capturer tous les ingrédients qui font la physique de ce problème, du moins pour un potentiel Gaussien. Cependant, ceci n'est plus vrai pour  $D > 2$ , en effet, nous avons vu que la conjecture de Landau-Lifshitz-Matheron sur laquelle repose la formule (IV.52) pour la constante de diffusion n'est plus exacte en dimension supérieure à 2 [31]. Pourtant, si nous effectuons des simulations de ce modèle en trois dimensions, les résultats obtenus pour la constante de diffusion sont en remarquable accord avec la prédiction (IV.53). Cet accord va alors bien au delà de la région perturbative, où une théorie des perturbations basique devrait s'appliquer. Ce qui semble faire la force de ce type de groupe de renormalisation auto-similaire, c'est qu'il semble qu'il conserve certaines lois fondamentales du système. Par exemple, une extension du RG présentée précédemment, dans lequel on renormalise aussi la constante de couplage  $\lambda_0$  du champ [80], redonne exactement le résultat (IV.53). On peut alors montrer que cette méthode préserve la relation de fluctuation-dissipation d'Einstein [52], c'est à dire que la constante de couplage est renormalisée de la même façon que la diffusivité

$$\frac{\lambda_e}{\kappa_e} = \frac{\lambda(\infty)}{\kappa(\infty)} = \frac{\lambda_0}{\kappa_0} = \beta. \quad (\text{IV.54})$$

La conservation de cette relation par le RG semble primordiale dans son succès, car dès qu'une méthode perturbative la perd (comme celle présentée dans le premier paragraphe de ce chapitre), les résultats deviennent vraiment médiocres. Nous pouvons aussi interpréter ceci par le fait que la méthode utilisée préserve la mesure, à l'état d'équilibre, de la diffusivité effective du problème, au cours du flot de renormalisation. Le RG auto-similaire que nous avons utilisé ici, sur le problème de diffusivité aléatoire conserve lui aussi clairement la mesure plate de l'état d'équilibre, ce qui explique alors son succès. Nous pouvons donc en conclure que si nous voulons réaliser un calcul perturbatif, il faut s'assurer qu'il conserve bien la mesure à l'équilibre, pour espérer avoir un bon accord.

### 3.2 Mise en évidence d'une transition

Dans le chapitre précédent, nous avons mis en évidence, dans le cas d'un potentiel Gaussien au carré, une transition dynamique pour une température critique non nulle  $T_C = 1$ . Dans le cas d'un potentiel Gaussien, le calcul présenté ici reproduit tous les résultats analytiques en une et deux dimensions. Nous espérons donc que dans le cas du potentiel Gaussien au carré, la formule (IV.52) nous redonne une transition dynamique à la même température critique (au moins en dimension une et deux). Pour cela, nous allons introduire une version généralisée du potentiel étudié au chapitre 3, et dans le langage utilisé ici, ce potentiel va s'écrire

$$\nu(\phi) = -\beta V(\phi) = -\frac{\beta}{2} (\phi - a)^2. \quad (\text{IV.55})$$

Ici,  $a$  est une constante quelconque, et dans le cas où  $a = 0$ , nous retrouvons le potentiel Gaussien au carré. De plus, nous réintroduisons maintenant le potentiel physique  $V(\phi)$ . Contrairement au cas purement Gaussien, le comportement diffusif va dépendre du signe de l'inverse de la température  $\beta$ . Ainsi, quand  $\beta$  est positif, la particule de Langevin est attirée par les minima du potentiel donné par  $\phi = a$ . Dans un espace à  $D$  dimensions, les régions où il est minimal vont alors former des variétés de dimension  $D - 1$ . A très basse température, on s'attend à ce que la particule soit confinée dans ces régions, cependant, la particule restera libre de diffuser à l'intérieur et il n'y a aucun mécanisme, clairement établi, qui nous pousse à penser que le système peut subir une transition dynamique et devenir sous diffusif. Pourtant, dans le cas où  $D = 1$ , les régions où le potentiel est minimal vont devenir des points (de dimension nulle), bien localisés dans l'espace et séparés par des barrières de potentiel. A très basse température, ces points vont agir comme des pièges et la seule façon de diffuser sera par activation thermique, d'un piège à l'autre. Nous avons alors vu que le temps de piégeage est donné par une loi d'Arrhenius (II.44), et si on suppose que les barrières de potentiel sont proportionnelles au potentiel même, dans le cas d'un potentiel Gaussien au carré, il existe alors une température critique en dessous de laquelle le système devient sous diffusif. Nous avons bien sûr vu que c'était le cas et nous avons trouvé que  $\beta_c = +1$ , cependant en dimension  $D > 1$  et pour  $\beta > 0$ , nous nous attendons à ne trouver aucune transition à température finie. Pour  $\beta$  négatif, les choses vont être un peu différentes. En effet, à très basse température, la particule va maintenant être attirée par les régions où  $\phi$  sera maximal ou minimal et  $\nabla\phi = 0$ . Clairement, ces régions vont être de dimension nulle, et ce quelle que soit la dimension de l'espace  $D$ . Ainsi, comme à une dimension quand  $\beta$  est positif, pour  $\beta$  négatif, on s'attend à avoir une transition dynamique à température finie, pour tout  $D$ . Effectivement, Nous avons bien mis en évidence en dimension une, pour le potentiel Gaussien au carré, que la transition était aussi présente pour  $\beta_c = -1$ .

Dans le cas où les régions attractives correspondent à des pièges localisés de dimension nulle ( $\beta < 0$ ), nous avons vu que le temps moyen de piégeage est donné par une loi d'Arrhenius. On peut alors exprimer simplement la constante de diffusion en terme du temps moyen de résidence, moyenné sur l'ensemble des pièges grâce à la relation (II.3)

$$\kappa_e^{(PA)} \sim \frac{1}{\langle \tau \rangle} \sim \frac{1}{\langle \exp(-\beta\nu) \rangle}. \quad (\text{IV.56})$$

De même, si nous ré-exprimons le résultat (IV.52) en terme du potentiel physique  $V(\phi)$ , nous obtenons

$$\kappa_e^{(PA)} = \frac{\langle \exp(-\beta(1 - \frac{2}{D})V(\phi)) \rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}}{\langle \exp(-\beta V(\phi)) \rangle}. \quad (\text{IV.57})$$

En comparant alors (IV.56) et (IV.57), nous retrouvons le même terme  $\langle \exp(-\beta V(\phi)) \rangle$  au dénominateur. Il est clair que c'est la divergence de ce terme qui est responsable de l'annulation de la constante de diffusion, divergence qui correspond au fait que le temps de résidence dans les pièges devient infini. Le numérateur de (IV.57) est alors égal à la constante de diffusion du problème DA correspondant (IV.49). Ainsi, le problème (DA) ne possède pas de transition, même si le problème (PA) correspondant en possède une, ce qui pourra être exploité dans les simulations. Pour un potentiel défini par l'équation (IV.55), nous pouvons calculer analytiquement les constantes de diffusions  $\kappa_e^{(PA)}$  et  $\kappa_e^{(DA)}$  des problèmes correspondant. Nous trouvons, tout d'abord pour  $\kappa_e^{(DA)}$ , grâce à la formule (IV.49) :

$$\kappa_e^{(DA)} = \left(1 + \beta \left(1 - \frac{2}{D}\right)\right)^{-\frac{1}{2\left(1 - \frac{2}{D}\right)}} \exp\left(-\frac{a^2\beta}{2\left(1 + \beta\left(1 - \frac{2}{D}\right)\right)}\right). \quad (\text{IV.58})$$

Il est clair que quelle que soit la température pour  $D > 1$ , la constante de diffusion ne va jamais s'annuler. Nous pouvons aussi calculer une formule similaire pour le problème de potentiel aléatoire grâce à (IV.52), ce qui nous donne :

$$\kappa_e^{(PA)} = \frac{(1 + \beta)^{\frac{1}{2}}}{\left(1 + \beta\left(1 - \frac{2}{D}\right)\right)^{\frac{1}{2\left(1 - \frac{2}{D}\right)}}} \exp\left(-\frac{\beta^2 a^2}{D} \frac{1}{\left(1 + \beta\left(1 - \frac{2}{D}\right)\right)(1 + \beta)}\right). \quad (\text{IV.59})$$

Comme attendu, quelle que soit la dimension de l'espace  $D$ , la constante de diffusion s'annule réellement pour une température critique non nulle  $T_C = -1$ . Le modèle de potentiel aléatoire muni du choix (IV.55) possède donc une transition dynamique à  $T_C$ , analogue à la transition vitreuse, pour tout  $D$ . De plus, la valeur de la température critique est indépendante de la valeur de  $D$ . Nous pouvons vérifier si ce résultat est compatible avec les résultats exacts établis précédemment, et si nous fixons  $D = 1$ , (IV.59) devient

$$\kappa_e^{(PA)} = (1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\beta^2 a^2}{1 - \beta^2}\right). \quad (\text{IV.60})$$

Ainsi, pour  $a = 0$ , nous retrouvons parfaitement le résultat exact (III.16), grâce au calcul de RG. De plus, il est important de noter que, bien que la transition pour  $\beta$  négatif soit assurée par la formule (IV.1) d'équivalence entre les problèmes (PA) et (DA), la transition pour  $\beta$  positif est ici directement prédite par le RG ! De même, pour  $D = 2$ , (IV.59) va s'écrire

$$\kappa_e^{(PA)} = (1 + \beta)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\beta}{2}\right) \exp\left(-\frac{\beta^2 a^2}{2(1 + \beta)}\right). \quad (\text{IV.61})$$

Alors, pour  $\beta$  positif, la constante de diffusion va s'annuler, entraînant la divergence des échelles de temps, comme

$$\kappa_e^{(PA)} = \exp\left(-\frac{C}{|T - T_C|}\right), \quad (\text{IV.62})$$

qui a la forme de la loi de Vogel-Fulcher-Tammann introduite dans le chapitre 1 et qui est souvent utilisée dans les analyses des expériences sur la transition vitreuse. Enfin, pour  $D > 2$ , il est intéressant de noter que quand  $a = 0$ , la constante de diffusion va s'annuler en suivant une loi de puissance similaire à celle prédite par la théorie des couplages de modes [18]. Alors, dans notre cas, nous allons avoir  $\alpha = 2(1 - 2/D)^{-1}$ , et en dimension trois, nous retrouvons bien que  $\alpha > 1$ . Nous retrouvons alors la loi de VFT présente en dimension deux, seulement dans le cas où  $a \neq 0$ , où le terme dominant sera donné par l'équation (IV.62). La façon dont apparaît alors la loi de Volger-Fulcher-Tamman est ici identique aux mécanismes présents dans le modèle de verre de Viglis [106]. Dans ce modèle, les barrières d'énergie locale sont telles que  $\Delta E = Ez$ , où  $E$  est l'énergie de barrières typiques due aux molécules ou atomes voisins, et  $z$  correspond au nombre de coordination locale. Il s'agit en fait du nombre de voisins, qui va ici ne pas être fixe, mais aléatoire et ainsi dépendre de la position. Alors, si on suppose que  $z$  a une distribution Gaussienne de moyenne  $z_0$ , il est facile de mettre en évidence, en supposant que  $\tau$  suit une loi d'Arrhénius, la forme de VFT pour le temps de relaxation. Le comportement de la constante de diffusion pour  $\beta$  positif en dimension deux et plus semble très intéressant. Il semble ainsi

qu'en dimension deux les choses soient un peu différentes, et pour comprendre pourquoi, nous allons nous pencher sur le comportement à très basse température, qui va correspondre à la limite où  $\beta$  devient grand. Dans ce régime, en dimension deux, (IV.61) devient

$$\kappa_e^{(PA)} \sim T^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1+a^2}{2T}\right), \quad (\text{IV.63})$$

et en dimension  $D > 2$ ,  $\kappa_e^{(PA)}$  va s'écrire

$$\kappa_e^{(PA)} \sim T^{\frac{1}{D-2}} \exp\left(-\frac{a^2}{D-2}\right) \left(1 - \frac{2}{D}\right)^{-\frac{1}{2(1-\frac{2}{D})}}. \quad (\text{IV.64})$$

Ces résultats montrent bien que la dimensionnalité va jouer un rôle crucial dans le comportement à très basse température. Pour  $D = 2$ , le terme dominant dans les effets de la température sur

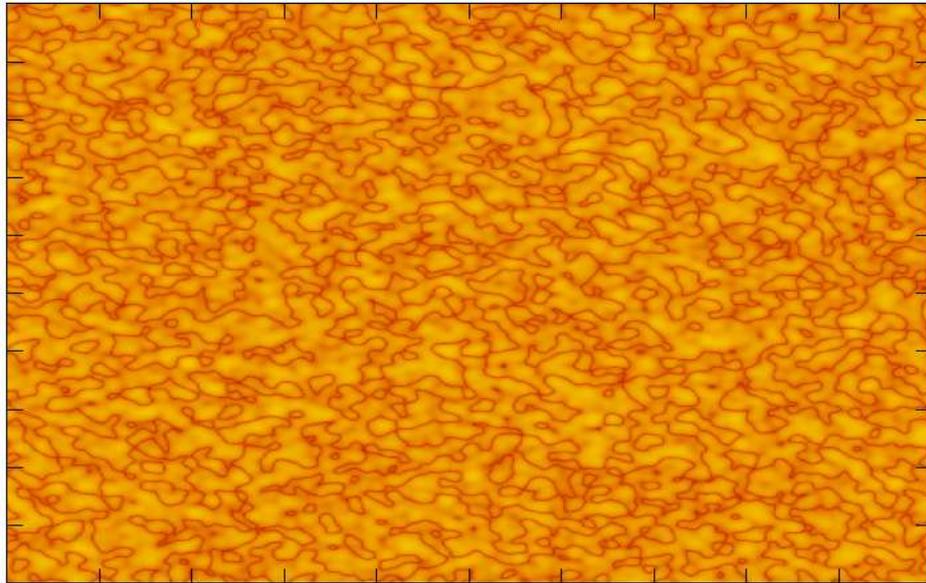


FIG. IV.5 – Représentation du champ (IV.55) en deux dimensions. Les lignes correspondent ici aux variétés de dimension une, telles que  $\phi = a$ , qui minimisent le potentiel.

la constante de diffusion est donné par une loi d'Arrhénius, ce qui implique que le mécanisme principal entraînant la diffusion est le franchissement de barrières de potentiel, ici noté  $\Delta E = \frac{1}{2}(1+a^2)$ . Cependant, pour  $D > 2$ , nous obtenons un comportement diffusif simple, en puissance de la température, ce qui implique que les effets des barrières d'énergie ne jouent plus de rôle en grande dimensionnalité et la plupart du transport s'effectue sans franchir de barrière. Pour comprendre ce qui se passe, il faut se rappeler qu'à basse température, quand  $\beta$  est positif, la particule est piégée dans les minima du potentiel, donnés par  $\phi = a$ , qui en dimension  $D$ , vont former des variétés de dimension  $D - 1$ . Ainsi, comme le montre la figure IV.5, en dimension deux, les lignes du champ, telles que  $\phi = a$ , vont avoir une taille finie, et pour diffuser sur de longues distances, la particule devra obligatoirement franchir les barrières de potentiel séparant

les différents minima. Par contre, en dimension supérieure, ces variétés vont percoler (dans le sens où on va pouvoir passer d'un minima à l'autre de façon continue, sans jamais avoir à franchir de barrière), rendant obsolète le franchissement de barrière comme mécanisme diffusif (car il a lieu sur des échelles de temps trop grandes).

## 4 Simulations numériques

Dans ce paragraphe, nous allons tester les prédictions du calcul du groupe de renormalisation pour la constante de diffusion (IV.52) grâce à des simulations numériques. Pour cela, nous allons nous placer dans le cas particulier traité au paragraphe précédent, où le potentiel est donné par l'équation (IV.55). Le champ  $\phi$  sera alors généré grâce à la méthode de Kraichnan [92], introduite dans le chapitre 3, avec un nombre de modes  $N = 128$ . Nous avons vu précédemment que ce choix pouvait engendrer des problèmes dus à des effets de tailles finies, cependant, loin de la transition, ces effets restent tout à fait marginaux et pour  $N = 128$ , s'il n'y a pas de transition, la différence avec le cas purement Gaussien est négligeable. Il se pose maintenant la question de savoir comment mener à bien les simulations, et pour cela nous avons deux possibilités. La première serait de simuler directement l'équation (II.8) à l'aide de l'algorithme de Runge-Kutta développé dans le chapitre 2. Cependant, d'après le résultat analytique (IV.59), on s'attend à avoir une transition dynamique à  $T_C = -1$  pour laquelle  $\kappa_e^{(PA)}$  va s'annuler. Dans ces conditions, comme dans le chapitre précédent, proche de la transition, les simulations ne vont plus fonctionner à cause des effets de tailles finies ! L'autre possibilité serait de simuler le problème de diffusivité aléatoire correspondant au problème (PA) et d'utiliser la formule (IV.1) pour en extraire  $\kappa_e^{(PA)}$  à partir de  $\kappa_e^{(PA)}$ . Cette méthode a pour avantage d'exploiter le fait que sa mesure d'équilibre est plate. En effet, avec une condition initiale homogène proche de l'équilibre, les simulations vont s'équilibrer très rapidement et atteindre le régime asymptotique, où se mesure la constante de diffusion. Du point de vue du temps de calcul et des ressources de l'ordinateur, le gain est important, car, quand la constante de diffusion diminue, il faut pousser les simulations de plus en plus longtemps pour atteindre l'équilibre. Cependant, cette méthode possède un avantage encore plus important dans ce cas bien précis. En effet, comme le montre le résultat (IV.58), nous nous attendons à ce qu'il n'y ait aucune transition dans le modèle (DA) correspondant. Il n'y aura donc aucun problème de taille finie dans les simulations ! Pour cette raison, nous allons privilégier la seconde possibilité et nous allons simuler l'équation (II.19) du problème (DA) correspondant. Le prix à payer est alors que l'algorithme de Runge-Kutta pour le problème (DA) est plus complexe. Nous allons utiliser pour cela, les résultats du chapitre 2 et, dans ce cas, chaque pas de temps sera donné par trois pas intermédiaires (équations (II.41), (II.42) et (II.43)). Ainsi, dans les simulations réalisées, la constante de diffusion, pour chaque instance du désordre, est obtenue en moyennant sur 10 000 particules (moyenne thermodynamique), le tout moyenné sur 500 réalisations du potentiel introduisant le désordre. Le temps de simulation a été choisi pour que les particules aient typiquement diffusé une dizaine de longueurs de corrélation, avec un pas de temps  $\Delta t = 0.01$ . La constante de diffusion est alors déterminée en ajustant au mieux l'écart quadratique moyen, à partir de la moitié du temps total de simulation pour s'assurer que l'on a atteint le régime asymptotique, par la forme linéaire simple  $At + B$ . Cependant, en deux dimensions, nous avons vu que le terme correctif a un comportement logarithmique avec le temps (III.30), dans ce cas, on ajustera alors plutôt sur la forme  $At + B \ln(t)$ . La valeur effective de la constante de diffusion  $\kappa_e^{(DA)}$  mesurée dans ces simulations pour une valeur de  $a$  égale à 0 est représentée sur la figure (IV.6) en dimensions deux, trois et quatre. Nous pouvons ainsi étudier la pertinence

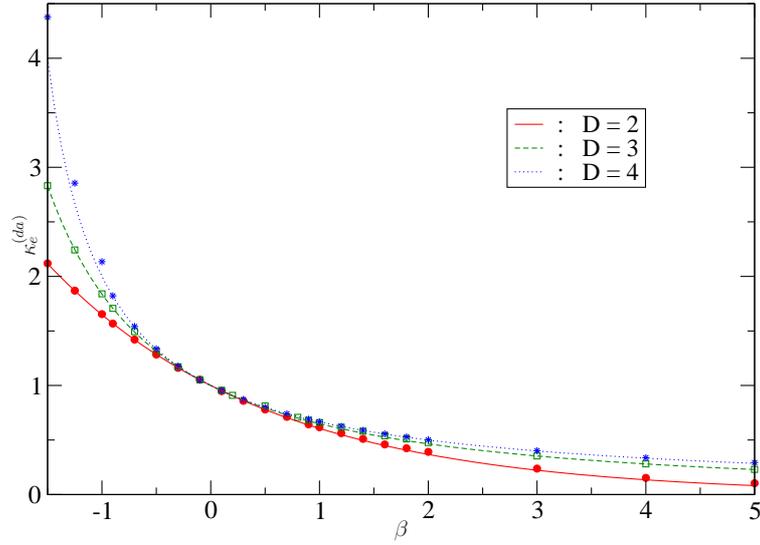


FIG. IV.6 – Calcul analytique de l'équation (IV.58) pour  $\kappa_e^{(DA)}$  avec un potentiel  $V$  donné par (IV.55) et  $a = 0$ , en 2 (rouge), 3 (vert) et 4 dimensions (bleu). Les ronds, carrés et étoiles de couleurs sont les résultats de simulations correspondant.

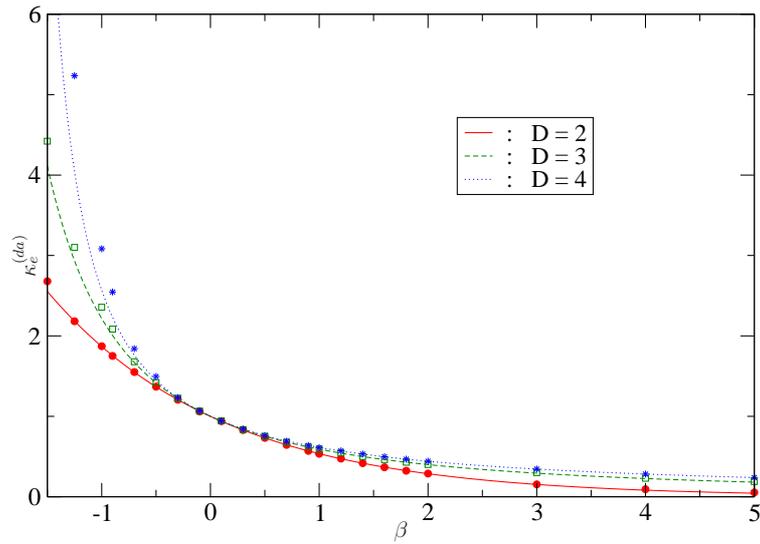


FIG. IV.7 – Calcul analytique de l'équation (IV.58) pour  $\kappa_e^{(DA)}$  avec un potentiel  $V$  donné par (IV.55) et  $a = 0.5$ , en 2 (rouge), 3 (vert) et 4 dimensions (bleu). Les ronds, carrés et étoiles de couleurs sont les résultats de simulation correspondant.

de l'approche du RG et comparer le résultat analytique (IV.58) avec les simulations. L'accord est alors, comme on peut le constater, extrêmement bon jusqu'à de très basses températures  $|\beta| > 1$ , ce qui montre que l'approche RG fonctionne bien, même en dehors du régime perturbatif. De plus, la pertinence du calcul du groupe de renormalisation semble s'améliorer lorsque l'on augmente la dimension spatiale du problème. Nous remarquons aussi qu'il n'y a effectivement aucune transition dans ce modèle à température finie et  $\kappa_e^{(DA)}$  ne s'annule jamais. Nous ne visualisons ainsi aucun effet de taille finie. Il existe cependant un problème quand la constante de diffusion devient trop grande, pour  $\beta < -1$  en grande dimension, le résultat du RG semble

sous-estimé par rapport aux simulations. Nous pensons que ce phénomène est dû au fait que la constante de diffusion effective devient trop grande, ce qui rend la simulation de l'équation stochastique moins stable, les erreurs se propagent plus vite et pour améliorer les choses, il faut diminuer le pas de temps. Nous avons vérifié ce point et, dans ce régime, l'accord s'améliore effectivement lorsqu'on diminue le pas de temps. Pour regarder les effets du paramètre  $a$  sur les

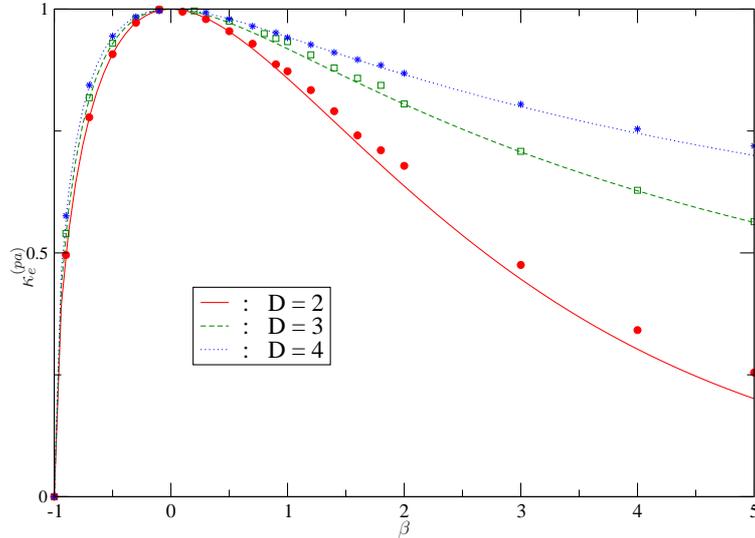


FIG. IV.8 – Prédiction du groupe de renormalisation (IV.59), en 2 (rouge), 3 (vert) et 4 dimensions (bleu), pour  $a = 0$ . Les ronds, carrés et étoiles de couleurs sont les résultats de simulation correspondant, obtenus à partir des résultats pour le problème (DA) et de la formule (IV.1).

prédictions du RG, on trace sur la figure (IV.7) la valeur effective de la constante de diffusion en deux, trois et quatre dimensions mais pour une valeur de  $a = 0.5$ . L'accord est encore une fois très bon, même au delà du régime perturbatif. Cependant, quand  $\beta < -1$ , dans ce cas la constante de diffusion est encore plus grande que quand  $a = 0$ , alors les résultats de simulation sont clairement incompatibles avec le résultat analytique. Là encore, si on diminue le pas de temps, la constante de diffusion mesurée diminue et se rapproche de la prédiction du RG.

La prédiction du RG pour le problème (PA) peut alors être directement testée en simulant directement l'équation (II.8), cependant nous avons vu qu'il est préférable de prendre les résultats pour le problème (DA) et d'appliquer la formule (IV.1) pour éviter les effets de tailles finies, qui seront inévitables proches de la transition. En utilisant cette technique, dans le cas où  $a = 0$ , on trace sur la figure (IV.8) la constante de diffusion du problème (PA) en deux, trois et quatre dimensions. Les résultats sont en parfait accord avec la prédiction du RG sur une gamme de température très importante, et le seul petit écart apparaît à très basse température en dimension deux. Le résultat le plus important est alors que quelle que soit la dimension de l'espace, il existe pour ce choix de potentiel une transition dynamique à la **même température**  $T_C = 1$  ! De plus grâce à la technique utilisée, nous pouvons contourner les problèmes de tailles finies rencontrés dans le chapitre précédent et ainsi mettre en évidence, numériquement, la transition.

## 5 Conclusion et discussion

Dans ce chapitre, nous avons vu qu'en dimension supérieure à deux, quand on manque de solutions analytiques, nous pouvons, en raffinant les techniques de groupes de renormalisation développées dans [80] et [82], prendre en compte des potentiels non-Gaussiens et calculer la constante de diffusion associée. Le point clef de ce raisonnement est alors de ne pas appliquer directement les méthodes de groupes de renormalisation au problème (PA), mais plutôt au problème (DA), reliés mathématiquement entre eux au travers de leurs constantes de diffusion. Cette technique nous a alors permis de reproduire tous les résultats exacts présentés dans le chapitre 2, en basse dimension, et, dans les cas où le résultat exact n'était pas connu, l'accord entre la prédiction et les simulations numériques est très bon. Le résultat majeur est alors que cette méthode est capable de prédire une transition de phase dynamique, analogue de la transition vitreuse, où la constante de diffusion s'annule. En dimension une, la transition pour  $\beta_c = -1$  est même prédite directement par le RG. Enfin, un autre résultat important est que l'équation (IV.50) obtenue par cette méthode, reproduit exactement la conjecture de Landau-Lifshitz-Matheron utilisée dans le domaine des milieux aléatoires poreux.

Bien entendu, dans les problèmes que nous venons d'étudier, le désordre est présent de manière formelle, sous la forme d'un potentiel aléatoire gelé. Dans un milieu qui possède une transition vitreuse réelle, le désordre est supposé être auto-induit, il apparaît à cause de la trop grande complexité des interactions. Pour mettre en évidence le lien qui existe entre les modèles jouets étudiés et des problèmes plus réels, nous allons maintenant nous pencher sur un problème où le désordre n'est pas présent explicitement. Considérons maintenant  $N$  particules Browniennes (avec une constante de diffusion sans interaction égale à 1) qui vont interagir via un potentiel  $u$  quelconque. L'équation de Langevin pour ce processus va alors s'écrire

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \eta - \beta \nabla \nu(\mathbf{X}), \quad (\text{IV.65})$$

où le potentiel total ressenti par la particule est donné par la somme de toutes les interactions

$$\nu(\mathbf{X}) = \sum_{i < j} u(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j). \quad (\text{IV.66})$$

A ce problème, va correspondre ici aussi, un problème où la diffusivité du milieu va dépendre de la position de la particule. Dans l'esprit des calculs précédents, on choisit une diffusivité donnée par la formule

$$\kappa(\mathbf{x}) = \exp(-\beta \nu(\mathbf{x})). \quad (\text{IV.67})$$

Il est clair qu'il n'y a absolument aucun désordre dans ce problème, cependant, on va le traiter comme s'il était désordonné, en appliquant la formule (IV.50) pour calculer la constante de diffusion. On estime que pour une interaction suffisamment complexe, cette analogie doit fonctionner. Pour cela, nous pouvons écrire dans un premier temps la moyenne de  $\kappa(\mathbf{x})$  comme

$$\langle \kappa(\mathbf{x}) \rangle = \frac{N!}{V^N} Z_N, \quad (\text{IV.68})$$

où  $V$  est simplement le volume du système et  $N$ , le nombre de particules que l'on a choisi ici indiscernable.  $Z_N$  est alors la fonction de partition canonique du système pour  $N$  particules et la moyenne sur le désordre  $\langle . \rangle$  a été remplacée par une moyenne spatiale. C'est en fait la bonne moyenne à faire, car si on reprend le raisonnement qui nous a conduit, dans le chapitre 2, à établir la relation entre les problèmes (DA) et (PA), résumée par l'équation (IV.1), nous

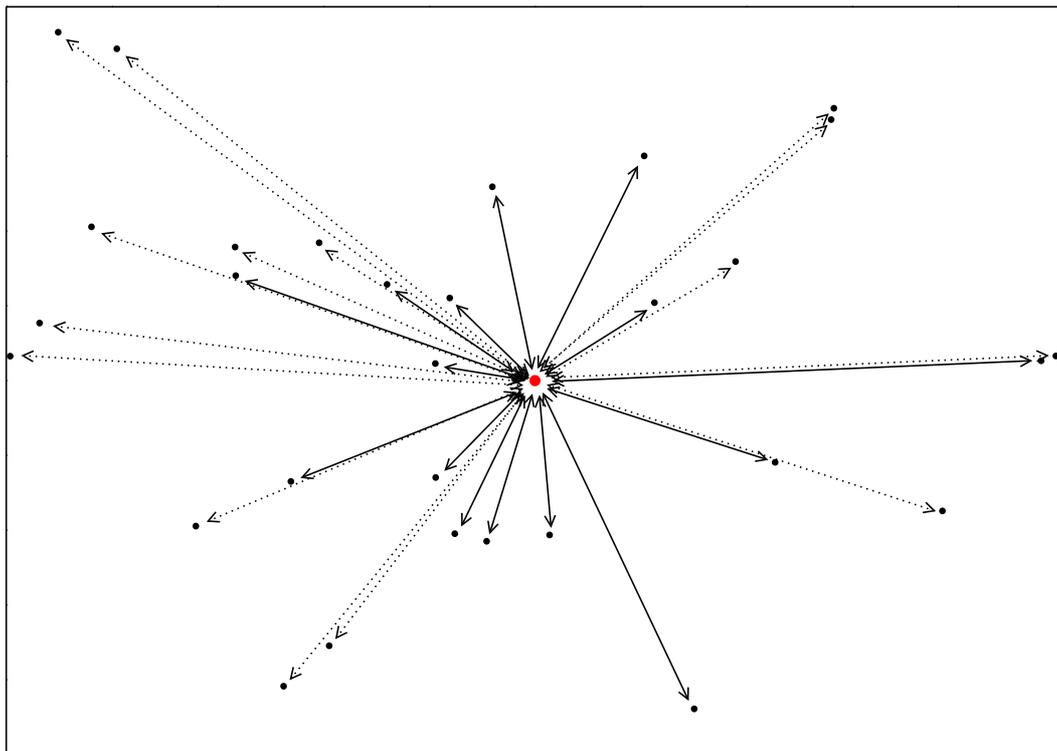


FIG. IV.9 – Un exemple pour le modèle présenté dans ce paragraphe : Chaque flèche représente une interaction  $u$  entre deux particules.

avons alors réalisé une moyenne spatiale. C'est seulement en faisant appel à l'ergodicité du système que nous avons pu transformer la moyenne spatiale en moyenne sur le désordre. Si on introduit maintenant dans le calcul l'énergie libre par particule  $f(\beta)$ , qui est définie dans les unités appropriées<sup>4</sup> par  $f(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z)$ , alors l'équation (IV.68) va s'écrire

$$\langle \kappa(\mathbf{x}) \rangle = \exp(-N(\beta f(\beta) - \ln(\rho) + 1)). \quad (\text{IV.69})$$

Ici,  $\rho$  est simplement la densité de particules  $\rho = N/V$ . Pour poursuivre ce calcul nous allons maintenant noter la dimension de l'espace des configurations du problème de diffusivité par  $D = Nd$ , où  $d$  est la dimension spatiale physique traditionnelle. Nous pouvons alors transformer l'équation précédente et obtenir

$$\langle \kappa(\mathbf{x})^{1-\frac{2}{D}} \rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}} = \exp \left[ -N \left( \beta f \left( \beta \left( 1 - \frac{2}{D} \right) \right) - \frac{\ln(\rho) - 1}{(1-\frac{2}{D})} \right) \right]. \quad (\text{IV.70})$$

Si on admet que les arguments utilisés dans ce chapitre pour des systèmes désordonnés peuvent être appliqués ici, alors l'équation (IV.70) est exactement la formule pour la constante de diffusion effective du problème (DA) (IV.50). La constante de diffusion que l'on calcule alors se doit d'être une variable intensive, c'est-à-dire qu'elle ne doit pas dépendre de la taille du système, or l'équation du dessus possède deux termes qui dépendent logarithmiquement de  $N$ . Heureusement, ces dépendances s'annulent et on retrouve une quantité intensive qui, au premier ordre en  $N$  va s'écrire

<sup>4</sup>La constante de Boltzman est ici fixée à  $k_b = 1$ .

$$\kappa_e = \exp \left( \frac{2\beta^2}{d} f'(\beta) + \frac{2 \ln(\rho) - 2}{d} \right). \quad (\text{IV.71})$$

A  $\beta = 0$ , c'est à dire quand la température est infinie, l'entropie du système est donnée simplement par l'entropie d'un gaz parfait, on a alors  $s(0) = -\ln(\rho) + 1$ . De plus, si on applique les règles triviales de la thermodynamique,  $s = \beta^2 \partial f / \partial \beta$ , et on peut ré-écrire (IV.71) en utilisant l'entropie comme

$$\kappa_e = \exp \left( 2 \frac{(s(\beta) - s(0))}{d} \right) = \exp \left( \frac{2}{d} s_{ex}(\beta) \right), \quad (\text{IV.72})$$

Où  $s_{ex}$  est simplement l'excès d'entropie par particule par rapport au gaz parfait. Ainsi, en suivant un raisonnement mathématique approximatif, mais qui reste physiquement tout à fait raisonnable, nous avons mis en évidence une relation vraiment intéressante. En effet, l'équation (IV.72) va relier la constante de diffusion, qui est une quantité dynamique, et l'excès d'entropie par particule, qui est une quantité thermodynamique statique qui n'a de sens qu'à l'équilibre. Cette formule ressemble alors beaucoup à la célèbre relation de Adam-Gibbs pour les verres, qui relie le temps de relaxation du système à l'entropie de configuration [107], cependant notre résultat est un peu différent car les quantités qu'il relie sont bien distinctes de la relation de Adam-Gibbs. La seule autre dérivation analytique, à notre connaissance, de ce type de relation est obtenue grâce à la théorie des couplages de modes [108]. Ce résultat ne parait pas farfelu car, depuis quelques années maintenant, dans la littérature de la physique chimique [109–112], il a été observé que la constante de diffusion dans les simulations de dynamique moléculaire, quand elles sont écrites dans une forme adimensionnelle, peut s'ajuster très bien, dans la phase dense, par l'expression

$$\kappa = C \exp(A s_{ex}). \quad (\text{IV.73})$$

Dans cette formule,  $C$  et  $A$  sont alors deux paramètres variationnels, que l'on fixe pour maximiser l'accord avec les simulations. Nous avons réalisé ce calcul pour une dynamique de Langevin, mais pour prédire correctement la valeur de  $C$ , il faudrait réaliser des simulations de la dynamique moléculaire, avec des paramètres physiques réels, afin d'extraire la vraie constante de diffusion sans interaction  $\kappa_0$ , que nous avons fixé à 1. Cependant, notre approche nous permet de prédire la valeur du paramètre  $A$  de l'équation (IV.73) qui s'avère être indépendant des détails microscopiques du modèle. L'approche que nous avons développée, bien que naïve, nous donne alors que  $A = 2/d$ . Des simulations numériques ont révélé que  $A$  varie très peu suivant les espèces considérées, il a été de plus rapporté que, en trois dimensions,  $A \approx 0.65$  pour des sphères dures et  $A \approx 0.8$  pour des fluides de Lennard-Jones [109]. On définit les sphères dures comme étant des sphères de rayon  $r$ , impénétrables, elles ne peuvent jamais se recouvrir. Ce problème est alors modélisé par un potentiel d'interaction infinie s'il y a recouvrement, et nulle partout ailleurs. De son côté, un fluide de Lennard-Jones possède un potentiel attractif à longue distance en  $1/r^6$  qui modélise des forces de Van Der Waals et un potentiel répulsif à courte distance en  $1/r^{12}$  qui modélise la répulsion de Pauli. Cependant d'autres études ont proposé que  $A = 1$  [111] et le sujet est toujours débattu et étudié aujourd'hui, on peut d'ailleurs se référer à [112] pour une courte revue du sujet. Sur la figure IV.10 sont reportés en échelle semi-logarithmique les résultats de [113] pour la valeur de la constante de diffusion en fonction de l'excès d'entropie pour des simulations de sphères dures confinées. On retrouve le comportement linéaire attendu et on peut extraire la valeur de la pente  $A$ , indépendante de l'espèce utilisée (les courbes rouge et bleue ont la même pente) et on trouve  $A \approx 0.65$ . Ici, nous prédisons, à

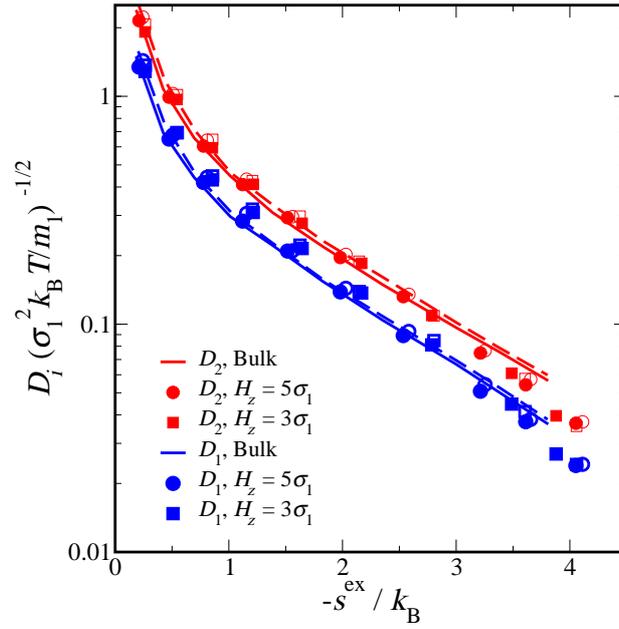


FIG. IV.10 – La constante de diffusion en fonction de l'excès d'entropie pour deux espèces de sphères dures confinées entre deux murs [113].

trois dimensions, que  $A = 2/3$ , ce qui correspond étrangement bien au cas des sphères dures présenté ici.

\* \*  
\*



# Diffusion de dipôles dans un champ électrique aléatoire

*I don't think about technique. The ideas dictate everything. You have to be true to that or you're dead.*

**David Lynch**

Dans le chapitre 2, nous avons introduit un modèle de dipôle diffusant dans un champ électrique aléatoire  $\mathbf{E}$ . Nous avons alors montré que dans une limite dite *adiabatique*, ce modèle était équivalent à celui d'une particule diffusant dans un potentiel effectif  $V(\mathbf{x})$ . Dans cette limite, le dipôle s'équilibre instantanément avec le champ local, de façon à minimiser l'énergie, ce qui modifie le champ électrique et crée un potentiel effectif. On peut ainsi découpler le mouvement du dipôle et celui du centre de masse, on parle alors d'approximation adiabatique car les degrés de liberté du centre de masse sont gelés par rapport aux degrés de liberté du dipôle. Une autre façon de le voir est de considérer que chaque phénomène a une échelle de temps caractéristique  $\tau$ , et celle sur laquelle s'alignent les dipôles,  $\tau_d$ , est beaucoup plus petite que celle sur laquelle se déplace le centre de masse,  $\tau_x$ , que l'on peut donc considérer comme constant. Le potentiel effectif est alors donné par l'équation (III.6), que nous rappelons ici par souci de clarté

$$V(\mathbf{x}) = -\frac{\chi \mathbf{E}^2(\mathbf{x})}{2}. \quad (\text{V.1})$$

Le champ électrique  $\mathbf{E}$  est alors défini à travers un potentiel aléatoire trempé  $\phi$ , de statistique Gaussienne, par la relation  $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla\phi(\mathbf{x})$ . Nous avons alors montré que, dans ce modèle effectif, pour un potentiel Gaussien au carré, il existe en une dimension une transition dynamique entre un régime diffusif, où on définit une constante de diffusion et un régime sous-diffusif, où la dynamique se gèle à la manière d'un verre. Dans le chapitre 4, nous avons généralisé ce résultat à  $D$  dimensions mais ce faisant, nous avons laissé de côté le problème initial du dipôle. Nous allons donc dans ce chapitre revenir au problème du dipôle qui a motivé ces études en premier lieu. Nous savons, dans la limite adiabatique stricte, qui va correspondre à un temps caractéristique  $\tau_d$  nul, que le modèle est décrit par un modèle (PA) effectif qui subit une transition dynamique à  $T_C = 1$ , similaire à une transition vitreuse. La question est donc de savoir si cette transition va survivre dans un modèle de dipôle plus réaliste. Il est en effet difficilement

tolérable, pour tout bon physicien, d'accepter la divergence, quelle qu'elle soit, d'une quantité physique mesurable. Ainsi un processus physique réaliste ne peut pas être instantané. Il est donc plus correct de supposer que  $\tau_p$  est très petit devant  $\tau_x$  mais reste fini. Dans ce cas, l'équivalence entre les deux modèles n'est plus exacte, et il est légitime de se demander si la transition va toujours exister, et si oui, si la température critique restera la même, ou si ce résultat est une pathologie de la limite  $\tau_p \rightarrow 0$ . Dans ce cas, il n'y aurait aucune transition pour des valeurs aussi petites, mais finies, que l'on veut de  $\tau_p$ . Nous pouvons enfin nous demander ce qu'il va se passer au delà de la limite adiabatique, dans un système où  $\tau_p$  est du même ordre de grandeur que  $\tau_x$ , ou même  $\tau_x < \tau_p$ .

Pour cela, nous allons modéliser le système par deux équations stochastiques couplées, et nous allons montrer, dans un premier temps, que dans la limite où  $\tau_p \ll \tau_x$ , nous pouvons réduire le problème à une équation de Langevin effective. Cette équation va alors correspondre à une généralisation des problèmes (PA) et (DA), car elle va comporter un potentiel aléatoire effectif  $V(\mathbf{x})$ , et une diffusivité locale anisotrope, variant spatialement notée  $\kappa_{ij}(\mathbf{x})$ . Nous allons ensuite calculer la constante de diffusion de ce problème dans la limite de faible désordre par un calcul perturbatif, et en dimension une, dans la limite précédente, nous allons résoudre exactement le système et calculer la constante de diffusion. Nous allons ainsi mettre en évidence la présence d'une transition dynamique à température finie, au delà de la limite stricte  $\tau_p \rightarrow 0$  en dimension une. Finalement, nous présenterons des résultats numériques pour valider la démarche théorique utilisée et pour explorer des régimes ( $\tau_p \sim \tau_x$ ) hors de portée des calculs analytiques que l'on va réaliser. Les résultats présentés ici ont été publiés dans [114].

## 1 Modélisation du problème

Nous avons présenté le problème du dipôle dans le chapitre 3, cependant, par souci de clarté, nous allons en rappeler les principales caractéristiques. En physique, un dipôle électrostatique est une mesure de la séparation de charges électriques positives et négatives. Il se définit quand la répartition des charges électriques est telle que le barycentre des charges positives ne correspond pas avec celui des charges négatives. Le dipôle le plus simple, que nous avons choisi pour la modélisation, correspond donc à deux charges de signes opposés, distantes d'une longueur  $d$  (voir figure V.1). L'approximation la plus simple que l'on peut prendre alors est de fixer la distance  $d$  entre les charges ; on parle alors de dipôle rigide. Dans ce modèle, nous allons plutôt

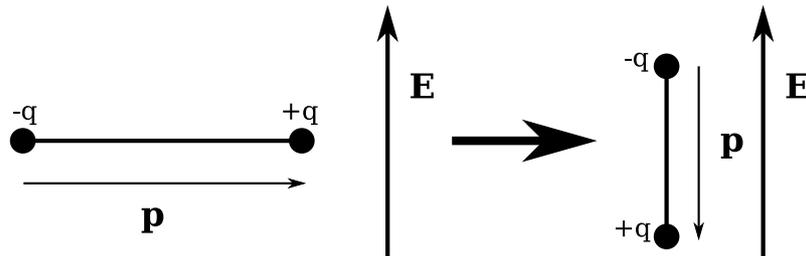


FIG. V.1 – Modélisation du dipôle dans notre modèle. En présence du champ électrique  $\mathbf{E}$ , le dipôle tend à s'aligner pour minimiser l'énergie.

relier les charges grâce à un potentiel harmonique, avec une constante de couplage  $\alpha$ , qui va permettre au dipôle noté  $\mathbf{p}$  de vibrer, tout en gardant les charges confinées. De plus, en présence d'un champ électrique externe  $\mathbf{E}$ , le dipôle va ressentir une force conservative à laquelle on peut

associer une énergie d'interaction, entre le dipôle et le champ, qui va s'écrire  $U = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x})$ . Alors, comme l'illustre la figure V.1, le dipôle va minimiser son énergie en s'alignant avec le champ. Dans notre modèle, le champ  $\mathbf{E}$  va être aléatoire, et donné par le gradient du champ Gaussien  $\phi$  défini dans le chapitre 2. Dans ces conditions, l'hamiltonien de ce problème va être la somme de l'énergie potentielle du dipôle et de l'énergie d'interaction, donnée par la formule (III.3) que l'on reporte ici

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\chi} \mathbf{p}^2 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}), \quad (\text{V.2})$$

où  $\chi$  est simplement défini comme la polarisabilité du dipôle, avec  $\chi = \alpha^{-1}$ .

Comme dans les chapitres précédents, nous allons modéliser ce problème par une dynamique de Langevin, c'est à dire par des équations stochastiques différentielles. Cependant, contrairement à ce qui précède, nous allons appliquer cette dynamique à deux degrés de liberté bien distincts, que sont la position du centre de masse du dipôle que nous allons noter  $\mathbf{x}$ , et la valeur du dipôle,  $\mathbf{p}$ . Nous allons ainsi obtenir un système d'équations stochastiques couplées, et si nous négligeons les termes d'inertie, alors la dynamique de Langevin de ce modèle va s'écrire

$$\frac{dx_i}{dt} = \beta \kappa_x p_j \frac{\partial E_j}{\partial x_i} + \sqrt{2\kappa_x} \eta_{x_i}, \quad (\text{V.3})$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\kappa_p \beta \left( \frac{p_i}{\chi} - E_i \right) + \sqrt{2\kappa_p} \eta_{p_i}. \quad (\text{V.4})$$

Ici,  $\kappa_x$  et  $\kappa_p$  vont correspondre respectivement à la constante de diffusion, pour la variable  $\mathbf{x}$  et la variable  $\mathbf{p}$ , en l'absence de désordre. Dans les SDE (V.3) et (V.4), les termes de la forme  $A_i$  vont représenter les composantes du vecteur  $\mathbf{A}$  dans la direction  $i$ . Nous avons ainsi appliqué la convention d'Einstein sur la sommation des indices répétés, et tout au long de ce chapitre, nous la respecterons. Dans l'équation (V.4),  $\kappa_p$  va aussi fixer l'échelle de temps caractéristique de relaxation du dipôle, on peut en effet, par une relation équivalente à (II.3), relier  $\tau_p$  et  $\kappa_p$ . Nous avons alors simplement  $\kappa_p \sim \tau_p^{-1}$ , ce qui veut dire que la limite stricte adiabatique traitée dans le chapitre 3 va ici correspondre à la limite où  $\kappa_p$  tend vers l'infini. De manière générale, nous parlerons de limite adiabatique quand  $\kappa_p \gg \kappa_x$ . Dans les équations de la dynamique, les termes de bruit  $\boldsymbol{\eta}_x$  et  $\boldsymbol{\eta}_p$  vont être des vecteurs dont chaque composante est une variable aléatoire Gaussienne de moyenne nulle et de variance unité, avec pour fonction de corrélation

$$\langle \eta_{x_i}(t) \eta_{x_j}(s) \rangle = \langle \eta_{p_i}(t) \eta_{p_j}(s) \rangle = \delta_{ij} \delta(t-s), \quad (\text{V.5})$$

$$\text{et } \langle \eta_{x_i}(t) \eta_{p_j}(s) \rangle = 0.$$

Nous modélisons donc les fluctuations thermiques à l'aide de bruits blancs, et  $\boldsymbol{\eta}_x$  et  $\boldsymbol{\eta}_p$  vont alors être décorrélés. Dans cette modélisation du problème, pour essayer de comprendre ce qui se passe dans la limite adiabatique stricte,  $\kappa_p \rightarrow \infty$ , nous allons ré-écrire l'équation (V.4) comme

$$p_i = \chi E_i + \frac{\chi}{\kappa_p \beta} \left( \sqrt{2\kappa_p} \eta_{p_i} - \frac{dp_i}{dt} \right). \quad (\text{V.6})$$

Jusqu'ici, nous n'avons fait que manipuler l'équation (V.4) sans faire aucune approximation. Nous pouvons donc réinjecter (V.6) dans (V.3) pour obtenir finalement

$$\frac{dx_i}{dt} = \sqrt{2\kappa_x}\eta_{x_i} + \kappa_x\beta \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\chi E_j \cdot E_j}{2} - \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \chi \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \left( \frac{dp_j}{dt} - \sqrt{2\kappa_p}\eta_{p_j} \right). \quad (\text{V.7})$$

Si nous nous plaçons maintenant dans la limite adiabatique stricte, et que nous fixons  $\kappa_p \rightarrow \infty$ , alors l'équation précédente va s'écrire

$$\frac{dx_i}{dt} = \kappa_x \frac{\beta\chi}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} E_j \cdot E_j + \sqrt{2\kappa_x}\eta_{x_i}. \quad (\text{V.8})$$

Nous obtenons ainsi une équation de Langevin effective pour le processus  $\mathbf{x}$ , de type (PA). De plus, le potentiel effectif dans cette équation est exactement celui donné par la formule (V.1) que nous avons étudiée en une dimension dans le chapitre 3. Ce résultat montre que le problème est correctement posé, et que nous disposons d'un moyen rigoureux de définir la limite adiabatique, au travers de la constante de diffusion du processus  $\mathbf{p}$ . Cependant, la dérivation de l'équation effective présentée ici est tout sauf rigoureuse. En effet, nous n'avons pas résolu l'équation (V.4) et le terme  $dp_j/dt$  pourrait très bien dépendre de  $\kappa_p$ , et la limite naïve que nous avons prise pourrait ne pas être correcte. Nous allons heureusement montrer dans le prochain paragraphe, de façon rigoureuse, que dans la limite adiabatique stricte, nous retrouvons bien l'équation de Langevin effective (V.8).

## 2 Limite adiabatique et haute température

Pour pouvoir comparer ce modèle avec ceux étudiés dans les chapitres précédents, il faut être capable de calculer la constante de diffusion, notée  $\kappa_e$  du processus  $\mathbf{x}$  du système d'équation stochastique couplé (V.3) et (V.4). Malheureusement, nous ne disposons pas, même en dimension une, d'argument pour la calculer directement. Nous allons donc présenter ici deux méthodes qui vont nous permettre, dans des régimes particuliers de calculer  $\kappa_e$ . Nous allons dans un premier temps nous placer dans le régime adiabatique, où  $\kappa_p \gg \kappa_x$ , et où nous pouvons alors dériver une équation de Langevin effective pour  $\mathbf{x}$ , à l'ordre  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ . Nous pourrions ainsi calculer exactement la constante de diffusion associée à cette équation effective, en dimension une. Dans un second temps, nous allons dériver un résultat pour la constante de diffusion en présence d'un faible désordre, qui va correspondre à la limite  $\beta \rightarrow 0$ , grâce à une formule de Kubo.

### 2.1 Équation de Langevin effective

Dans cette partie, nous nous plaçons donc dans la limite adiabatique ( $\kappa_p \gg \kappa_x$ ), ainsi, le temps de relaxation des dipôles sera proportionnel à  $\kappa_p^{-1}$  et donc très faible par rapport à la dynamique du centre de masse (les dipôles vont s'adapter très rapidement aux variations locales du champ). De manière intéressante, nous allons montrer que les équations couplées (V.3) et (V.4) peuvent se réduire à une équation de Langevin effective pour  $\mathbf{x}$  à l'ordre  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ . Ceci est tout à fait remarquable, et peut être montré en utilisant des techniques de projection d'opérateur, pour éliminer les variables rapides, présentées dans [115]. Cependant, nous avons choisi ici de présenter une dérivation de ce résultat basée sur la manipulation directe des équations de Langevin similaire à celle utilisée dans [116]. En effet, ce faisant, il est plus facile de comprendre physiquement pourquoi le processus effectif pour  $\mathbf{x}$  est Markovien à l'ordre  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ , et il est bien plus simple dans ce formalisme, d'effectuer le calcul pour des dimensions d'espace plus grandes que un. La dérivation exacte de ce résultat est plutôt longue et fastidieuse, nous

## 2. LIMITE ADIABATIQUE ET HAUTE TEMPÉRATURE

avons donc choisi de la reporter en annexe (A), et nous allons nous borner ici à donner les principales étapes de ce calcul. La première étape est d'intégrer formellement l'équation (V.4) et de l'injecter dans l'équation (V.3), ce qui donne alors

$$\frac{dx_i}{dt} = \beta \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \left[ \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta \kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \kappa_p \beta E_j(\mathbf{x}(s)) + \sqrt{\frac{2}{\kappa_p} \frac{\chi}{\beta}} \zeta_j(t) \right] + \sqrt{2\kappa_x} \eta_{x_i}. \quad (\text{V.9})$$

Nous évaluons ensuite la variation temporelle d'une fonction quelconque de  $\mathbf{x}(t)$ , définie par l'équation (V.9), et ce faisant, nous pouvons en extraire l'opérateur  $H^\dagger$  de Fokker-Planck à rebours. Pour cela, il nous faut utiliser un développement en  $\alpha^{-1}$ , où le paramètre  $\alpha$  s'écrit simplement  $\alpha = \kappa_p \beta / \chi$ . Dans la limite adiabatique, il est évident que  $\alpha^{-1} \rightarrow 0$ , et en développant à l'ordre  $O(\alpha^{-2})$ , nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \left\langle H_0^\dagger f(\mathbf{x}) \right\rangle \\ &+ \chi^2 \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \left[ \left\langle \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) + E_j H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle \right] + O\left(\left(\frac{\kappa_x}{\kappa_p}\right)^2\right), \end{aligned} \quad (\text{V.10})$$

où l'opérateur  $H_0^\dagger$  va être donné par la formule

$$H_0^\dagger f = \kappa_x \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_i} + \beta \chi \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right]. \quad (\text{V.11})$$

Dans la limite stricte où  $\kappa_p \rightarrow \infty$ , le seul terme qui survit est donné par l'opérateur  $H_0^\dagger$ . Alors, l'équation de Langevin associée à ce processus est exactement similaire à (V.8). Nous retrouvons ainsi, de façon tout à fait rigoureuse, la bonne limite pour le modèle de dipôle, ce qui valide l'approche utilisée dans ce calcul. Si maintenant, nous nous intéressons à une limite adiabatique plus souple, en conservant le premier terme proportionnel à  $\kappa_x / \kappa_p$ , l'équation de Fokker-Planck associée au processus  $\mathbf{x}$  va s'écrire

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = H \rho = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \kappa_{ij} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \beta \rho \frac{\partial V}{\partial x_j} \right) \right], \quad (\text{V.12})$$

où  $V$  correspond au potentiel effectif donné par la formule (V.1) et  $\kappa_{ij}$  à la diffusivité effective du milieu, spatialement variable et anisotropique. Elle va être donnée par le tenseur

$$\kappa_{ij} = \kappa_x \left[ \delta_{ij} - \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \chi^2 \frac{\partial E_k}{\partial x_i} \frac{\partial E_k}{\partial x_j} \right]. \quad (\text{V.13})$$

On peut vérifier que l'équation de Fokker-Planck ainsi définie possède la distribution d'équilibre de Gibbs Boltzmann correcte, avec le potentiel effectif  $V$ , ce qui va nous permettre d'écrire l'équation de Langevin correspondante

$$\frac{dx_i}{dt} = \beta \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\chi E_j^2}{2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \kappa_{ij} + \sqrt{2\kappa_{ij}} \eta_i, \quad (\text{V.14})$$

où  $\boldsymbol{\eta}$  est ici aussi un bruit blanc Gaussien défini par  $\langle \eta_i(t) \eta_j(s) \rangle = \delta_{ij} \delta(t-s)$ . Cette formule est très importante et elle constitue un des résultats majeurs de ce chapitre. Le modèle du dipôle est alors équivalent, à l'ordre  $O(\kappa_x / \kappa_p)$ , à la dynamique d'une particule diffusant dans

le potentiel effectif  $V$ , en présence d'une diffusivité anisotropique  $\kappa_{ij}$ , variant spatialement. De plus, dans la limite stricte, la diffusivité  $\kappa_{ij}$  va se réduire à  $\kappa_{ij} = \kappa_x \delta_{ij}$  et l'équation de Langevin effective (V.14) à (V.8) rigoureusement. Cependant, dans le développement de l'équation (V.14) présenté ici, nous avons passé sous silence un problème assez important. En effet, nous avons effectué dans ce calcul, un développement en puissance de  $\alpha^{-1}$ , en supposant que  $\alpha \rightarrow \infty$  quand  $\kappa_p \rightarrow \infty$ . Or, si on regarde  $\alpha$  de plus près, on se rend compte que  $\kappa_p$  est multiplié par un facteur de  $\beta$ ,  $\alpha = \kappa_p \beta / \chi$ . Ainsi, quelle que soit la valeur de  $\kappa_p$ , tant qu'il reste fini, il va exister une échelle de température, typiquement quand  $\beta$  est de l'ordre de  $\chi / \kappa_p$ , pour laquelle  $\alpha^{-1}$  ne va plus être inférieur à 1. Dans ce cas, le développement présenté ici n'a plus aucun sens ! Alors, pour prédire le comportement de la constante de diffusion à basse température, nous allons présenter un calcul approximatif pour le régime haute température et établir ainsi une formule dite de *Kubo*.

## 2.2 Approximation à haute température

Pour établir la formule de Kubo pour la constante de diffusion du système, nous allons donc nous placer dans le régime de haute température, ou de manière équivalente de faible désordre, qui va correspondre à la limite  $\beta \rightarrow 0$ . Considérons le processus décrit par les équations (V.3) et (V.4) à l'équilibre à l'instant  $t = 0$ . Si nous intégrons l'équation stochastique différentielle (V.3) entre 0 et  $t$ , nous obtenons alors

$$x_i(t) - x_i(0) = \sqrt{2\kappa_x} B_i(t) + \beta \kappa_x \int_0^t ds p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)). \quad (\text{V.15})$$

Où  $\mathbf{B}(t)$  est défini comme le mouvement Brownien standard à  $D$  dimensions, tel que  $\langle \mathbf{B}(t)^2 \rangle = 2Dt$ , et  $x_i(0)$  est la position initiale dans la direction  $i$ . Si nous prenons alors le carré de cette équation et que nous moyennons des deux cotés, cela donne

$$\begin{aligned} 2\kappa_x t = \langle (x_i(t) - x_i(0))^2 \rangle + 2\kappa_x \beta \left\langle (x_i(t) - x_i(0)) \cdot \int_0^t ds p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \right\rangle \\ + (\kappa_x \beta)^2 \int_0^t ds \int_0^s ds' \langle p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) p_k(s') \cdot \nabla_i E_k(\mathbf{x}(s')) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{V.16})$$

A l'équilibre, le système est invariant par translation. Il doit donc satisfaire les propriétés de la balance détaillée, et pour n'importe quelles fonctions  $A$  et  $B$  de  $\mathbf{x}(t)$ , on peut écrire

$$\langle A(\mathbf{x}(t)) B(\mathbf{x}(s)) \rangle = \langle A(\mathbf{x}(t-s)) B(\mathbf{x}(0)) \rangle. \quad (\text{V.17})$$

De plus, Les fonctions  $A$  et  $B$  vont aussi satisfaire la relation de symétrie de Onsager définie par

$$\langle A(\mathbf{x}(t)) B(\mathbf{x}(s)) \rangle = \langle B(\mathbf{x}(t)) A(\mathbf{x}(s)) \rangle. \quad (\text{V.18})$$

Nous avons supposé que le système était initialement à l'équilibre dans un volume  $V$ . Si de plus, nous supposons que la constante de diffusion est calculée à un temps suffisamment long pour que le centre de masse du dipôle ait diffusé d'une distance bien plus grande que la longueur de corrélation du système, mais plus petite que la taille du système même, alors nous pouvons appliquer les résultats (V.17) et (V.18). Nous pouvons ainsi montrer que le second membre

dans (V.16) va s'annuler

$$\begin{aligned}
 & \left\langle (x_i(t) - x_i(0)) \cdot \int_0^t ds p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \right\rangle \\
 &= \int_0^t ds [\langle x_i(t) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle - \langle x_i(0) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle] \\
 &= \int_0^t ds [\langle x_i(t-s) p_j(0) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(0)) \rangle - \langle x_i(0) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle] \\
 &= \int_0^t ds [\langle p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) x_i(0) \rangle - \langle x_i(0) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle] \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{V.19}$$

et de ce fait (V.16) va s'écrire

$$\begin{aligned}
 \langle (x_i(t) - x_i(0))^2 \rangle &= 2\kappa_x t \\
 -(\kappa_x \beta)^2 \int_0^t ds \int_0^s ds' &\langle p_j(s-s') p_k(0) \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s-s')) \nabla_i E_k(\mathbf{x}(0)) \rangle.
 \end{aligned} \tag{V.20}$$

Cette équation est jusqu'à présent exacte, cependant, pour pousser plus loin le calcul, nous allons maintenant devoir utiliser une approximation. Pour cela, nous allons évaluer l'intégrale dans l'équation (V.20), à l'ordre  $\mathbf{E}^2$ , en utilisant la statistique de  $\mathbf{x}$  et de  $\mathbf{p}$  en l'absence de champ  $\mathbf{E}$ . Ceci va alors correspondre à une limite de faible désordre qui va devenir exacte à très haute température. Dans ces conditions, la variable  $\mathbf{p}$  va être purement Gaussienne, et sa fonction de corrélation va être donnée par

$$\langle p_j(s) p_k(0) \rangle = \frac{\chi}{\beta} \exp\left(-\frac{\kappa_p \beta}{\chi} s\right) \delta_{jk}. \tag{V.21}$$

De plus, nous définissons la constante de diffusion du système pour le processus  $\mathbf{x}$ , dans le régime asymptotique qui correspond à la limite où  $t \rightarrow \infty$ , par la relation

$$\langle (x_i(t) - x_i(0))^2 \rangle = 2\delta_{ij} \kappa_x t. \tag{V.22}$$

Ainsi, dans ces conditions,  $\mathbf{p}$  et  $\mathbf{E}$  vont être décorrélés, et en utilisant (V.21), nous pouvons ré-écrire la moyenne dans (V.20) comme

$$\begin{aligned}
 & \langle p_j(s-s') p_k(0) \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s-s')) \nabla_i E_k(\mathbf{x}(0)) \rangle \\
 &= \frac{\chi}{\beta} \exp\left(-\frac{\kappa_p \beta}{\chi} (s-s')\right) \langle \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s-s')) \nabla_i E_k(\mathbf{x}(0)) \rangle \delta_{jk}.
 \end{aligned} \tag{V.23}$$

Si nous sommes maintenant sur tous les indices d'espace et que l'on rassemble les résultats (V.20), (V.22) et (V.24), nous obtenons pour  $\kappa_e$ , l'expression suivante

$$\kappa_e = \kappa_x - \frac{\kappa_x^2 \beta \chi}{Dt} \int_0^t ds \int_0^s ds' \exp\left(-\frac{\kappa_p \beta}{\chi} (s-s')\right) \langle \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s-s')) \nabla_i E_j(\mathbf{x}(0)) \rangle. \tag{V.24}$$

Pour calculer  $\kappa_e$ , il nous reste alors une dernière étape à franchir, qui va consister à évaluer la moyenne sur le gradient du champ dans l'intégrale. Il faut alors se rappeler que  $\mathbf{E}$  est défini

comme le gradient du champ Gaussien  $\phi$  par la relation  $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla\phi(\mathbf{x})$ . Nous pouvons alors ré-exprimer cette moyenne, en terme de  $\Delta(\mathbf{x})$ , la fonction de corrélation du champ  $\phi$ , définie par la formule (II.5), et si nous prenons maintenant la transformée de Fourier, la moyenne va finalement s'écrire

$$\begin{aligned} \langle (\nabla_i E_j \mathbf{x}(s - s')) \nabla_i E_j(\mathbf{x}(0)) \rangle &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \tilde{\Delta}(\mathbf{k}) \mathbf{k}^4 \langle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}(s - s')) \rangle \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \tilde{\Delta}(\mathbf{k}) \mathbf{k}^4 \exp(-\mathbf{k}^2 \kappa_x (s - s')), \end{aligned} \quad (\text{V.25})$$

où  $\tilde{\Delta}(\mathbf{k})$  correspond à la transformée de Fourier du corrélateur  $\Delta(\mathbf{x})$ . Il ne nous reste finalement plus qu'à calculer la double intégrale sur  $s'$  et  $s$  dans l'équation (V.24), pour pouvoir exprimer, dans la limite de faible désordre,  $\kappa_e$  grâce à la formule de Kubo suivante

$$\kappa_e = \kappa_x - \frac{\kappa_x^2 \beta \chi}{D} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{\tilde{\Delta}(\mathbf{k}) \mathbf{k}^4}{\mathbf{k}^2 \kappa_x + \frac{\kappa_p \beta}{\chi}}. \quad (\text{V.26})$$

Nous obtenons ainsi, une formule pour la constante de diffusion dans le régime de haute température, où le développement de l'équation de Langevin effective (V.14) n'est plus correct. Le résultat ne peut pas s'écrire sous forme analytique car nous ne pouvons réaliser le calcul de l'intégrale. Nous pouvons néanmoins la calculer numériquement et nous pourrions ainsi comparer ce résultat avec des simulations. Nous espérons ainsi pouvoir prédire la valeur de la constante de diffusion dans toute la gamme de température, si nous sommes capables d'évaluer la constante de diffusion associée à l'équation de Langevin effective (V.14).

### 3 Résultat analytique en dimension une

Dans les paragraphes précédents, nous avons donc dérivé une équation de Langevin effective (V.14) pour le processus  $\mathbf{x}$ , en dimension quelconque  $D$ . Pour aller plus loin, nous allons nous placer en dimension une, et montrer qu'alors, nous pouvons calculer exactement la constante de diffusion associée à cette équation effective. Pour cela, nous allons appliquer les résultats généraux, que nous avons présentés au chapitre 2 et qui sont détaillés dans [56], à l'équation de Fokker-Planck correspondante, donnée par la formule (V.12). Ainsi, en dimension une et à l'équilibre, (V.12) va simplement s'écrire

$$\kappa(x) \left( \frac{d\rho}{dx} + \beta\rho \frac{dV}{dx} \right) = j, \quad (\text{V.27})$$

où  $j$  est un courant qui en dimension une, va être constant à cause de la condition d'incompressibilité  $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ . De plus, à une dimension, la diffusivité effective du problème donné par la formule (V.13) va alors se réduire à

$$\kappa(x) = \kappa_x \left[ 1 - \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \chi^2 \left( \frac{dE(x)}{dx} \right)^2 \right]. \quad (\text{V.28})$$

Nous pouvons alors intégrer directement l'équation de Fokker-Planck, pour en déduire la forme explicite de la densité de probabilité à l'équilibre, ce qui nous donne

$$\rho(x) = j e^{-\beta V(x)} \int_0^x \frac{e^{\beta V(y)}}{\kappa(y)} dy. \quad (\text{V.29})$$

### 3. RÉSULTAT ANALYTIQUE EN DIMENSION UNE

En utilisant les résultats précédents, nous pouvons en déduire la constante de diffusion. En effet, comme le montre l'équation (II.69), la densité de probabilité à l'équilibre est reliée au courant et à la constante de diffusion par la relation  $\kappa_e \langle d\rho/dx \rangle = j$ . Où le signe  $\langle \cdot \rangle$  signifie que nous avons moyenné sur le désordre introduit par le champ électrique aléatoire. Nous obtenons alors

$$\kappa_e \left\langle \frac{d\rho}{dx} \right\rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\kappa_e j}{L} \left\langle e^{-\beta V(L)} \int_0^L \frac{e^{\beta V(y)}}{\kappa(y)} dy \right\rangle = j, \quad (\text{V.30})$$

ce qui va pouvoir s'écrire

$$\kappa_e = \langle \exp(-\beta V(x)) \rangle^{-1} \left\langle \frac{\exp(\beta V(x))}{\kappa(x)} \right\rangle^{-1}. \quad (\text{V.31})$$

Ce résultat est alors sensiblement similaire à (II.72), nous avons ici simplement introduit un terme supplémentaire dans la moyenne, dû à la diffusivité aléatoire. Ce n'est cependant pas la seule différence, en effet dans (II.72), le calcul est directement exprimé en terme de  $\phi$ , qui possède une statistique Gaussienne, or ici, le calcul s'exprime en terme du champ électrique aléatoire  $E$ , gradient de  $\phi$ . Ainsi, le calcul du premier terme dans (V.31) ne devrait pas poser de problème, en revanche le second terme risque d'être plus compliqué, à cause de la présence de  $\kappa(x)$ . Heureusement, si nous choisissons un corrélateur de la forme  $\Delta(x) = f(x^2)$  pour  $\phi$ , en s'assurant que  $f$  est analytique en 0, alors nous remarquons que  $\langle E^2(0) \rangle = -2f'(0)$  et  $\langle E'(0)E(0) \rangle = 0$ . Dans ces conditions,  $E'$  et  $E$  ne sont pas corrélés, ce qui entraîne que  $\kappa(x)$  et  $V(x)$  ne le sont pas non plus. En effet,  $\kappa$  n'est fonction que de  $E'$  et  $V$  de  $E$  et  $\kappa_e$  va finalement s'écrire

$$\kappa_e = \frac{\langle \kappa(x)^{-1} \rangle^{-1}}{\langle \exp(-\beta V(x)) \rangle \langle \exp(\beta V(x)) \rangle}. \quad (\text{V.32})$$

Dans le chapitre précédent, qui correspond ici à la limite adiabatique stricte, nous avons montré que la transition dynamique alors observée, pouvait s'identifier à la divergence de l'un des deux termes du dénominateur de l'équation ci-dessus. Ainsi, au premier ordre, au delà de l'approximation adiabatique stricte, la transition dynamique devrait survivre, et la température critique devrait même ne pas être modifiée. Dans les simulations numériques, nous avons choisi pour le champ  $\phi$  la fonction de corrélation suivante  $\Delta(x) = \exp(-x^2/2)$ , et dans ces conditions nous pouvons calculer exactement (V.32) pour trouver

$$\kappa_e = \kappa_x \sqrt{1 - \chi^2 \beta^2} \left( 1 - \frac{\kappa_x \chi^2}{\kappa_p} \right). \quad (\text{V.33})$$

Ce résultat est très important, car il montre que dans ce régime, la constante de diffusion s'anule pour une température critique non nulle  $T_C = \pm\chi$ . Ainsi, à l'ordre  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ , la transition survit et pour un modèle de dipôle réaliste, il va exister une transition, analogue à la transition vitreuse, entre un régime diffusif et un régime sous-diffusif. De plus, dans le modèle étudié dans les chapitres précédents, qui correspond à la limite adiabatique stricte, la susceptibilité  $\chi$  a été fixée à 1. Si nous faisons de même ici, alors la température critique va être strictement la même dans les deux cas! Au delà de la limite stricte, la transition est préservé à la même température. Nous pouvons remarquer aussi que nous retrouvons exactement, quand  $\chi = 1$ , dans la limite où  $\kappa_p \rightarrow \infty$ , la formule (III.16) pour la constante de diffusion d'une particule soumise à un potentiel Gaussien au carré. Cependant, le champ d'application de ce résultat va être limité. En effet, nous avons vu qu'à haute température, l'équation de Langevin effective

(V.14) n'était plus correcte et dans la limite où  $\beta \rightarrow 0$ , la constante de diffusion va être égale à  $\kappa_e = \kappa_x(1 - \kappa_x\chi/\kappa_p)$ . Ainsi, si  $\kappa_p$  est fini,  $\kappa_e$  est différent de  $\kappa_x$ , ce qui est clairement faux car en l'absence de désordre, la constante de diffusion du milieu est donnée par  $\kappa_x$ . Heureusement, dans cette gamme de température, nous disposons de la formule de Kubo (V.26) établie au paragraphe précédent. Pour tester tous ces résultats, il nous faut maintenant réaliser des simulations numériques poussées que nous allons présenter dans le prochain paragraphe.

## 4 Simulations numériques

La question centrale est maintenant de savoir quoi simuler. Le résultat important que nous allons chercher à valider au travers des simulations est donné par l'équation (V.33), nous allons donc nous placer en dimension une. Pour cela, une première possibilité serait de simuler l'équation de Langevin effective (V.14) directement. Cependant, deux problèmes vont alors émerger, tout d'abord, pour simuler l'équation différentielle, il va falloir se contenter de l'algorithme de Runge-Kutta à l'ordre  $O(\Delta t)$  (II.32), ou bien en développer un à l'ordre  $O(\Delta t^2)$  en utilisant les méthodes présentées, ce qui peut s'avérer difficile. Deuxièmement, à haute température, les simulations ne vont plus correspondre au modèle du dipôle que nous souhaitons étudier. L'autre possibilité est alors de simuler le système d'équations différentielles couplées (V.3) et (V.4). Alors, les diffusivités de  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{p}$  vont être constantes, et nous pouvons adapter les résultats du chapitre 2 (II.40) pour intégrer ces équations à l'ordre  $O(\Delta t^2)$ . Nous allons donc privilégier cette méthode et présenter maintenant le détail des simulations.

### 4.1 Méthodes utilisées

Pour simuler la dynamique de Langevin régie par les équations (V.3) et (V.4), nous allons tout d'abord, par convention, fixer la constante de diffusion en l'absence de désordre  $\kappa_x$  à 1. Nous allons ensuite définir de nouvelles variables réduites  $p_i = \tilde{p}_i\sqrt{\kappa_p}$  et  $E_i = \tilde{E}_i\sqrt{\kappa_p}$ , de façon à ce que les échelles temporelles des deux équations soient similaires, ce qui va amplement faciliter les simulations. Avec ces nouvelles variables, le système d'équation va alors s'écrire

$$\frac{dx_i}{dt} = \beta\kappa_p\tilde{p}_j\frac{\partial\tilde{E}_j}{\partial x_i} + \sqrt{2}\eta_{x_i} \quad (\text{V.34})$$

$$\frac{d\tilde{p}_i}{dt} = -\kappa_p\beta\left(\frac{\tilde{p}_i}{\chi} - \tilde{E}_i\right) + \sqrt{2}\eta_{p_i}. \quad (\text{V.35})$$

Il nous faut alors intégrer ces équations avec un pas de temps le plus petit possible pour compenser les effets de  $\kappa_p$  qui va être grand et va déstabiliser l'intégration numérique, nous prendrons  $\Delta t = 0.01$ . Dans toutes nos simulations, la constante de diffusion effective, pour une réalisation donnée du désordre, sera obtenue en traçant l'écart quadratique moyen pour la variable  $x$ , moyenné sur 2000 particules, aux temps longs. Ainsi, le temps de simulation sera choisi, encore une fois, de manière à ce que les particules aient diffusé sur une distance équivalente à une dizaine de longueur de corrélation du champ. L'ajustement de l'écart quadratique moyen sur les courbes de diffusion se fera alors à partir de la moitié du temps de simulation, pour s'assurer que le régime asymptotique est bien atteint, par la forme :  $at + bt^\theta$ , où  $\theta < 1$ . Il y aura donc trois paramètres ajustables et les corrections au terme linéaire devront bien être prises en compte, car comme nous l'avons montré dans le cas du potentiel Gaussien au carré, elles deviennent de plus en plus importantes, au fur et à mesure que la dynamique se ralentit,

lorsqu'on se rapproche de la transition. Par souci de simplicité et pour correspondre aux modèles précédents, nous allons de plus fixer  $\chi$  à 1. Nous allons finalement moyenner les valeurs mesurées de  $\kappa_e$  sur 2 000 réalisations du champ et estimer des barres d'erreurs à partir de la déviation standard d'une réalisation du champ à l'autre. Il va cependant se poser le problème de savoir comment générer le potentiel électrique Gaussien  $\phi$ , qui va nous permettre d'écrire  $E$ . En effet, en utilisant la méthode de Kraichnan, nous avons vu que dans les simulations, des effets de tailles finies apparaissent, proches d'une transition, qui vont totalement masquer sa présence. Dans le chapitre 4, ces effets ont pu être jugulés, en simulant un problème annexe qui ne possède pas de transition, ce qui nous est impossible ici. Il est vital ici de pouvoir faire la différence entre des effets de tailles finies et des effets réellement présents, car nous allons explorer numériquement des régimes pour lesquels nous n'avons aucun indice analytique sur lesquels nous appuyer, et il nous faut pouvoir faire confiance aux résultats ainsi obtenus.

Nous allons pour cela présenter une autre méthode, développée dans [117] et utilisée dans [118], pour générer un champ Gaussien caractérisé par la fonction de corrélation (II.5). L'idée de base est que le champ Gaussien peut s'écrire sous une forme générale comme le produit de convolution suivant

$$\phi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x - x')\eta(x') dx', \quad (\text{V.36})$$

où  $K$  est une fonction de cœur et  $\eta(x)$  est un bruit blanc Gaussien avec pour fonction de corrélation  $\langle \eta(x)\eta(y) \rangle = \delta(x - y)$ . Alors, la forme linéaire de (V.36) nous assure que  $\phi(x)$  est bien un processus Gaussien, et l'invariance par translation de la fonction de cœur  $K(x - x')$  qu'il est bien stationnaire. Si nous prenons maintenant la transformée de Fourier de l'expression précédente, nous obtenons

$$\tilde{\phi}(\omega) = \tilde{K}(\omega)\tilde{\eta}(\omega). \quad (\text{V.37})$$

Nous avons simplement utilisé le fait que la transformée de Fourier d'un produit de convolution de deux fonctions est donnée par le produit de la transformée de Fourier respective de ces fonctions. Nous pouvons maintenant exprimer le corrélateur de la transformée de Fourier de  $\phi$  de deux façons. En utilisant l'équation (II.5), nous pouvons écrire

$$\langle \phi(\omega)\phi(\omega') \rangle = \tilde{\Delta}(\omega)\delta(\omega + \omega'), \quad (\text{V.38})$$

et en utilisant l'équation (V.37), nous obtenons de façon tout à fait similaire

$$\langle \phi(\omega)\phi(\omega') \rangle = |\tilde{K}(\omega)|^2 \delta(\omega + \omega'). \quad (\text{V.39})$$

Par identification, on montre facilement que  $\tilde{\Delta}(\omega) = |\tilde{K}(\omega)|^2$ , ce qui nous permet d'écrire finalement

$$\tilde{\phi}(\omega) = \sqrt{\tilde{\Delta}(\omega)}\tilde{\eta}(\omega). \quad (\text{V.40})$$

Nous obtenons alors une relation explicite pour  $\tilde{\phi}(\omega)$ , la transformée de Fourier du champ  $\phi$ , en terme des transformées de Fourier de la fonction de corrélation de  $\phi$  et du bruit blanc Gaussien. Pour générer  $\phi(x)$ , il nous suffit alors de calculer  $\tilde{\Delta}(\omega)$  et  $\tilde{\eta}(\omega)$ , ce qui ne pose aucun problème du point de vue des simulations, puis d'échantillonner  $\tilde{\phi}(\omega)$  sur une grille de fréquence, et de prendre la transformée de Fourier rapide (FFT<sup>1</sup>) inverse. Cette méthode va avoir plusieurs

---

<sup>1</sup>pour *Fast Fourier Transform*

avantages, tout d'abord, il ne va pas y avoir d'effet de taille finie, car le champ généré de cette façon aura une statistique purement Gaussienne. Enfin, il ne sera nécessaire de générer le champ qu'une seule fois par instance, alors qu'avec la méthode de Kraichnan, il nous fallait recalculer la valeur du champ à chaque pas de temps. Le champ étant maintenant défini sur une grille, sa valeur à un point précis sera donnée par interpolation avec les points proches, connus.

## 4.2 Résultats numériques

Pour commencer, nous avons tout d'abord fixé la diffusivité du processus  $\mathbf{p}$  à la valeur  $\kappa_p = 10$ . Comme nous avons, pour simplifier les simulations, posé précédemment  $\kappa_x = 1$ , nous nous trouvons clairement dans le régime adiabatique où l'équation de Langevin effective (V.14) est correcte. Dans ces conditions, la formule (V.33) pour  $\kappa_e$  que nous avons établie dans le

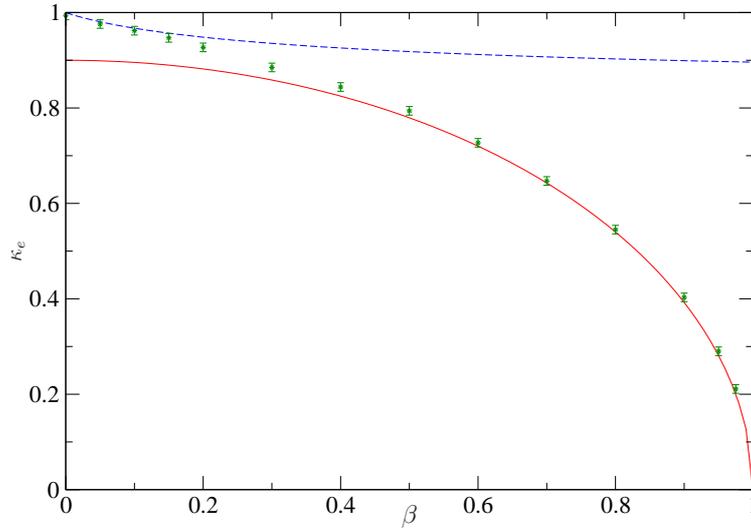


FIG. V.2 – Comparaison entre les valeurs numériques de  $\kappa_e$  (étoiles vertes) et les résultats analytiques (V.33) (en rouge) et (V.26) (en bleu), pour  $\kappa_p = 10$ .

paragraphe précédent, en dimension une, devrait être en accord avec les résultats numériques de la simulation directe des équations stochastiques différentielles couplées. Nous avons alors reporté sur la figure V.2 les résultats numériques pour la valeur de  $\kappa_e$  en fonction de l'inverse de la température  $\beta$ , comparés au résultat exact (V.33) et au développement à faible désordre donné par la formule de Kubo (V.26) que nous avons ici intégré numériquement. Nous remarquons premièrement que les résultats numériques sont en très bon accord avec la prédiction analytique (V.33) pour l'équation de Langevin effective. De plus, nous notons que les simulations prédisent (en accord avec le résultat analytique) une transition dynamique pour laquelle la constante de diffusion va s'annuler à une température critique non nulle  $T_C = 1$ . Il n'y a pas d'effet de taille finie grâce à cette nouvelle méthode de génération du champ et les simulations peuvent donc directement prédire la transition. Nous avons ainsi la preuve numérique que la transition dynamique survit au delà de la limite adiabatique stricte en gardant en plus la même température critique, en dessous de laquelle le système va alors avoir un comportement anormal. Ces résultats valident alors notre approche et l'établissement de l'équation de Langevin effective. Cependant, à haute température, comme nous l'attendions, les résultats numériques s'écartent de la prédiction (V.33) pour tendre vers 1 quand  $\beta = 0$ . Heureusement le comportement de  $\kappa_e$  est alors correctement prédit par la formule de Kubo qui est valable pour les hautes

températures. Ainsi, il y a une bifurcation entre nos deux solutions analytiques, et nous sommes ainsi capables de prédire la valeur de  $\kappa_e$  sur toute la gamme des températures du régime de diffusion normale. Pour savoir si la transition reste toujours présente au delà du régime adia-

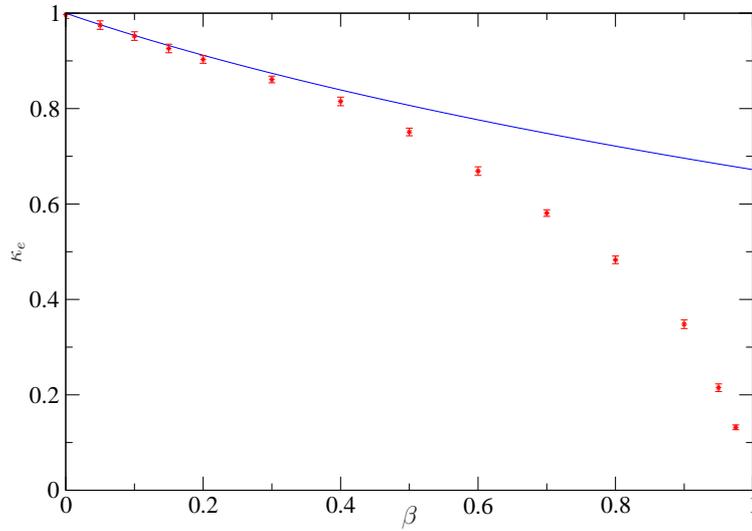


FIG. V.3 – Résultats numériques de la constante de diffusion  $\kappa_e$  (étoiles rouges), comparés au développement perturbatif à haute température donné par la formule (V.26) (en bleu), pour  $\kappa_p = 1$ .

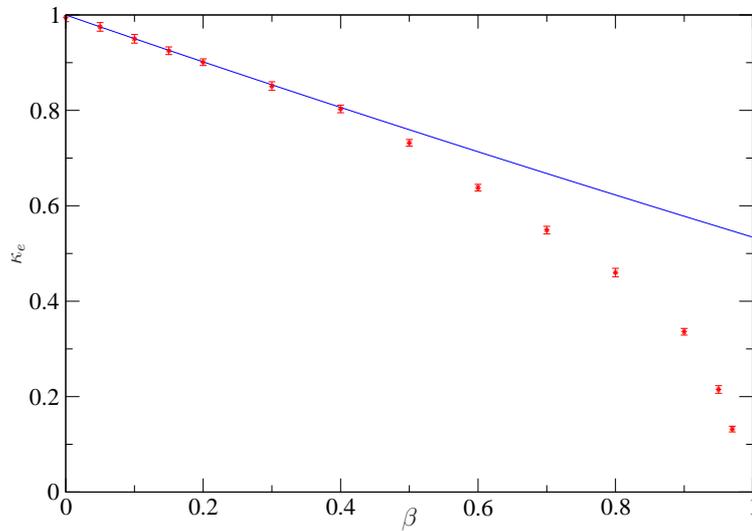


FIG. V.4 – Résultats numériques de la constante de diffusion  $\kappa_e$  (étoiles rouges), comparés au développement perturbatif à haute température donné par la formule (V.26) (en bleu), pour  $\kappa_p = 0.1$ .

batique quand par exemple,  $\kappa_p$  est de l'ordre de  $\kappa_x$ , ou même plus petit, nous pouvons utiliser les simulations. En effet, nous avons montré que pour  $\kappa_p = 10$ , les simulations sont capables de mettre en évidence la transition, et en utilisant cette nouvelle méthode pour générer le champ, il n'y a plus d'effet de taille finie. Nous représentons alors le résultat des simulations pour  $\kappa_p = 1$

sur la figure V.3 et  $\kappa_p = 0.1$  sur la figure V.4, que nous comparons avec le résultat (V.26) pour un faible désordre. Dans les deux cas, la transition semble toujours présente à la même (en tout cas très proche) température critique  $T_C = 1$ . Les simulations numériques tendent ainsi à prouver que dans ce système, à une dimension, quelle que soit la valeur des paramètres  $\kappa_x$  et  $\kappa_p$ , et donc quelle que soient les échelles de temps respectives, il va exister une transition dynamique à  $T_C = 1$ , en dessous de laquelle le comportement diffusif du centre de masse des dipôles va devenir anormal. De plus, dans les deux cas, à haute température nous obtenons un bon accord avec la formule de Kubo et, il semble que la constante de diffusion décroisse monotonement avec  $\kappa_p$ .

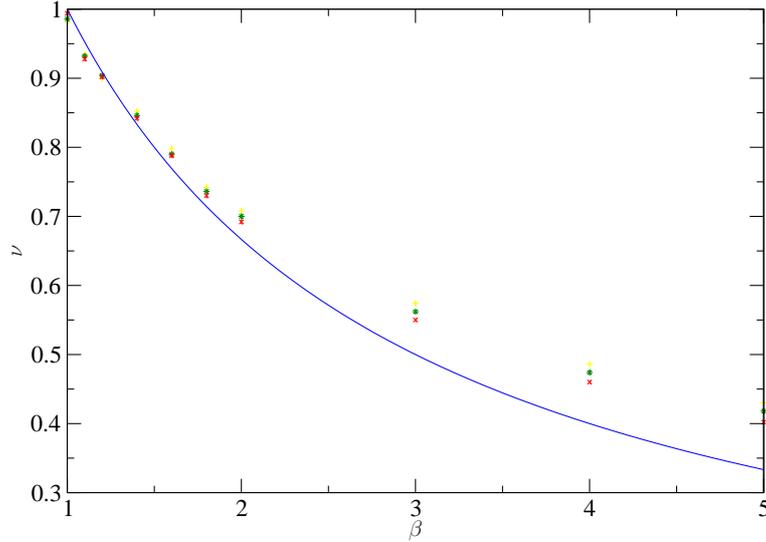


FIG. V.5 – Valeur numérique de l'exposant anormal  $\nu$  (croix rouges) pour  $\kappa_p = 10$ , (étoiles vertes) pour  $\kappa_p = 1$  et (signes plus jaunes) pour  $\kappa_p = 0.1$ , comparé à la prédiction analytique (III.46) (en bleu) pour la phase basse température dans un potentiel Gaussien au carré.

Comme nous l'avons vu, la phase basse température va alors être décrite par un comportement sous-diffusif pour lequel

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle \sim Ct^\nu, \quad (\text{V.41})$$

où l'exposant associé à la diffusion anormale est strictement inférieur à 1. Dans la limite stricte  $\kappa_p \rightarrow \infty$ , nous avons pu établir dans le chapitre 3, à l'aide d'un calcul de temps de premier passage et de la théorie des répliques, la forme (III.46) pour l'exposant  $\nu$  que nous reportons ici :

$$\nu = \frac{2}{1 + \beta}. \quad (\text{V.42})$$

Comme nous avons établi (au moins numériquement) la présence de la transition, quelle que soit la valeur de  $\kappa_p$ , il peut être intéressant de simuler le système dans la phase anormale, pour en connaître le comportement. C'est ce que nous avons fait pour les valeurs précédentes de  $\kappa_p$ , et nous reportons les résultats sur la figure V.5, en comparaison avec la forme analytique (III.46). Ainsi, pour des températures inférieures, mais proches de la température de transition, les résultats sont en plutôt bon accord avec (III.46). Cependant, à plus basse température, l'exposant mesuré est clairement plus grand que celui prédit par (III.46). Nous avons alors

vérifié qu'en augmentant le temps des simulations, la valeur mesurée de l'exposant décroît vers la valeur prédite par (III.46). Tout se passe comme dans le chapitre 3, il est cependant difficile ici d'implémenter un modèle de piège comme nous l'avons fait pour améliorer ce résultat.

## 5 conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous avons vu que l'on peut exprimer le problème du dipôle diffusant dans un champ électrique aléatoire grâce à deux équations de Langevin couplées. Dans la limite dite adiabatique, où le temps de relaxation des degrés de liberté associés aux dipôles devient nul, nous retrouvons alors exactement, avec ce modèle, le problème traité dans le chapitre 3. Pour aller plus loin, nous avons montré que, quand ce temps de relaxation est petit devant la dynamique du centre de masse, mais reste fini, nous pouvons réduire le problème à une équation de Langevin effective pour le processus  $\mathbf{x}$ . Nous avons alors pu calculer exactement en dimension une, la constante de diffusion qui lui est associée et montrer ainsi que la transition persiste, à la même température critique  $T_c$ . La mise en place de cette équation effective n'étant plus valide à haute température, nous avons donc développé une formule de Kubo pour calculer la constante de diffusion dans la limite de faible désordre. En simulant alors directement le système d'équations stochastiques couplées en une dimension, nous avons pu valider nos prédictions analytiques dans le régime adiabatique, en nous assurant ainsi que la transition était bien présente. De plus, nous avons pu explorer numériquement le problème pour des temps de relaxation du dipôle du même ordre de grandeur que la dynamique, et même plus grand, et nous avons pu mettre en évidence que la transition était encore présente, à la même température critique  $T_c$ . Enfin, dans l'esprit des résultats présentés dans le chapitre 3, nous avons simulé le système dans la phase basse température où la diffusion devient anormale. Les résultats, quelle que soit la valeur de  $\kappa_p$ , sont alors en bon accord avec le calcul de temps de premier passage pour l'exposant  $\nu$ .

\* \*  
\*



# Conclusion

*Don't ask me nothin' about nothin'. I just might tell you the truth.*

**Bob Dylan**

Tout au long de ce manuscrit, nous avons essayé de présenter, simplement, les problématiques liées à la transition vitreuse. La difficulté associée à la compréhension théorique de tous les phénomènes qui l'accompagnent est alors illustrée par la profusion de modèles disponibles. Chacun ayant ses mérites et ses revers. Nous avons alors brièvement présenté quelques unes de ces approches pour ensuite nous concentrer sur ce qui a été le cœur de cette thèse.

Nous avons ainsi présenté en détail, dans le deuxième chapitre, les milieux aléatoires, mais aussi le modèle de piège, qui constituent deux paradigmes intéressants pour la transition vitreuse. Dans le premier, la complexité des interactions collectives permet de modéliser le système via des interactions aléatoires, distribuées suivant une loi quelconque. Ainsi, dans certaines situations, cette analogie devient même exacte et le système peut alors se comporter comme un système vitreux. Nous avons donc détaillé deux modèles, (PA) et (DA), pour les milieux désordonnés, qui sont reliés entre eux par leur constante de diffusion respective. Le deuxième paradigme correspond quant à lui, au modèle phénoménologique de piège. Dans ce cas, nous avons vu que les particules vont être piégées dans des zones de l'espace et ne vont pouvoir diffuser que par activation thermique. La distribution des temps de piégeage va alors définir toute la physique du problème et va dépendre des mécanismes microscopiques qui sous-tendent l'apparition des pièges. Dans certaines conditions, le système va subir une transition dynamique, analogue à la transition vitreuse.

En se basant sur le problème de dipôle diffusant dans un champ électrique aléatoire, nous avons dérivé, dans la limite adiabatique où le dipôle s'adapte instantanément aux variations locales du champ, un modèle (PA) effectif où la statistique du potentiel  $V$  est donnée par un champ Gaussien au carré. Nous avons alors montré que ce modèle possédait une transition dynamique, entre un régime diffusif et un régime sous diffusif, pour une température critique  $T_C = 1$ , en dimension une. Numériquement, la transition disparaît à cause d'effets de tailles finies dus au fait que le potentiel que nous générons n'est pas tout à fait Gaussien. Par des calculs analytiques, nous avons alors pu quantifier exactement ces effets et montrer qu'à très basse température la constante de diffusion ne va pas s'annuler mais suivre une loi d'Arrhénius. Cependant, dans la phase basse température nous avons pu extraire le comportement sous diffusif numériquement. Pour cela nous avons utilisé une analogie avec le modèle de pièges dans lequel ce sont les minima du potentiel qui vont jouer le rôle des pièges. Les résultats obtenus

sont alors en très bon accord avec le calcul de l'exposant anormal mené à bien grâce à la théorie des répliques.

En utilisant des méthodes perturbatives comme le groupe de renormalisation auto-similaire, nous avons alors pu généraliser nos résultats à  $D$  dimensions et montrer que la transition est toujours présente, à la même température critique. Nous avons d'ailleurs retrouvé à basse température, une loi de VFT pour la constante de diffusion que nous pouvons relier à la viscosité du système. Enfin, en utilisant ces méthodes, nous avons pu mettre en évidence, pour un système où le désordre n'est pas directement présent, une loi reliant la constante de diffusion, quantité dynamique, à l'excès d'entropie, quantité statique, dans le même esprit que la relation de Adam Gibbs.

En revenant enfin au problème du dipôle, nous avons montré que l'on peut écrire une équation stochastique effective pour le processus  $\mathbf{x}$ , à l'ordre  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ . Alors, nous avons calculé la constante de diffusion associée à ce processus en dimension une, pour montrer que la transition était toujours présente à la même température critique. Nous avons aussi, à haute température, dérivé une formule de Kubo pour la constante de diffusion ce qui nous a permis de prédire sa valeur sur toute la gamme de température. La transition semble robuste, et numériquement, nous avons mis en évidence qu'elle subsistait bien au delà du régime adiabatique.

Comme toujours en physique, en répondant aux questions que nous nous posions au début de cette thèse, nous en avons soulevé de nouvelles. Il serait par exemple intéressant de savoir si on pourrait adapter les techniques de groupe de renormalisation présentées au chapitre 3 pour calculer la constante de diffusion de l'équation stochastique effective du processus  $\mathbf{x}$  pour le modèle de dipôle en dimension quelconque, pour savoir si la transition survit. En simplifiant les équations de façon astucieuse, il est aussi peut-être possible de prédire, au delà du régime adiabatique, le comportement de la constante de diffusion pour vérifier les prédictions numériques. De plus, la formule (IV.72) que nous avons établie au chapitre 4 nécessite des simulations de dynamique moléculaire pour vérifier sa validité. Enfin, la richesse de la dynamique engendrée par le potentiel Gaussien au carré, nous pousse alors à vouloir en transposer les mécanismes à d'autres problèmes comme les verres de spins.

\* \*  
\*

## Dérivation de l'équation de Langevin effective pour $\mathbf{x}$

Dans cette annexe, nous allons réaliser le calcul de l'équation de Langevin effective au temps long, pour le processus  $\mathbf{x}$ , présenté dans le dernier chapitre. Pour cela, le premier pas, est d'intégrer formellement l'équation (V.4) pour la variable  $\mathbf{p}$ . On obtient alors

$$p_i(t) = p_i(0) \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p t}{\chi}\right) + \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \kappa_p \beta E_i(\mathbf{x}(s)) + \sqrt{\frac{2}{\kappa_p} \frac{\chi}{\beta}} \zeta_i(t), \quad (\text{A.1})$$

où

$$\zeta_i(t) = \frac{\kappa_p \beta}{\chi} \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \eta_{p_i}(s), \quad (\text{A.2})$$

est un bruit Gaussien coloré. Aux temps longs, le premier terme dans l'équation (A.1) s'annule exponentiellement, nous pouvons donc le supprimer. Aux temps longs,  $\mathbf{p}$  n'est plus sensible aux conditions initiales et (A.1) devient

$$p_i(t) = \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \kappa_p \beta E_i(\mathbf{x}(s)) + \sqrt{\frac{2}{\kappa_p} \frac{\chi}{\beta}} \zeta_i(t). \quad (\text{A.3})$$

Si on réinjecte maintenant (A.3) dans (V.3), il vient

$$\frac{dx_i}{dt} = \beta \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \left[ \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \kappa_p \beta E_j(\mathbf{x}(s)) + \sqrt{\frac{2}{\kappa_p} \frac{\chi}{\beta}} \zeta_j(t) \right] + \sqrt{2\kappa_x} \eta_{x_i}. \quad (\text{A.4})$$

Pour pousser le calcul plus loin, il nous faut changer de représentation et trouver l'équation de Fokker-Planck effective correspondant à l'équation stochastique (A.4). Pour cela, nous suivons la procédure standard d'évaluation du changement temporel d'une fonction arbitraire  $f$  de  $\mathbf{x}(t)$  :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \int d\mathbf{x} \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} f(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x} H \rho(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}) \\ &= \int d\mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t) H^\dagger f(\mathbf{x}) = \langle H^\dagger f(\mathbf{x}(t)) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

où  $\rho(\mathbf{x}, t)$  est la densité de probabilité pour le processus  $\mathbf{x}$  au temps  $t$ . Dans cette équation,  $H$  est l'opérateur de Fokker-Planck classique que nous avons rencontré tout au long de ce manuscrit. Cependant, pour ce calcul, il est plus pratique de travailler avec son opérateur adjoint  $H^\dagger$ . Cet opérateur est alors communément appelé l'opérateur de Fokker-Planck de retour. Si nous utilisons maintenant la convention de Stratanovich (pour laquelle le calcul différentiel normal s'applique (II.11)), présentée dans le chapitre 2, pour le bruit blanc, dans le calcul stochastique, nous trouvons

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} f(\mathbf{x}(t)) \frac{dx_i(t)}{dt} \right\rangle \\ &= T_1 + T_2 + T_3. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Dans cette équation, le premier terme est alors donné par

$$T_1 = \sqrt{2\kappa_x} \langle \nabla_i f(\mathbf{x}(t)) \eta_{x_i} \rangle, \quad (\text{A.7})$$

Si nous utilisons maintenant le théorème de Novikov [119], pour un bruit Gaussien et dans la convention de Stratanovich, (A.7) s'écrit

$$T_1 = \sqrt{2\kappa_x} \left\langle \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \int_0^t ds \frac{\delta x_j(t)}{\delta \eta_{x_i}(s)} \langle \eta_{x_i}(s) \eta_{x_i}(t) \rangle \right\rangle. \quad (\text{A.8})$$

Cependant,  $\boldsymbol{\eta}$  est ici un bruit blanc, et sa fonction de corrélation est donnée par l'équation (II.6). Si nous reportons ce résultat dans (A.8), et que nous travaillons avec une fonction de delta de Dirac symétrisée, correspondant à la convention de Stratanovich, l'intégrale dans (A.8) donne la moitié du poids de la fonction de delta et nous obtenons

$$T_1 = \sqrt{\frac{\kappa_x}{2}} \left\langle \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\delta x_j(t)}{\delta \eta_{x_i}(s)} \Big|_{s=t} \right\rangle. \quad (\text{A.9})$$

La dérivée fonctionnelle requise dans ce calcul peut alors être évaluée en utilisant un formalisme d'intégrale de chemin [116]. Cependant, le même résultat peut être retrouvé en manipulant l'équation stochastique directement. Pour cela nous allons considérer l'équation différentielle stochastique générale de la forme

$$\frac{dx_i}{dt} = W_i + B_{ij} \xi_j. \quad (\text{A.10})$$

Pour calculer la dérivée fonctionnelle  $\frac{\delta x_i(t)}{\delta \xi_j(s)}$ , nous définissons, pour une nouvelle variable  $\mathbf{x}^\epsilon(t)$ , le processus

$$\frac{dx_i^\epsilon}{dt} = W_i + B_{ij} (\xi_j + \epsilon_j \delta(t-s)). \quad (\text{A.11})$$

En appliquant maintenant, la définition standard de l'intégration fonctionnelle, nous trouvons

$$\frac{\delta x_i(t)}{\delta \xi_j(s)} = \frac{\partial x_i^\epsilon(t)}{\partial \epsilon_j} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (\text{A.12})$$

Nous pouvons également intégrer (A.12) sur un intervalle infinitésimal autour de  $t = s$ . Nous obtenons alors

$$x^\epsilon(t^+) = x(t^-) + B_{ij} \epsilon_j, \quad (\text{A.13})$$

tant que les  $W_i$  ne dépendent pas des dérivées de  $\mathbf{x}$ . Dans le cas traité ici, les  $W_i$  sont clairement continus en  $s = t$  et ils ne vont donc pas contribuer dans la dérivée fonctionnelle. Nous pouvons alors combiner les résultats (A.12) et (A.13) pour trouver

$$\left. \frac{\delta x_i(t)}{\delta \xi_j(s)} \right|_{s=t} = B_{ij}, \quad (\text{A.14})$$

ce qui donne, appliqué à ce problème

$$\left. \frac{\delta x_j(t)}{\delta \eta_{x_i}(s)} \right|_{s=t} = \sqrt{2\kappa_x} \delta_{ij}. \quad (\text{A.15})$$

En substituant finalement ce résultat dans (A.9), nous obtenons pour  $T_1$

$$T_1 = \kappa_x \left\langle \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} f(\mathbf{x}(t)) \right\rangle. \quad (\text{A.16})$$

Nous retrouvons ainsi la forme Laplacienne standard qui apparaît pour un bruit blanc. Si nous revenons à l'équation (A.6), le second terme  $T_2$  va alors être donné par

$$T_2 = \sqrt{2\kappa_x} \chi \sqrt{\frac{\kappa_x}{\kappa_p}} \left\langle \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \zeta_j(t) \right\rangle. \quad (\text{A.17})$$

Comme pour  $T_1$ , nous pouvons appliquer le théorème de Novikov pour trouver

$$T_2 = \sqrt{2\kappa_x} \chi \sqrt{\frac{\kappa_x}{\kappa_p}} \left\langle \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \int_0^t ds \frac{\delta x_k(t)}{\delta \zeta_l(s)} \langle \zeta_j(t) \zeta_l(s) \rangle \right\rangle. \quad (\text{A.18})$$

Dans ce cas, le bruit Gaussien  $\zeta$  n'est plus un bruit blanc, et sa fonction de corrélation est plus complexe. Cependant, pour  $t > s$ , nous pouvons la calculer à partir de l'équation (A.2), et nous obtenons

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(s) \rangle = \alpha^2 \int_0^s du \exp(-\alpha(t + s - 2u)), \quad (\text{A.19})$$

où  $\alpha = \kappa_p \beta / \chi$ . Ainsi, au temps long ( $s$  et  $t$  grands), l'intégrale va simplement s'écrire

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(s) \rangle = \frac{\alpha \delta_{ij}}{2} \exp(-\alpha(t - s)). \quad (\text{A.20})$$

nous considérons maintenant que cette fonction de corrélation va agir comme un opérateur sur une fonction arbitraire  $g(s)$ . Comme  $\alpha$  est proportionnel à  $\kappa_p$ , dans la limite dite adiabatique,  $\alpha$  va devenir très grand. On peut donc évaluer l'action de (A.20) sur  $g(s)$  via le développement en  $\alpha^{-1}$  suivant

$$\int_0^t ds \exp(-\alpha s) g(t - s) = \frac{1}{\alpha} \left[ g(t) - \frac{1}{\alpha} \frac{d}{dt} g(t) + O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) \right]. \quad (\text{A.21})$$

Ainsi, au premier ordre en  $\alpha^{-1}$ , nous pouvons ré-écrire  $T_2$ , et nous trouvons

$$T_2 = \sqrt{2\kappa_x} \chi \sqrt{\frac{\kappa_x}{\kappa_p}} \left\langle \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \frac{\delta x_k(t)}{\delta \zeta_j(s)} \Big|_{t=s} \right\rangle. \quad (\text{A.22})$$

## ANNEXE A. DÉRIVATION DE L'ÉQUATION DE LANGEVIN EFFECTIVE

Enfin, si nous répétons l'argument qui nous a permis d'obtenir l'équation (A.15), nous obtenons dans ce cas

$$\left. \frac{\delta x_k(t)}{\delta \zeta_j(s)} \right|_{t=s} = \sqrt{\frac{2}{\kappa_p}} \chi^{\kappa_x} \frac{\partial E_j}{\partial x_k}, \quad (\text{A.23})$$

et donc finalement pour  $T_2$  :

$$T_2 = \kappa_x \chi^2 \left( \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \right) \left\langle \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \right\rangle. \quad (\text{A.24})$$

Il apparaît alors clairement qu'au premier ordre en  $\alpha^{-1}$ ,  $\zeta$  devient un simple bruit blanc, interprété via la convention de Stratanovich. Il nous reste alors à calculer le dernier terme de (A.6) et  $T_3$  va s'écrire

$$T_3 = \beta^2 \kappa_x \kappa_p \left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \frac{\partial E_j(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \int_0^t ds \exp(-\alpha(t-s)) E_j(\mathbf{x}(s)) \right\rangle. \quad (\text{A.25})$$

Pour calculer  $T_3$ , il faut alors être capable d'évaluer des termes de la forme

$$I = \left\langle A(\mathbf{x}(t)) \int_0^t ds \exp(-\alpha(t-s)) B(\mathbf{x}(s)) \right\rangle, \quad (\text{A.26})$$

tout en gardant à l'esprit que  $\alpha$  est grand. Pour cela, nous pouvons ré-écrire  $I$  en terme de la densité de probabilité  $\rho(\mathbf{x}, t)$  et de  $H^\dagger$ , l'opérateur de Fokker-Planck de retour. La moyenne est alors donnée par

$$I = \int d\mathbf{x} \int_0^t ds B(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, s) \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) A(\mathbf{x}). \quad (\text{A.27})$$

Où la densité  $\rho$  obéit à l'équation de Fokker-Planck suivante

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = H \rho. \quad (\text{A.28})$$

Dans cette formulation,  $\mathbf{x}$  ne dépend plus explicitement du temps et l'intégrale sur  $s$  peut alors être calculée par intégration par partie. Nous obtenons alors

$$\begin{aligned} & \int_0^t ds \rho(\mathbf{x}, s) \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) = \rho(\mathbf{x}, t) [1 - \exp(-t(\alpha - H^\dagger))] (\alpha - H^\dagger)^{-1} \\ & - \int_0^\infty ds \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, s)}{\partial s} \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) (\alpha - H^\dagger)^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Comme les valeurs propres de  $H$  (et donc de  $H^\dagger$ ) doivent être négatives ou nulles, le second membre dans le terme entre crochet va s'annuler. Si nous appliquons maintenant une deuxième intégration par partie, nous trouvons finalement

$$\int_0^t ds \rho(\mathbf{x}, s) \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) = \rho(\mathbf{x}, t) (\alpha - H^\dagger)^{-1} - [H \rho(\mathbf{x}, t)] (\alpha - H^\dagger)^{-2}, \quad (\text{A.30})$$

nous avons ici utilisé l'équation (A.28) dans le second membre du terme de droite. Ainsi, l'opérateur  $H$  ne va agir que sur  $\rho$  et, tous les autres opérateurs, vont agir sur la droite. En

se rappelant que dans l'approximation adiabatique,  $\alpha$  est grand, on peut alors développer  $I$  en puissance de  $\alpha^{-1}$ , et nous obtenons

$$I = \int d\mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t) \left[ \frac{A(\mathbf{x})B(\mathbf{x})}{\alpha} + B(\mathbf{x}) \frac{H^\dagger}{\alpha^2} A(\mathbf{x}) - \frac{H^\dagger}{\alpha^2} A(\mathbf{x})B(\mathbf{x}) \right]. \quad (\text{A.31})$$

Si nous appliquons maintenant ce résultat pour le calcul de  $T_3$ , nous trouvons finalement

$$T_3 = \kappa_x \beta \chi \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j + \frac{\chi}{\kappa_p \beta} E_j H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - \frac{\chi}{\kappa_p \beta} H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle. \quad (\text{A.32})$$

En associant maintenant les trois résultats donnés par les équations (A.16), (A.24) et (A.32), nous pouvons finalement évaluer l'équation (A.5), ce qui donne

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \kappa_x \left\langle \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} f(\mathbf{x}(t)) \right\rangle \\ &+ \kappa_x \left( \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \right) \chi^2 \left\langle \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \right\rangle \\ &+ \kappa_x \beta \chi \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j + \frac{\chi}{\kappa_p \beta} E_j H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - \frac{\chi}{\kappa_p \beta} H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Ce qui peut se ré-écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \left\langle H_0^\dagger f(\mathbf{x}(t)) \right\rangle \\ &+ \chi^2 \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \left[ \left\langle \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) + E_j H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle \right] + O \left( \left( \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

où l'opérateur  $H_0^\dagger$  va être donné par la formule

$$H_0^\dagger f = \kappa_x \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_i} + \beta \chi \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right]. \quad (\text{A.35})$$

Il est clair que dans la limite stricte où  $\kappa_p \rightarrow \infty$ , le seul terme qui survit est  $H_0^\dagger$  donné par l'équation (A.35) qui correspond alors exactement à l'équation de Langevin pour une particule diffusant dans un potentiel effectif décrit par l'équation (II.8). Si nous gardons maintenant les termes de l'ordre  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ , nous pouvons ré-écrire (A.34) comme

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \left\langle H_0^\dagger f(\mathbf{x}(t)) \right\rangle \\ &+ \chi^2 \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \left[ \left\langle \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) + E_j H_0^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - H_0^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle \right] \\ &= \left\langle H_0^\dagger f(\mathbf{x}(t)) \right\rangle - \kappa_x \frac{\kappa_x \chi^2}{\kappa_p} \left\langle \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) + \beta \chi \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} E_l \frac{\partial E_l}{\partial x_k} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

## ANNEXE A. DÉRIVATION DE L'ÉQUATION DE LANGEVIN EFFECTIVE

---

Finalemment, dans la limite adiabatique, le système d'équation différentielle (V.3) et (V.4) peut se réduire, à l'ordre  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ , à une équation de Langevin effective pour le processus  $\mathbf{x}$  équivalente à l'équation de Fokker-Planck suivante

$$\left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \kappa_{ki} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) - \beta \kappa_{ki} \frac{\partial V}{\partial x_k} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right\rangle, \quad (\text{A.37})$$

où  $V$  est le potentiel rencontré dans l'approximation adiabatique (V.1), et  $\kappa_{ij}$  est un tenseur de diffusivité, spatialement variable et anisotropique décrit par l'équation

$$\kappa_{ij} = \kappa_x \left[ \delta_{ij} - \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \chi^2 \frac{\partial E_k}{\partial x_i} \frac{\partial E_k}{\partial x_j} \right]. \quad (\text{A.38})$$

\* \*  
\*

**Dynamical transition for a particle in a squared Gaussian potential**

J. Phys. A : Math. Theor. **40**, 919 (2007).

# Dynamical transition for a particle in a squared Gaussian potential

C Touya and D S Dean

Laboratoire de Physique Théorique, CNRS UMR 5152, IRSAMC, Université Paul Sabatier,  
118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 04, France

Received 17 October 2006, in final form 11 December 2006

Published 17 January 2007

Online at [stacks.iop.org/JPhysA/40/919](http://stacks.iop.org/JPhysA/40/919)

## Abstract

We study the problem of a Brownian particle diffusing in finite dimensions in a potential given by  $\psi = \phi^2/2$  where  $\phi$  is Gaussian random field. Exact results for the diffusion constant in the high temperature phase are given in one and two dimensions and it is shown to vanish in a power-law fashion at the dynamical transition temperature. Our results are confronted with numerical simulations where the Gaussian field is constructed, in a standard way, as a sum over random Fourier modes. We show that when the number of Fourier modes is finite the low temperature diffusion constant becomes non-zero and has an Arrhenius form. Thus we have a simple model with a fully understood finite size scaling theory for the dynamical transition. In addition we analyse the nature of the anomalous diffusion in the low temperature regime and show that the anomalous exponent agrees with that predicted by a trap model.

PACS numbers: 05.20.-y, 66.10.Cb, 66.30.Xj

## 1. Introduction

Systems with quenched disorder are often taken as paradigms for systems exhibiting a structural glass transition. The basic physical idea is that for a sufficiently complex and frustrated system without quenched disorder, a single particle sees an effectively quenched and random potential due to the other particles. At a mean field level there exist models where, to all intents and purposes, this analogy becomes exact. One can have two models one with quenched disorder and the other without, but highly frustrated, which exhibit the same thermodynamics in the high temperature phase and the same glass transition at low temperatures [1]. Even if the frustrated non-random system possesses a crystalline ground state not shared by the disordered system, this fact is practically irrelevant as this state is dynamically never attained. An analogy between mean field spin glass models with one step replica symmetry breaking and structural glasses has been put forward [2, 3], and this theory of the glass transition has become known as the random first-order scenario. Further extensions of the analogy between the dynamics of these

mean field spin glasses and finite-dimensional glass formers have provided much insight into glassy dynamics and related phenomena such as ageing and effective temperatures [3]. One of the simplest models, which has been extensively studied, is the so-called toy model. Here one takes a particle in a  $D$ -dimensional space with Hamiltonian

$$H(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\mu\mathbf{x}^2, \quad (1)$$

where  $\psi$  is a quenched random potential taken from some statistical ensemble. The most convenient choice is to take  $\psi$  to be Gaussian of zero mean with the correlation function

$$\langle \psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{y}) \rangle = \Delta(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|), \quad (2)$$

so the field is statistically isotropic and invariant by translation in space. The statics of this model can be solved in the Gaussian variational approximation in finite dimensions [4]. This approximation becomes exact in the limit of the number of spatial dimensions  $D$  going to infinity if  $\Delta$  scales as

$$\Delta(x) = DF \left( \frac{x^2}{D} \right). \quad (3)$$

In this limit when the correlation function of  $F$  is short ranged a structural glass transition is found [4, 5]. First, at a temperature  $T_d$  there is a dynamical transition, which is independent of the precise nature of the dynamics as long as it is local. This dynamical transition appears due to the appearance of an exponentially large number of metastable states and it can be located via static arguments, thus explaining its independence of the precise form of the local dynamics [5]. This transition is not accompanied by a strict thermodynamic transition. The thermodynamic transition appears at a lower temperature  $T_s$  where the entropy of the system becomes very small. In the free case, where the harmonic confining potential is removed (the case  $\mu = 0$ ), a dynamical transition occurs at a non-zero temperature, but the static transition occurs only at  $T = 0$ . The existence of the dynamical transition in the free case shows up as a transition between a stationary dynamics characterized by the time translational invariance of the correlation function and a form (for unbounded systems) of the fluctuation dissipation theorem [5] and a low temperature ageing regime exhibiting ageing in the correlation function and modified fluctuation dissipation relations [5]. In addition at high temperature the late time behaviour of a Brownian tracer particle in the force field generated by the potential is normal and is characterized by a non-zero diffusion constant which vanishes at  $T_d$  [6]. A little thought convinces one that this is not possible in finite dimensions and that there is thus something pathological about the large  $D$  limit as is taken in this model. When the correlation length of the random field is finite (the case where the correlation function of the field is infinite is another matter and anomalous diffusion is clearly possible in this case) one can view the system on a coarse-grained scale at the order of a few tens of this correlation length. We denote this length scale by  $l_*$ . The process can now be viewed as a discrete random walk between neighbouring regions with an exponentially distributed time to jump to a neighbouring region whose average is given by the Arrhenius law as  $\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{T}\right)$ . Here  $\Delta E$  is the energy barrier associated with moving from one region to another. When the average value of  $\tau$ ,  $\bar{\tau}$ , is finite the system will look like a random walk in the coarse-grained picture and we find that

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim \frac{l_*^2}{\bar{\tau}} t, \quad (4)$$

showing that we should have a finite diffusion constant. When  $\psi$  is Gaussian we expect that the energy barriers  $\Delta E$  are also Gaussian and thus obtain a value of  $\bar{\tau}$  which behaves as

$$\bar{\tau} = \tau_0 \exp\left(\frac{A}{T^2}\right), \quad (5)$$

which is referred to as a super-Arrhenius behaviour. The dynamical transition is however clearly relegated to zero temperature. This argument is backed up by numerical simulations, perturbative and renormalization group calculations [6, 7]. In a finite system we will always have finite energy barriers and they will always be overcome by activated barrier hopping, albeit after very long but finite times. Mean field models have diverging energy barriers and it is this divergence which leads to the dynamical transition. Indeed the formula equation (5) should ultimately become Arrhenius-like for systems where the energy barrier are bounded and we will discuss this point in the next section on exact results.

A commonly used paradigm for glassy systems is the trap model [8] where the phase space is considered to be made up of a set of traps denoted by  $i$  each of depth  $\Delta E_i$ . The simplest version is that where the traps are on a tree-like geometry, as is the case in the random energy model [8]. The generalized random energy model has traps within traps and is inspired by the Parisi solution for mean field spin glasses where the states (corresponding to the bottom of traps) are organized in with an ultra-metric structure [9]. The time spent in a trap is exponentially distributed with mean time  $\tau_i = \tau_0 \exp(\beta \Delta E_i)$  and the distribution of the  $\Delta E_i$  induces the distribution of the  $\tau_i$ . When the disorder averaged value of  $\tau_i = \bar{\tau}$  diverges a dynamical transition occurs. Forms of the trap model where the traps are located on a finite-dimensional lattice have been extensively studied [10, 11]. Also a non-random microscopic realization, based on number partitioning combinatorics, of the trap model has been found [12]. Trap models have also recently been applied to model the behaviour of more realistic off-lattice supercooled liquids [13]. Intuitively we expect the trap model picture to be applicable to the problem of a particle diffusing in a short-range-correlated random potential at sufficiently large time and length scales. In this paper we show that for the model we study this is indeed the case.

Going back to the problem of diffusion in a random potential, we consider a model where  $\psi = \phi^2/2$ , where  $\phi$  is Gaussian. Clearly from the arguments above we do expect to see a dynamical/glass transition. We assume that the potential energy barriers also behave as the energy itself, we thus assume that the statistics of the barrier heights behaves as  $\alpha\phi^2/2$ , where  $\alpha$  is some positive constant. Therefore the average time spent in a trap will behave as

$$\tau \sim \tau_0 \exp\left(\frac{\beta\alpha\phi^2}{2}\right). \quad (6)$$

If we take a Gaussian field  $\phi$  with the correlation function

$$\langle\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{y})\rangle = \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (7)$$

with  $\Delta(0) = 1$ , then  $\bar{\tau}$  diverges for  $\beta\alpha > 1$ , giving a dynamical transition temperature  $T_g = \alpha$ . Note that in [14] the problem of a dipole diffusing in a Gaussian electrostatic field  $\psi$  was considered. Here the effective potential felt by the dipole is  $\psi = -\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2$ . The above argument indicates that a dynamical transition, indicated by a vanishing of the diffusion constant, should occur in this model. However in [14] no clear evidence for a phase transition was found in numerical simulations in three dimensions. However standard methods for generating the Gaussian field used here and in [14] use a finite number of Fourier modes. Indeed we will show that, in the case studied here where exact results are possible, there is a finite size scaling in the number of modes  $N$ . This finite size scaling smears out the dynamical transition, just as is the case in the standard theory of equilibrium second-order phase transitions.

The Langevin dynamics we shall study of a particle in a potential  $\psi$  is given by

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \eta(t) - \beta\nabla\psi(\mathbf{X}_t), \quad (8)$$

where  $\eta(t)$  is Gaussian white noise with the correlation function

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (9)$$

This choice of white noise amplitude ensures that the stationary measure is the Gibbs–Boltzmann equilibrium one. The diffusion constant, when it exists, of the system is defined by the late time behaviour of the mean-squared displacement as

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim 2D\kappa_e t. \quad (10)$$

Therefore, by using this notation the bare diffusion constant of the particle in the absence of the field  $\psi$  will always be given by  $\kappa_e = \kappa_0 = 1$ .

We will find here that the low temperature phase is characterized by an anomalous sub-diffusive behaviour

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim t^{2\nu}, \quad (11)$$

where the exponent associated with the anomalous diffusion  $\nu < 1/2$ . We then argue that the problem can be mapped onto an effective trap model which allows us to predict the value of  $\nu$ . This prediction, in one dimension, is confirmed by a formal replica calculation applied to a first passage time problem. It is also supported by our numerical results.

## 2. Exact results

The diffusion constant for a particle in a one-dimensional random potential, which is statistically invariant under translation, can be obtained exactly in a number of ways [15, 16]. It is given by

$$\kappa_e = \frac{1}{\langle \exp(\beta\psi) \rangle_d \langle \exp(-\beta\psi) \rangle_d}, \quad (12)$$

where the subscript  $d$  indicates the disorder average over the field  $\psi$  taken at any point. An interesting point about this formula is that the resulting  $\kappa_e$  is independent of the sign of  $\beta$ . In the case where  $\psi = \phi^2/2$  where the one-point distribution function for  $\phi$  is Gaussian and given by

$$p(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\phi^2/2) \quad (13)$$

we have the result

$$\kappa_e = \sqrt{1 - \beta^2} \quad (14)$$

and so at  $\beta_g = 1$  a dynamical transition thus occurs where the diffusion constant becomes zero. This transition is really present, and below this transition temperature the diffusion will become anomalous. Interestingly Hartree–Fock type resummation for diffusion in a random field also predict the vanishing of the diffusion constant as  $|T - T_c|^{1/2}$  [7]. These approximations are based on a summation of rainbow type diagrams and ignore vertex renormalization, thus violating the Einstein relation. As they are based on rainbow-like summations they depend only on the two-point correlation function of the random field; hence they give similar results for both Gaussian and Gaussian-squared fields. It is somewhat remarkable, given that they fail for the ordinary Gaussian case, that they predict the correct critical behaviour of the diffusion constant where it vanishes.

Note that if the energy barrier corresponding to a coarse-grained region is given by  $\frac{\alpha\phi^2}{2}$  with the distribution of  $\phi$  given by equation (13), then the induced distribution on the trapping time  $\tau$  given by equation (6) is

$$\rho(\tau) = \frac{\tau_0^{\frac{1}{\alpha\beta}}}{\tau^{1+\frac{1}{\alpha\beta}} \sqrt{\pi\alpha\beta \ln\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)}}. \tag{15}$$

The above trapping time distribution is almost Levy-like apart from the logarithmic term. Below the critical temperature given by  $\alpha\beta_c = 1$  we see that the mean value diverges, as can be seen directly. The trap model has been extensively studied in finite dimensions in this regime. The precise definition is as follows: the system consists of a series of traps on a finite-dimensional lattice. Associated with each site  $i$  is a trap whose residence time, the time before the next jump is made, is exponential with the quenched mean  $\tau_i$ . If the distribution of  $\tau_i$  are independent and identically distributed with distribution

$$\rho(\tau) \approx A \frac{\tau_0^\mu}{\tau^{\mu+1}}, \tag{16}$$

then we see that  $\bar{\tau}_i$  diverges for  $\mu < 1$ . For  $\mu > 1$  in one dimension we have that

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim Ct, \quad \mu > 1, \tag{17}$$

which is a normal diffusion. In the anomalous phase,  $\mu < 1$ , the mean-squared displacement behaves as [17]

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{X}_t^2 \rangle &\sim Ct^{\frac{2\mu}{\mu+1}}, & D = 1 \\ &\sim Ct^\mu (\ln(t))^{1-\mu}, & D = 2 \\ &\sim Ct^\mu, & D > 2. \end{aligned} \tag{18}$$

From equation (15) we see that up to logarithmic corrections, the model studied here should correspond to a trap model where the exponent of this anomalous diffusion is given by

$$\mu = \frac{1}{\alpha\beta}. \tag{19}$$

The low temperature phase of the model should thus be characterized by anomalous diffusion. In fact, in what follows, we shall see, both from analytic arguments and numerics, that the effective value of  $\alpha$  in all the above is in fact 1. The difficulty of trap models with quenched disorder is that a particle may in general visit a trap several times and thus it is not necessarily a good approximation to draw a new  $\tau_i$  from the quenched distribution each time an already visited site is revisited. This approximation is called the annealed approximation and fails badly in one and two dimensions where the random walk is recurrent [17]. The model corresponding to the annealed approximation is the annealed model where each time the particle visits a site the trapping time is redrawn from the distribution of waiting times (which is site independent). Above the critical value  $\mu_c = 1$  the annealed model in one dimension diffuses as

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim Ct + O(\sqrt{t}), \quad \mu > 2. \tag{20}$$

However, still above  $\mu_c = 1$  but with  $1 < \mu < 2$  we find

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim Ct + O(t^{\frac{1}{\mu}}), \quad 1 < \mu < 2. \tag{21}$$

This change in the exponent of the sub-leading temporal behaviour stems from the fact that the variance of the time spent in a trap  $\bar{\tau}_i^2 - \bar{\tau}_i^2$  diverges, while the mean value remains finite. Thus we see that there are two regimes of normal diffusion, a high temperature one corresponding

to  $\mu > 2$  as given by equation (20) and a low temperature normal phase with  $1 < \mu < 2$  and where the corrections to pure diffusion change from  $O(\sqrt{t})$  to  $O(t^{\frac{1}{\mu}})$ . The key point is the divergence of the variance of the trapping time at a given site and we thus expect a similar transition to occur in the quenched version of the model. For  $\mu < 1$  the annealed model gives

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim Ct^\mu \quad (22)$$

in all dimensions. Thus we see that, in low dimensions, the exponent associated with the anomalous diffusion in the annealed model is not the same as that associated with the quenched model. This is precisely due to the recurrence of random walks in two and less dimensions.

For our later comparison with numerical simulations we will need to compute the correction to normal diffusion in the high temperature limit. As random walks are recurrent in one dimension transient effects are very important, and unless one can predict them the extraction of a diffusion constant from a numerical simulation becomes extremely difficult.

In the high temperature phase we write

$$\langle \mathbf{X}_t^2 \rangle \sim 2\kappa_e t + O(t^\theta). \quad (23)$$

Now if the corresponding trap model is characterized by  $\alpha = 1$  then we have  $\mu = 1/\beta$ . Adapting the scaling argument found in [17] to the finite time corrections we predict that

$$\begin{aligned} \theta &= 3/4 \quad \text{for } \mu > 2 \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\mu} = \frac{\beta + 1}{2} \quad \text{for } 1 \leq \mu \leq 2, \end{aligned} \quad (24)$$

The above results for the exponent  $\theta$  turn out to be in good agreement with our numerical results. This supports both our scaling arguments and the identification of our model with a trap model characterized by the exponent  $\mu = 1/\beta$  (equivalently  $\alpha = 1$ ). The prediction of equation (24) shows that the finite time corrections to diffusion are always important, and as one approaches the transition at  $\beta = 1$  they become of the same order as the normal diffusion term.

Returning to the Langevin problem one may be tempted to argue that the transition seen in one dimension could be rather pathological in that the system is obliged to overcome all energy barriers in one dimension. Unfortunately no general exact results exist in higher dimensions; however in two dimensions if the field  $\psi$  is statistically the same as  $-\psi$  a duality argument can be used [18] (in a rather indirect way) to show that

$$\kappa_e = \frac{1}{\langle \exp(-\beta\psi) \rangle_d}. \quad (25)$$

This clearly allows us to compute  $\kappa_e$  in two dimensions in the case where  $\psi$  is Gaussian. We can however get an exact result for another potential by judiciously choosing a field of the form

$$\psi = \frac{\phi^2}{2} - \frac{\phi'^2}{2}, \quad (26)$$

where  $\phi$  and  $\phi'$  are independent Gaussian fields with the same statistics. Clearly  $\psi \sim -\psi$  in the statistical sense and we thus obtain the exact result

$$\kappa_e = \sqrt{1 - \beta^2}, \quad (27)$$

showing that the same dynamical transition occurs in two dimensions for this particular choice of  $\psi$ .

If one wants to simulate the Langevin process considered here on a computer, without resorting to a lattice model, one may use a standard method to generate a Gaussian random field [19], where one takes

$$\phi = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^N \cos(\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x} + \epsilon), \tag{28}$$

where  $N$  is the number of modes chosen. When, as we assume here,  $\Delta(0) = 1$  one takes each wave vector  $\mathbf{k}_n$  independently from the distribution

$$P(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^D} \int d\mathbf{x} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \Delta(\mathbf{x}). \tag{29}$$

For instance here we will carry out simulations with

$$\Delta(\mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right) \tag{30}$$

and so each component of a vector  $\mathbf{k}_n$  is a Gaussian of mean zero and variance one. In the limit of large  $N$  the field so generated becomes Gaussian but it is interesting to see what the effect of a finite number of modes is from both a theoretical and practical (for comparison with numerical simulations) point of view. We start with the simple Gaussian case where we have

$$\langle \exp(\beta\phi) \rangle_d = \left[ \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\epsilon \exp\left(\beta\sqrt{\frac{2}{N}} \cos(\epsilon)\right) \right]^N = I_0\left(\beta\sqrt{\frac{2}{N}}\right)^N, \tag{31}$$

where  $I_0$  is a modified Bessel function [20]. The function  $I_0$  has the small  $z$  behaviour given by [20]

$$I_0(z) = 1 + \frac{\frac{1}{4}z^2}{(1!)^2} + \frac{\left(\frac{1}{4}z^2\right)^2}{(2!)^2} + O(z^6), \tag{32}$$

and the large  $z$  asymptotic behaviour [20]

$$I_0(z) = \frac{\exp(z)}{\sqrt{2\pi z}} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{z}\right) \right]. \tag{33}$$

From equation (32) we thus find that in the limit  $N \rightarrow \infty$  but keeping  $\beta$  finite we find

$$\kappa_e = \exp(-\beta^2) = \exp\left(-\frac{1}{T^2}\right) \tag{34}$$

in one dimension. We thus obtain the super-Arrhenius law associated with as expected. However at much lower temperatures such that  $\beta \gg N^2$  we use the asymptotic form equation (33) to obtain

$$\kappa_e = \left(\frac{8\pi^2\beta^2}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(-2\beta\sqrt{2N}) \sim \exp\left(-\frac{2\sqrt{2N}}{T}\right) \tag{35}$$

and thus we recover the Arrhenius law at extremely low temperatures. Note that the term  $\Delta E$  in equation (35) is simply the maximal difference in energy possible for the field  $\phi$  expressed as a finite Fourier series as in equation (28).

As stated earlier when  $\psi = \phi$  we have the statistical equivalence necessary to use the result equation (25) and we find the corresponding two-dimensional results

$$\kappa_e = \exp\left(-\frac{\beta^2}{2}\right) = \exp\left(-\frac{1}{2T^2}\right) \tag{36}$$

for  $N \rightarrow \infty$  and  $\beta$  finite, and

$$\kappa_e = \left(\frac{8\pi^2\beta^2}{N}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-\beta\sqrt{2N}) \sim \exp\left(-\frac{\sqrt{2N}}{T}\right), \tag{37}$$

for  $\beta \gg N^2$ . We see again that the Arrhenius law is recovered in this limit, but in contrast with the one-dimensional case, the term  $\Delta E$  in equation (37) is only half of the maximal energy difference between two points. This makes sense as in two dimensions one can go around this maximal energy barrier.

The case of a squared Gaussian potential is treated similarly using

$$\begin{aligned} \langle \exp(\beta\psi) \rangle_d &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \langle \exp(z\sqrt{\beta}\phi) \rangle_d \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) I_0\left(z\sqrt{\frac{2\beta}{N}}\right)^N \\ &= \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp(Nf(u)) \end{aligned} \tag{38}$$

where

$$f(u) = -\frac{u^2}{2} + \ln[I_0(u\sqrt{2\beta})]. \tag{39}$$

The integral in equation (38) can now be treated in the saddle point approximation. From the small  $z$  expansion of  $I_0$  of equation (32) we see that, about  $u = 0$ ,  $f(u)$  takes the form

$$f(u) = -(1 - \beta)\frac{u^2}{2} - \beta^2\frac{u^4}{16} + O(u^6). \tag{40}$$

We therefore see that the dynamical transition occurring at  $\beta = 1$  is mathematically equivalent to a mean field ferromagnetic transition! Note that if  $\beta$  is negative then no transition occurs so the term  $\langle \exp(-\beta\psi) \rangle$  behaves analytically as  $N \rightarrow \infty$ . In the high temperature phase  $\beta < 1$  therefore we have

$$\langle \exp(\beta\psi) \rangle_d = \frac{1}{\sqrt{1-\beta}} \left[ 1 - \frac{3}{N(1-\beta)^2} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right], \tag{41}$$

which gives

$$\kappa_e = \sqrt{1-\beta^2} \left[ 1 + \frac{3\beta^2}{8N} \frac{\beta^2+1}{(1-\beta^2)^2} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right]. \tag{42}$$

When  $\beta > 1$  the saddle point is no longer at  $u = 0$  and the function  $f$  has a maximum value greater than zero at the points  $\pm u_c$  where the maximum is attained. Here we find that

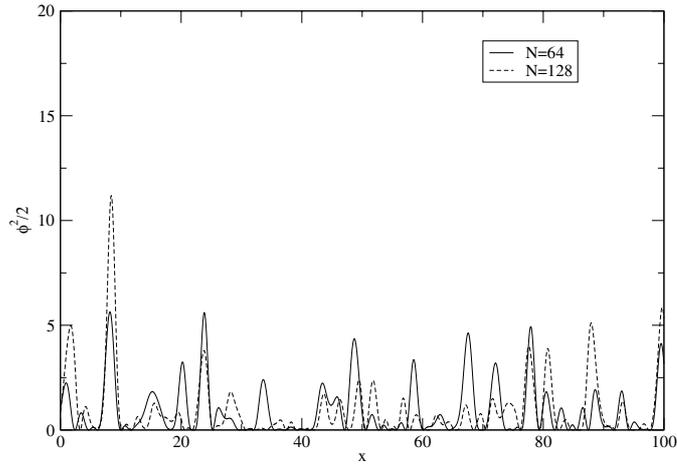
$$\kappa_e = \frac{1}{2} \sqrt{(1+\beta)|f''(u_c)|} \exp(-Nf(u_c)). \tag{43}$$

For  $\beta \sim 1$  we find that  $u_c = 2\sqrt{\beta-1}/\beta$  and consequently

$$\kappa_e = \frac{1}{2} \sqrt{2(\beta^2-1)} \exp\left(-N\frac{(\beta-1)^2}{\beta^2}\right). \tag{44}$$

At low temperatures we can use the asymptotic behaviour in equation (33) to obtain  $u_c \approx \sqrt{2\beta}$  and thus

$$\kappa_e = \frac{1}{2} \sqrt{(1+\beta)} \exp(-\beta N) \sim \exp\left(-\frac{N}{T}\right). \tag{45}$$



**Figure 1.** Two typical realizations of  $\phi^2/2$ , one for  $N = 64$  modes (solid lines) and the other with  $N = 128$  modes (dashed lines).

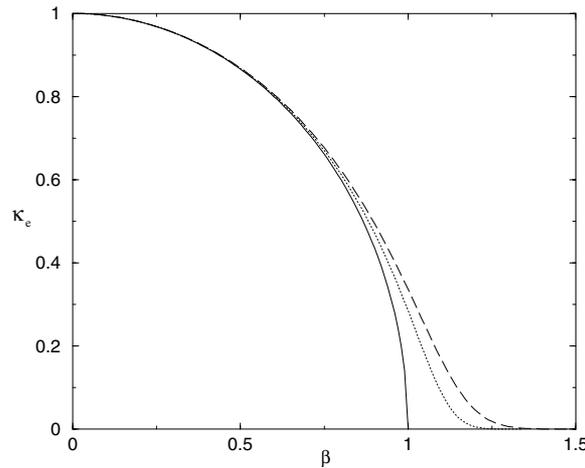
Again note that the last part of the above equation indicates an Arrhenius law corresponding to the maximum difference in energy between two points, the lowest value of  $\psi$  being zero and the maximum being  $N$ . In two dimensions for the symmetric potential of equation (26) we find exactly the same results as for the one-dimensional potential.

To give the reader a feel for what happens when the number of modes is finite we have plotted the  $N = \infty$  result, equation (14), against the corresponding results for  $N = 64$  and  $N = 128$ , often considered to be sufficient for simulation purposes, which are evaluated numerically using the exact equation (38). We see that even for  $N = 128$  that the value of  $\kappa_e(1)$  is still of order 1! Visually the difference between fields with different numbers of modes can also be seen. In figure 1 we show two fields generated in one dimension, one with 64 modes and the other with 128 modes. The fact that the field with 128 modes has larger barriers is clearly visible in the figure.

Given the above, it is interesting to examine the case of a diffusing dipole as studied in [14]. In the case of positive temperature the potential  $\psi = -\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2$  has localized minima of varying depths which can be regarded as traps. Therefore in this case one would think that the trap model picture would be a reasonably good approximation. If we take equation (6) with  $\alpha = 1$  and apply it to this case (authors of [14] used  $\Delta(\mathbf{x}) = \exp(-\mathbf{x}^2/2)$ ) one finds that the transition occurs at  $\beta = 1$ . Interestingly the numerical results of [14] indicate a crossover from a concave behaviour to a convex behaviour of  $\kappa_e$  in this region, rather reminiscent of the behaviour of the finite  $N$  values in figure 2 near the dynamical transition. It is also interesting to note that the third- and fourth-order perturbation theory results of [14] give values of  $\kappa_e$  which vanish close to  $\beta = 1$  (extremely close in the case of the third-order result). Having said this we have no rigorous proof that there should be a transition in the model studied in [14]. However, for the reasons presented here, a finite size scaling analysis could resolve this issue. In [14] there is no evidence for a transition at negative temperatures.

To summarize, our exact results have shown that, in the squared Gaussian cases studied here, the high temperature regime is characterized by a relaxation time  $\tau$  (using the fact that the correlation length scale is  $O(1)$ ) which is finite but diverges as  $T \rightarrow T_g$  as

$$\tau \sim \frac{1}{(T - T_g)^{\frac{1}{2}}}. \quad (46)$$



**Figure 2.** Exact value of the diffusion constant  $\kappa_e$  in one dimension for a squared potential. The solid line shows the exact Gaussian result ( $N = \infty$  modes) and the dotted and dashed lines are for  $N = 128$  and  $N = 64$  modes, respectively. Note that at the Gaussian transition temperature given by  $\beta = 1$  the corresponding  $\kappa_e$  for  $N = 128$  mode is  $\kappa_e(1) \approx 0.3$ .

However when the potential is constructed from a finite number of modes we find that for  $T < T_g$ .

$$\tau \sim \exp\left(\frac{N\Delta\epsilon(T)}{T}\right), \tag{47}$$

where  $N\Delta\epsilon(T)$  can be interpreted as a temperature-dependent energy barrier. In one dimension this barrier height tends to the maximal difference in potential possible between two points as the temperature approaches zero and in two dimensions it tends to half the maximal difference.

In one dimension one can obtain information about transport behaviour by analysing the first passage time. This method can be used to calculate the diffusion constant in a one-dimensional potential [15] and was used in [21] to determine the exponents of the anomalous diffusion in a Gaussian potential with long-range (logarithmic) correlations. To simplify the calculation one considers diffusion on the half line with reflecting boundary conditions at the origin 0. We denote by  $T(L)$  the average (in the thermal sense of averaging over realizations of the white noise) time at which the tracer particle starting at the origin first reaches the point  $L$ . This average first passage time is given by (see [21] and references within) the following double integral which depends on the realization of the driving field  $\psi$ :

$$T(L) = \int_0^L dy dx \theta(y - x) \exp(\beta\psi(y) - \beta\psi(x)). \tag{48}$$

In general we can compute the moments of  $T$  by replicating the double integrals to yield upon disorder averaging

$$\overline{T(L)^n} = \int_0^L \prod_a dy_a dx_a \theta(y_a - x_a) \det(I + \beta A \Lambda)^{-\frac{1}{2}}, \tag{49}$$

where the matrices  $A$  and  $\Lambda$  are symmetric  $2n \times 2n$  matrices with

$$A_{ab} = \Delta(y_a - y_b) \tag{50}$$

and

$$\begin{aligned} \Lambda_{ab} &= -\delta_{ab} && \text{for } 1 \leq a, b \leq n \\ &= 0 && \text{for } 1 \leq a \leq n, n + 1 \leq b \leq 2n \\ &= \delta_{ab} && \text{for } n + 1 \leq a, b \leq 2n, \end{aligned} \tag{51}$$

where we have used the notation  $x_a = y_{n+a}$ . For the first moment  $n = 1$  we find, where it is finite, that

$$\overline{T(L)} = \int_0^L \prod dy dx \theta(y - x) \frac{1}{(1 - \beta^2 + \beta^2 \Delta^2(y - x))^{\frac{1}{2}}}. \tag{52}$$

For  $\beta < 1$  we may write

$$\overline{T(L)} = \frac{1}{2L^2 \sqrt{1 - \beta^2}} + \int_0^L dy dx \theta(y - x) \left( \frac{1}{(1 + \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \Delta^2(y - x))^{\frac{1}{2}}} - 1 \right), \tag{53}$$

which becomes for large  $L$ ,

$$\overline{T(L)} = \frac{L^2}{2\sqrt{1 - \beta^2}} - LC, \tag{54}$$

where

$$C = \int_0^\infty dz \left[ 1 - \frac{1}{(1 + \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \Delta^2(z))^{\frac{1}{2}}} \right] \tag{55}$$

when it is finite. The leading order in  $L$  of the right-hand side above yields the correct high temperature diffusion constant.

Inspection of the double integral in equation (52) shows that, assuming that  $\Delta(x)$  is monotonically decreasing, the value of  $\overline{T(L)}$  is finite as long as  $\Delta(L)^2 > (\beta^2 - 1)/\beta^2$ . This is clearly always the case in the high temperature phase  $\beta < 1$ . In the low temperature phase there is now a length scale  $L_c$ , which is temperature dependent: for  $L < L_c$   $\overline{T(L)}$  is finite, and for  $L > L_c$  it is divergent. For a monotone  $\Delta$  this means that  $L_c$  decreases with temperature and we may tentatively relate this with the idea of the system progressively freezing on smaller and smaller length scales as the temperature is decreased. This image of the system becoming frozen on smaller and smaller length scales is one which has been used extensively to interpret experiments on spin glasses [22].

We will now present an argument which will give a prediction for the exponent of anomalous diffusion in the low temperature phase. The argument is similar in spirit to that of [21] for long-range Gaussian potentials in one dimension, although it is difficult to make it as rigorous as in the long-range case. First note that as one approaches the transition temperature the terms causing the divergence in equation (52) are those where  $x$  and  $y$  are far away from each other and hence uncorrelated. Second note that in equation (48) we expect (in the case of  $\beta > 0$ ) that the first passage time is dominated by the maximal value of  $\phi$ . Let us denote this value by  $y_*$ . In the replicated averaged formula equation (49) we thus expect the most divergent term to occur at  $y_a = y_*$  for all  $a$ . Also we expect that there are many values of  $x$  which contribute to the most divergent term in equation (49) and these are points where  $\phi(x) = 0$ . In general these points will be well separated and far from  $y_*$ . Thus over most of the replicated interval  $|x_a - x_b| \gg 1$  and  $|x_a - y_*| \gg 1$ . This means that one can make the approximation in the integral that  $\Delta(x_a - x_b) \approx 0$  and  $\Delta(x_a - y_*) \approx 0$  and thus the replicated

integral in equation (49) can be approximated as

$$\begin{aligned} \overline{T(L)^n} &\approx \int_0^L dy_* \int_0^{y_*} dx_a \det(I + \beta B \Lambda)^{-\frac{1}{2}} \\ &\approx \det(I + \beta B \Lambda)^{-\frac{1}{2}} \frac{L^{n+1}}{n+1}, \end{aligned} \tag{56}$$

where

$$\begin{aligned} B_{ab} &= -1 \quad \text{for } 1 \leq a, b \leq n \\ &= 0 \quad \text{for } 1 \leq a \leq n, n+1 \leq b \leq 2n \\ &= \delta_{ab} \quad \text{for } n+1 \leq a, b \leq 2n. \end{aligned} \tag{57}$$

The eigenvalues of  $B$  are easily calculated, there being 1 equal to  $-n\beta$ ,  $n - 1$  equal to 0 and  $n$  equal to 1.

This now gives

$$\overline{T(L)^n} \approx \frac{1}{(1+n)(1-n\beta)^{\frac{1}{2}}(1+\beta)^{\frac{n}{2}}} L^{n+1}. \tag{58}$$

Now if we choose the exponent  $n$  to be very close to  $\frac{1}{\beta}$  we find that equation (58) is indeed diverging and should be the dominant contribution. This yields

$$\overline{T(L)^{\frac{1}{\beta}}} \sim L^{1+\frac{1}{\beta}} \tag{59}$$

and thus dimensionally we have

$$\langle X_t^2 \rangle \sim t^{\frac{2}{1+\beta}} \tag{60}$$

in agreement with the arguments in [11] and references therein.

In the presence of an external field the potential becomes  $\frac{1}{2}\psi^2 - hx$ . The same line of reasoning now gives for large  $L$ ,

$$\begin{aligned} \overline{T(L)^n} &\approx \int_0^L dy_* \int_0^{y_*} dx_a \exp\left(-nhy_* + \sum_a hx_a\right) \det(I + \beta B \Lambda)^{-\frac{1}{2}} \\ &\approx \det(I + \beta B \Lambda)^{-\frac{1}{2}} \frac{L}{(\beta h)^n}. \end{aligned} \tag{61}$$

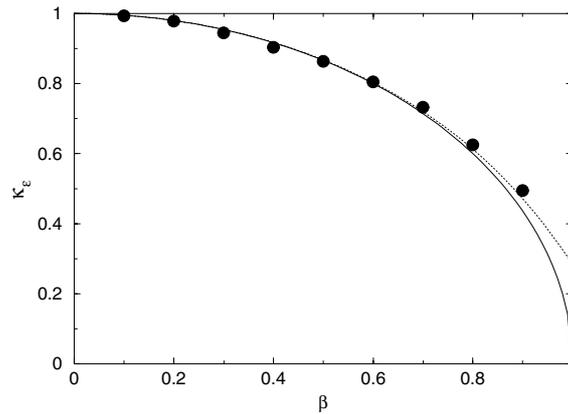
Again we set  $n$  very close to  $\frac{1}{\beta}$  and dimensionally find the form

$$\langle X_t \rangle \sim h^{\frac{1}{\beta}} t^{\frac{1}{\beta}} \tag{62}$$

again in agreement with the results of [11], not only for the temporal exponent but also for the exponent associated with  $h$ . The above calculation also shows that the value of  $\alpha$  associated with the effective trap model defined by equation (6) for this problem is indeed  $\alpha = 1$ .

### 3. Numerical simulations

In this section we will verify the analytical results of the previous sections via two distinct types of numerical simulations. We begin with a direct simulation of the Langevin process using a second-order Runge–Kutta integration of the Langevin equation as developed in [23] and generating the random field  $\phi$  via equation (28) as proposed originally in [19]. This simulation technique allows access to the asymptotic regime, where the relevant transport coefficients can be evaluated, at high temperatures in the regime of normal diffusion and at temperatures below  $T_g$ , but not too low. Clearly in order to attain the asymptotic regime at low

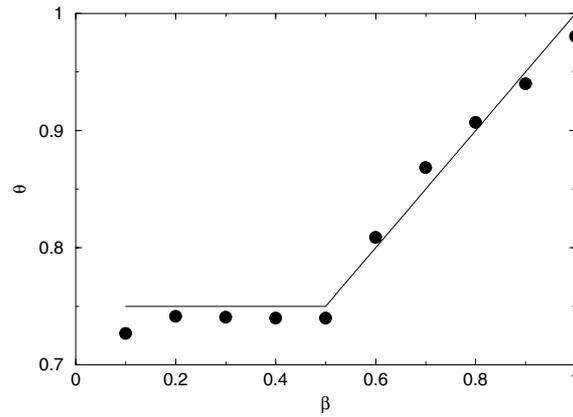


**Figure 3.** Fit of simulation results (circles), assuming an exponent  $\theta$  given by equation (24), of the diffusion constant  $\kappa_e$  in one dimension using  $N = 128$  modes. The dashed line shows the analytic result for  $N = 128$  modes and the solid line that in the limit  $N \rightarrow \infty$ .

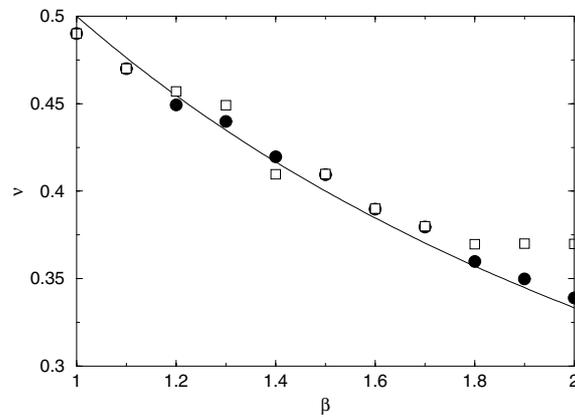
temperatures we need to diffuse over a sufficiently large distance. However as the diffusion becomes progressively slower the times needed to attain this regime become prohibitive from the computational point of view. We expect that the low temperature phase should be described by a one-dimensional trap model but, as discussed above, it is not completely obvious what parameters we should take for this trap model. We have therefore constructed an effective trap model directly from a realization of the random field as generated by equation (28). The procedure used is the following. We take a realization of the field  $\psi$  over a suitably large interval. Each minima  $\alpha$  of the field is associated with a point  $\alpha$  on the line at its actual position denoted by  $x_\alpha$ . We then calculate the energy barrier to move to the nearest minima to the left  $\alpha - 1$  and the right  $\alpha + 1$ . These two energy barriers are denoted by  $\Delta E_\alpha^{(L)}$  and  $\Delta E_\alpha^{(R)}$ , respectively. The particle then is taken to jump to the left/right at an exponentially distributed random time  $T_{L/R}$  with average value given by the Arrhenius law  $\tau_{L/R} = \exp(\beta \Delta E_\alpha^{(L/R)})$  (the overall scaling of time is unimportant to determine the exponent associated with the anomalous diffusion). From the site  $\alpha T_{L/R}$  are generated numerically and the particle hops to the site corresponding to the shorter time. The time of the simulation is then increased by this shorter time. In this way we can assure that the system has diffused sufficiently far and the total simulation time is independent of the physical time, allowing us to attain the asymptotic regime.

Our numerical integration of the stochastic differential in the high temperature normal phase yields the following results. Shown in figure 3 is the value of the diffusion constant  $\kappa_e$  determined from a fit  $\langle X_t^2 \rangle = 2\kappa_e t + Bt^\theta$ , where  $\theta$  is the exponent predicted by equation (24). The numerical result is generated by averaging over 10 000 particles in each realization of the random field and averaging over 100 realizations generated using 128 modes. The total time of the simulation consisted of 5000 integration steps using  $\Delta t = 0.5$  in the second-order stochastic Runge–Kutta. Again we see that the above fit is in good agreement with the theoretical result for  $N = 128$  (dashed line) modes. Also shown is the  $N \rightarrow \infty$  result (solid line).

In figure 4 we show the fitted value of the exponent  $\theta$  assuming the exact result (for  $N = 128$  modes) for  $\kappa_e$ . We see that the result is in good accord with the scaling prediction of equation (24) for  $\theta$ .



**Figure 4.** Fit of simulation results (circles), of the exponent  $\theta$ , using the analytic result for  $\kappa_e$  in one dimension with  $N = 128$  modes. The solid line shows the scaling prediction equation (24) for  $\theta$ .



**Figure 5.** Fit of exponent of the anomalous diffusion  $\nu$  obtained from the one-dimensional effective trap model (circles) and direct integration of the stochastic differential equation (squares) shown against the prediction  $\nu = 1/(1 + \beta)$  (solid line).

For temperatures not too far below  $T_g$  we may use a direct numerical integration to estimate the exponent  $\nu$ . The results of these simulations are shown in figure 5 (empty squares). We see that the numerically measured value of the exponent is close to the predicted one up to  $\beta \sim 1.5$  but after it departs from the predicted value. We believe that this because we are not carrying out the simulation for sufficiently long times. Indeed when we simulate the trap model, where simulation time is no longer a problem, we see from figure 5 (filled circles) that the agreement with the theoretical result is much improved for the larger values of  $\beta$ .

#### 4. Conclusions

We have studied the dynamics of a particle diffusing in an potential which is given by the square of a Gaussian potential whose statistics are translationally invariant in space and

whose correlation function is short ranged. In contrast to the Gaussian case, there really is a dynamical transition for this model. The transition manifests itself as a crossover between a high temperature diffusive regime and a low temperature regime where the particle diffusion is anomalous and more specifically is sub-diffusive. We showed how the diffusion constant could be computed in one dimension and in a special case in two dimensions. Interestingly when the Gaussian field is constructed using a finite Fourier series we see that, instead of vanishing at the dynamical transition temperature, the diffusion constant obeys an Arrhenius form dependent on the maximal energy barrier present in the system. Explicitly we have shown that

$$\kappa_e \sim C \exp\left(-\frac{AN}{T}\right), \quad (63)$$

at low temperatures. This result is physically intuitive and our calculation allows for a complete understanding of the finite size scaling underlying this dynamical transition. We also showed that these finite scaling effects can be important for the number of modes typically used in numerical simulations. In addition, in one dimension we show that the low temperature phase can be described in terms of a trap model where the energy barriers are assumed to have the same statistics as the energy function itself. The resulting sub-diffusive behaviour for the low temperature regime in one dimension is

$$\langle X_t^2 \rangle \sim t^{\frac{2}{1+\beta}}. \quad (64)$$

This scaling form and that for the mean displacement in the presence of a uniform drift was also obtained via a, non-rigorous, replica-based computation of the moments of the mean first passage time. Finally in the case of a finite number of modes it is a natural question to ask which time scale one must go to in order to see the finite size effect diffusive behaviour in the low temperature regime as opposed to the anomalous diffusion. A simple way to estimate this crossover time  $t_c$  is to equate the mean-squared displacements in the anomalous and diffusive cases, i.e.

$$t_c^{\frac{2}{1+\beta}} \sim \exp\left(-\frac{AN}{T}\right) t_c, \quad (65)$$

which yields at low temperatures

$$t_c \sim \exp\left(\frac{AN}{T}\right). \quad (66)$$

## Acknowledgments

DSD would like to thank the Isaac Newton Institute Cambridge where part of this work was carried out during the programme Principles of the Dynamics of Non-Equilibrium Systems. We would also like to thank J-P Bouchaud for useful conversations and pointing out the interest of this model.

## References

- [1] Marinari E, Parisi G and Ritort F 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 7615  
Marinari E, Parisi G and Ritort F 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 7647  
Bouchaud J-P and Mezard M 1994 *J. Physique I* **4** 1109
- [2] Kirkpatrick T R and Thirumalai D 1987 *Phys. Rev. B* **36** 5388
- [3] Bouchaud J-P, Cugliandolo L F, Kurchan J and Mézard M 1998 Out of equilibrium dynamics in spin-glasses and other glassy systems *Spin-Glasses and Random Fields* ed A P Young (Singapore: World Scientific)

- [4] Mézard M and Paris G 1991 *J. Physique I* **1** 809  
Engel A 1993 *Nucl. Phys. B* **410** 617  
Fyodorov Y V and Sommers H-J 2006 *Preprint cond-mat/0610035*
- [5] Franz S and Mézard M 1994 *Physica A* **210** 48  
Cugliandolo L F and Le Doussal P 1996 *Phys. Rev. E* **53** 1525  
Kinzelbach H and Horner H 1993 *J. Physique I* **3** 1329
- [6] Dean D S, Drummond I T, Horgan R R and Da-Silvo-Santos C A 1998 *Europhys. Lett.* **42** 241
- [7] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 1994 *J. Phys. A: Math Gen.* **27** 5135  
Deem M W and Chandler D 1994 *J. Stat. Phys.* **76** 911
- [8] Bouchaud J-P 1992 *J. Physique I* **2** 1705
- [9] Bouchaud J-P and Dean D S 1995 *J. Physique I* **5** 265
- [10] Monthus C 2004 *Phys. Rev. E* **69** 026103  
Monthus C 2003 *Phys. Rev. E* **67** 046109  
Monthus C 2003 *Phys. Rev. E* **68** 036114  
Ben Arous G and Cerny J 2005 *Ann. Appl. Probab.* **15** 1161  
Monthus C and Bouchaud J-P 1996 *J. Phys. A: Math. Gen.* **29** 3847  
Monthus C 2003 *J. Phys. A: Math. Gen.* **36** 11605
- [11] Bertin E and Bouchaud J-P 2003 *Phys. Rev. E* **67** 065105  
Bertin E and Bouchaud J-P 2003 *Phys. Rev. E* **67** 026128
- [12] Junier I and Kurchan J 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 3945
- [13] Denny R A, Reichman D R and Bouchaud J-P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 025503  
Doliwa Heuer and Saksengwijit 2005 *Phys. Rev. E* **72** 021503
- [14] Drummond I T, Horgan R R and da Silva Santos C A 1998 *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** 1341
- [15] De Gennes P G 1975 *J. Stat. Phys.* **12** 463  
Zwanzig R 1988 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **85** 2029
- [16] Dean D S, Drummond I T, Horgan R R and Lefèvre A 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 10459
- [17] Bouchaud J-P and Georges A 1990 *Phys. Rep.* **195** 127
- [18] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 1997 *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** 385  
Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 2039
- [19] Kraichnan R H 1976 *J. Fluid. Mech.* **77** 753
- [20] Abramowitz M and Stegun I A (ed) 1964 *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover)
- [21] Castillo H E and Le Doussal P 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 4859
- [22] Bouchaud J-P, Dupuis V, Hammann J and Vincent E 2002 *Phys. Rev. B* **65** 024439  
Berthier L and Holdsworth P C W 2002 *Europhys. Lett.* **58** 35  
Bethier L and Bouchaud J-P 2002 *Phys. Rev. B* **66** 054404
- [23] Drummond I T, Duane A and Horgan R R 1984 *J. Fluid Mech.* **138** 75  
Honeycutt R L 1992 *Phys. Rev. A* **45** 600



## Self Similar Renormalization Group Applied to Diffusion in non- Gaussian Potentials

J. Phys. A : Math. Theor. **41**, 335002 (2008).

# A self-similar renormalization group applied to diffusion in non-Gaussian potentials

David S Dean and Clément Touya

Laboratoire de Physique Théorique, Université Paul Sabatier, Toulouse, France

Received 3 April 2008, in final form 18 June 2008

Published 15 July 2008

Online at [stacks.iop.org/JPhysA/41/335002](http://stacks.iop.org/JPhysA/41/335002)

## Abstract

We study the problem of the computation of the effective diffusion constant of a Brownian particle diffusing in a random potential which is given by a function  $V(\phi)$  of a Gaussian field  $\phi$ . A self-similar renormalization group analysis is applied to a mathematically related problem of the effective permeability of a random porous medium from which the diffusion constant of the random potential problem can be extracted. This renormalization group approach reproduces practically all known exact results in one and two dimensions. The results are confronted with numerical simulations and we find that their accuracy is good up to points well beyond the expected perturbative regime. The results obtained are also tentatively applied to interacting particle systems without disorder and we obtain expressions for the self-diffusion constant in terms of the excess thermodynamic entropy. This result is of a form that has commonly been used to fit the self-diffusion constant in molecular dynamics simulations.

PACS numbers: 05.20.-y, 66.10.Cb, 66.30.Xj

## 1. Introduction

In this paper we will consider the late time diffusion constant associated with a Brownian or Langevin particle, in  $D$  dimensions, advected by a velocity field which is given by the gradient of a random potential. The explicit Langevin equation studied is

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \nabla V(\phi(\mathbf{X})) + \eta(t), \quad (1)$$

where the local potential  $V$  is itself a function of a Gaussian random field  $\phi$ . In general (up to an overall rescaling of time) the potential  $V$  can be written as

$$V(\phi) = -\beta v(\phi), \quad (2)$$

where  $\beta$  is the inverse temperature and  $v$  is the physical potential acting on the tracer particle. In this formulation  $\eta(t)$  is a Gaussian white noise of zero mean with the correlation function

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (3)$$

Therefore when  $V$  is not a linear function of  $\phi$  the advecting potential is non-Gaussian. The case of diffusion in purely Gaussian potentials has been extensively studied in the literature [1–3], but the non-Gaussian case has received much less attention. The Gaussian case has been studied within a variety of approximation schemes and among these schemes the most successful has been the self-similar renormalization group method which reproduces exact results in one and two dimensions and which in addition is in excellent agreement with numerical simulations in three dimensions [1–3]. The case where  $V$  is the square of the gradient of a Gaussian potential arises naturally in the case of dipoles diffusing in a random electric field (in the limit where the dipole moment equilibrates very quickly in its local field compared to the time scales over which the diffusion of its centre of mass occurs) [4]. The underlying physics is the following: if  $\mathbf{p}$  represents the dipole moment which is modelled as two opposite charges connected to a Harmonic spring and  $\mathbf{x}$  the position of the dipole centre, the total energy of a particle at the point  $(\mathbf{p}, \mathbf{x})$  is given by

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\chi} - \mathbf{E}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{p}. \quad (4)$$

The first term is the Harmonic energy of the spring, and the second term is the energy of the dipole interaction with the electric field  $\mathbf{E}$ . The constant  $\chi$  is simply the dipole polarizability. If the dipole and position both obey Langevin dynamics, but the diffusion constant for the dipole is much larger than that of the position then one finds [5] that to leading order (the adiabatic approximation) the position  $\mathbf{x}$  obeys a Langevin equation with effective potential  $v(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\chi \mathbf{E}^2(\mathbf{x})$ .

The authors of this paper have examined the case

$$v = \alpha \frac{\phi^2}{2} \quad (5)$$

in one dimension [6], where the diffusion constant can be calculated exactly. In this case it can be shown that there is a critical temperature at which the diffusion constant vanishes. Below this temperature the diffusion is anomalous (more precisely sub-diffusive) and the exponent associated with anomalous diffusion can be computed. The exact results of [6] show that the transport properties (the exponent associated with the anomalous diffusion) agree with those obtained by a straightforward mapping onto a trap model whose trapping time statistics can be deduced from the statistics of the field  $\phi$  and the Arrhenius law. There have also been some studies of diffusion in (non-Gaussian) potentials generated by the potentials due to a distribution of randomly distributed particles which interact with the tracer particle via a fixed deterministic potential [7, 8]. In systems of scatterers the Gaussian approximation to the random potential breaks down at low temperatures even for a large density of scatterers with long-range interaction potentials. This result can be understood as follows: even though the typical potential given by the sum of those generated by independent scatterers should be Gaussian, at low temperature the particle is trapped in the minimum and thus extreme values of the potential. Extreme value statistics are in general not Gaussian (the central limit theorem only applies near the mean) and thus the Gaussian approximation is doomed to fail at low temperatures.

A naive application of the self-similar renormalization group to this model at the one-loop level is not sensitive to the non-Gaussian statistics of the random potential and fails to predict the dynamical phase transition associated with the passage from normal to sub-diffusive

transport. In this paper, we reformulate the self-similar renormalization group approach in such a way that the results for the Gaussian case are unchanged, but we reproduce all known exact results in one and two dimensions. In addition, we show that the approach works well in other cases by comparison with numerical simulations; it predicts the dynamical transition, when there is one, and works reasonably well outside the perturbative regime. The basis of our analysis relies on the mapping of diffusion in the random potential to diffusion in a medium of random diffusivity; this is mainly done as it simplifies the resulting renormalization group flow. Interestingly, as a byproduct our analysis recovers an approximate result often used in the computation of the effective permeability of random porous media [3, 9–13].

The underlying Gaussian potential we shall study will be assumed to have a short-range correlation of the form

$$\langle \phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{y}) \rangle = \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (6)$$

In a translationally invariant and isotropic system the long-time behaviour of the mean-squared displacement of the process  $\mathbf{X}$  described by equation (1) is

$$\langle \mathbf{X}^2 \rangle \sim 2D\kappa_e t, \quad (7)$$

where  $\kappa_e$  is thus the long-time effective diffusion constant of the problem. The Fokker–Planck equation describing the evolution of the probability density function (pdf) for  $\mathbf{X}$  is

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \cdot (\nabla P - P \nabla V(\phi)). \quad (8)$$

The problem of diffusion in a medium of random local diffusivity  $\kappa = \exp(V(\phi))$  is described by the Fokker–Planck equation

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \cdot \exp(V(\phi)) \nabla P. \quad (9)$$

The corresponding stochastic differential equation is

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \exp(V(\phi(\mathbf{X}))) \nabla V(\phi(\mathbf{X})) + \sqrt{\exp(V(\phi(\mathbf{X})))} \eta(t). \quad (10)$$

Again under the assumptions of time-translational invariance and isotropy the late-time behaviour of a Brownian tracer particle described by the above Fokker–Planck equation is

$$\langle \mathbf{X}^2 \rangle \sim 2D\kappa_e^{(p)} t, \quad (11)$$

where  $\kappa_e^{(p)}$  is the associated long-time diffusion constant. The effective diffusion constant  $\kappa_e^{(p)}$  is also the effective permeability of a random porous medium where the fluid flow is described by Darcy’s law and if  $\kappa$  is interpreted as a local dielectric constant then  $\kappa_e^{(p)}$  is the effective dielectric constant of the medium (see the review [3]). The effective late-time diffusion constants of the two Fokker–Planck equations (8) (gradient flow) and (9) (fluctuating diffusivity) are in fact related via

$$\kappa_e = \frac{\kappa_e^{(p)}}{\langle \exp(V(\phi)) \rangle}, \quad (12)$$

a result which can be shown in a number of different ways [3, 8, 14]. The effective diffusivity can be computed from a statics problem. If one considers the Green’s function for the random diffusivity problem

$$\nabla \cdot \exp(V(\phi)) \nabla G = -\delta(\mathbf{x}), \quad (13)$$

the effective diffusivity can be read off from the long-distance behaviour of the Green’s function or equivalently the short wave-vector behaviour of its Fourier transform:

$$\langle \tilde{G}(\mathbf{k}) \rangle \sim \frac{1}{\kappa_e^{(p)} \mathbf{k}^2} \quad (14)$$

which means that on suitably large length scales Green's function reads

$$G^{-1} \sim -\kappa_e^{(p)} \nabla^2. \quad (15)$$

Note we have dropped the disorder average as we shall assume that  $\kappa_e^{(p)}$  is self-averaging.

## 2. Renormalization group approach

The basic idea of the self-similar renormalization group [1, 2] is to average out the short distance components of the random field  $\phi$  down to some wave-length  $\Lambda$  and then to write an effective diffusion equation, of the same structural form, describing the transport at length scales greater than  $1/\Lambda$ .

The Gaussian field is decomposed by defining

$$\phi_\Lambda(\mathbf{x}) = \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}), \quad (16)$$

where  $\Lambda$  is an upper ultraviolet scale which is initially infinite. We define a slice of the field  $\phi$  at inverse length scale  $\Lambda$

$$\delta\phi_\Lambda(\mathbf{x}) = \int_{\Lambda - \delta\Lambda < |\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \tilde{\phi}(\mathbf{k}). \quad (17)$$

The self-similar renormalization group process proceeds by integrating out the slice of the field  $\delta\phi$  while assuming that the remaining part of the field  $\phi_{\Lambda - \delta\Lambda}$  can be treated as a constant at the length scale  $\Lambda$ . The correlation function of the slice of the field  $\delta\phi_\Lambda$  is given by

$$\langle \delta\phi_\Lambda(\mathbf{x}) \delta\phi_\Lambda(\mathbf{y}) \rangle = \Delta_{\delta\Lambda}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (18)$$

and its Fourier transform is given by

$$\tilde{\Delta}_{\delta\Lambda}(\mathbf{k}) = \tilde{\Delta}(\mathbf{k}) I(|\mathbf{k}|, [\Lambda - \delta\Lambda, \Lambda]), \quad (19)$$

where  $I$  is the indicator function

$$\begin{aligned} I(x, A) &= 1 & \text{if } x \in A \\ &= 0 & \text{if } x \notin A. \end{aligned} \quad (20)$$

The field  $\delta\phi_\Lambda$  is thus formally of order  $\sqrt{\delta\Lambda}$ . This means that to order  $\delta\Lambda$  one may write at any given point

$$\begin{aligned} \delta\phi_\Lambda^2 &= \langle \delta\phi_\Lambda^2 \rangle \\ &= \delta\mu = \frac{S_D \Lambda^{D-1} \tilde{\Delta}(\Lambda)}{(2\pi)^D} \delta\Lambda. \end{aligned} \quad (21)$$

If we apply the self-similar renormalization group hypothesis to the Green's function in equation (13) we expect, after integrating out the random field down to wave number  $\Lambda$ , that on this inverse length scale the running Green's function obeys a similar renormalized equation of the form

$$\nabla \cdot \exp(V_\Lambda(\phi_\Lambda)) \nabla G_\Lambda = -\delta(\mathbf{x}). \quad (22)$$

Here  $G_\Lambda$  denotes the Green's function averaged over modes of  $\phi$  of modulus superior to  $\Lambda$  which we denote as

$$G_\Lambda = \langle G \rangle_\Lambda. \quad (23)$$

Now in this equation we write the field  $\phi_\Lambda = \phi_{\Lambda-\delta\Lambda} + \delta\phi_\Lambda$ . In the running equation for  $G_\Lambda$  we treat  $\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}$  as approximately constant to obtain

$$\exp\left(V_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + \frac{\delta\mu}{2}(V''_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (V'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}))^2)\right) \times \nabla \cdot (1 + V'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})\delta\phi_\Lambda)\nabla G_\Lambda = -\delta(\mathbf{x}). \quad (24)$$

Under these hypotheses we obtain

$$G_\Lambda = \frac{g_\Lambda}{\exp(V_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + \frac{\delta\mu}{2}(V''_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (V'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}))^2))}, \quad (25)$$

where the Green's function  $g_\Lambda$  is defined via

$$\nabla \cdot (1 + V'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})\delta\phi_\Lambda)\nabla g_\Lambda = -\delta(\mathbf{x}). \quad (26)$$

Now averaging over the current momentum slice we find that

$$G_{\Lambda-\delta\Lambda} = \frac{\langle g_\Lambda \rangle_{\delta\Lambda}}{\exp(V_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + \frac{\delta\mu}{2}(V''_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (V'_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}))^2))}. \quad (27)$$

Note that the average over the slice of the field  $\delta\phi_\Lambda$  can be carried out in the computation of  $\langle g_\Lambda \rangle$ . Now at length scales  $\Lambda$  the Green's function  $g_\Lambda$  should behave as

$$\langle \tilde{g}_\Lambda(\mathbf{k}) \rangle \sim \frac{1}{\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})\mathbf{k}^2}. \quad (28)$$

The equation determining  $g_\Lambda$  is of the form

$$\nabla \cdot (1 + \psi)\nabla g = -\delta(\mathbf{x}), \quad (29)$$

where  $\psi$  is a Gaussian field with the correlation function

$$\langle \psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{y}) \rangle = D(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (30)$$

Taking the Fourier transform of equation (29) yields

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\mathbf{k}^2} - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{\psi}(\mathbf{q}) \tilde{g}(\mathbf{k} - \mathbf{q}). \quad (31)$$

This equation can be iterated diagrammatically and can then be averaged to yield a set of Feynman diagrams which can be summed in terms of one-particle irreducible diagrams to obtain

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 - \Sigma(\mathbf{k})}. \quad (32)$$

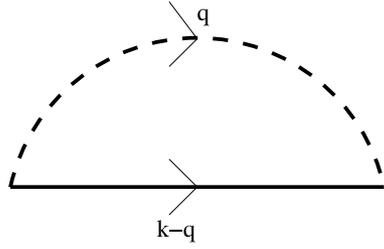
The generic method of deriving the Feynman rules for this type of problem is reviewed in detail in [3] and the interested reader can find all the necessary details for the following one-loop term (and indeed higher order terms) therein.

At order  $\delta\Lambda$  (which is simply one loop as the momentum in each loop is  $\delta\Lambda$ ) we find

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \tilde{D}(\mathbf{q}) \frac{(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q}))^2}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} \approx \frac{\mathbf{k}^2}{D} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \tilde{D}(\mathbf{q}) \quad (33)$$

for small  $|\mathbf{k}|$ . The form of the Feynman diagram giving this one-loop result is shown in figure 1. Note that in principle we have introduced higher order derivatives and interactions and so the approach is clearly not exact. However we will see that this approach appears to be capturing the essential physics of the problem. The correlation function here is given by

$$\tilde{D}(\mathbf{q}) = V_\Lambda^2(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) \tilde{\Delta}(\Lambda) I(\mathbf{q}, [\Lambda - \delta\Lambda, \Lambda]) \quad (34)$$



**Figure 1.** The Feynman diagram giving the one-loop result. The incoming and outgoing momentum is  $\mathbf{k}$  and the momentum in each line is shown. The solid line is the Fourier transform of the bare propagator and the dashed loop corresponds to the correlation function's Fourier transform  $\tilde{D}(\mathbf{q})$ .

and thus we find that

$$\kappa^*(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) = 1 - \frac{V_\Lambda'^2(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})}{D} \delta\mu. \tag{35}$$

This yields

$$\tilde{G}_{\Lambda-\delta\Lambda} \sim \frac{1}{\mathbf{k}^2 \exp(V_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + \frac{\delta\mu}{2}(V_\Lambda''(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}) + (1 - \frac{2}{D})V_\Lambda'^2(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda})))}. \tag{36}$$

We now associate the prefactor of the term  $\mathbf{k}^2$  in the denominator above as the effective diffusion constant in a region of size  $1/\Lambda$  which we denote as  $\exp(V_\Lambda(\phi_{\Lambda-\delta\Lambda}))$ . We now compute the flow of the function  $V_\Lambda$  to obtain

$$\frac{\partial V_\Lambda}{\partial \Lambda} = -\frac{1}{2} \frac{d\mu}{d\Lambda} \left( V_\Lambda'' + \left(1 - \frac{2}{D}\right) V_\Lambda'^2 \right). \tag{37}$$

The boundary conditions on  $V_\Lambda$  are  $V_\infty = V$  and the effective diffusion constant is given as

$$\kappa_e^{(p)} = \exp(V_0(0)) \tag{38}$$

i.e. after all the random modes have been integrated out. The renormalization group flow equation is nonlinear, but in the case where  $V = a\phi^2 + b\phi + c$  the flow does not introduce new interactions and the full solution can be computed. However one may formally compute the effective diffusion constant via the following observation. If one wants to compute the average

$$A_0 = \langle \exp(\alpha U(\phi)) \rangle \tag{39}$$

one may also use a (albeit very simple) renormalization group procedure writing

$$\begin{aligned} A_\Lambda &= \langle \exp(\alpha U(\phi)) \rangle_\Lambda \\ &= \exp(\alpha U_\Lambda(\phi_\Lambda)). \end{aligned} \tag{40}$$

The flow equation for  $U_\Lambda$  is easy to compute and is given by

$$\frac{\partial U_\Lambda}{\partial \Lambda} = -\frac{1}{2} \frac{d\mu}{d\Lambda} (U_\Lambda'' + \alpha U_\Lambda'^2). \tag{41}$$

Thus if we make the following identification,

$$V_\infty = U_\infty, \quad \alpha = 1 - \frac{2}{D}, \tag{42}$$

we find that  $V_\Lambda = U_\Lambda$  for all  $\Lambda$  and consequently

$$\begin{aligned} \kappa_e^{(p)} &= \exp(V_0(0)) = \exp\left(\left(1 - \frac{2}{D}\right) V_0(0)\right)^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}} \\ &= \left\langle \exp\left(\left(1 - \frac{2}{D}\right) V(\phi)\right) \right\rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}. \end{aligned} \tag{43}$$

Therefore if one has a local diffusivity or permeability  $\kappa(\mathbf{x}) = \kappa(\phi(\mathbf{x}))$  i.e. an arbitrary (positive) function of a Gaussian field, then we find that the effective permeability is given by

$$\kappa_e^{(p)} = \langle \kappa(\mathbf{x})^{1-\frac{2}{D}} \rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}. \tag{44}$$

This result is a widely used approximation in the field of effective permeabilities and this form is sometimes referred to as the Landau–Lifshitz–Matheron conjecture [9, 12] (although it is usually stated for Gaussian fields in terms of the local field variance). This formula is exact in one dimension and is also exact in two dimensions if the local permeability is (up to a constant multiplicative factor) statistically identical to its inverse [3, 7, 15, 16]. If one repeats the argument above for a system where

$$\kappa = \exp(V(\phi) - V(\phi')), \tag{45}$$

where  $\phi$  has the same statistics as  $\phi'$  then we find that  $\kappa_e^{(p)} = 1$  which agrees with the exact result in two dimensions. The result is not exact for the Gaussian case  $V(\phi) = \phi$  in three dimensions, but the deviation from the real result in fact only shows up at three-loop order [18]. In the hydrology community the question of whether the Landau–Lifshitz–Matheron conjecture was exact in three dimensions animated debate for sometime.

Now we return to the problem of diffusion advected by the gradient of random potential  $V(\phi)$ ; putting together the results of approximate equation (43) and the exact relation (12) we obtain

$$\kappa_e = \frac{\langle \exp\left(\left(1 - \frac{2}{D}\right) V(\phi)\right) \rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}}{\langle \exp(V(\phi)) \rangle}. \tag{46}$$

This is the main result of our paper and in what follows we shall analyse the behaviour for various choices of the potential  $V(\phi)$  and confront the predictions with results of numerical simulations.

### 3. Discussion and some special cases

In the case of a purely Gaussian potential  $V(\phi) = -\beta\phi$  this gives

$$\kappa_e = \exp\left(-\frac{\beta^2}{D}\right), \tag{47}$$

where we have set the variance of the Gaussian field  $\Delta(0) = 1$ . This result is in agreement with the renormalization group approaches in [1, 2]. It is known to be exact in one and two dimensions and it is correct at two-loop order in perturbation theory [17]. However it has been shown to break down at three-loop order in three dimensions [18] and so the result equation (46) is certainly not exact. However numerical simulations in three dimensions have shown that the prediction (47) is remarkably accurate well beyond the perturbative region (where the basic perturbation theory should work well). One of the interesting features of the renormalization group approach applied to the gradient flow is that the fluctuation dissipation relation or the Stokes–Einstein relation is respected in that the coupling to the random field is

renormalized in the same way as the diffusivity. This can be stated in terms of a Ward identity in the perturbation series expansion [17] and can also be shown exactly to all orders by quite a different method [19]. One way of interpreting this result is that the scheme preserves the steady-state measure (which in this case is the Gibbs Boltzmann distribution with the same temperature at all points in the renormalization group flow) of the effective diffusion equation under the renormalization group flow. The method used here on the effective diffusivity problem also preserves the steady-state flat measure and the idea that the static measure must be preserved by a renormalization group or the other similar perturbative analysis is the one which seems to be worth pursuing.

A case recently studied by the authors is that where we take

$$V(\phi) = -\beta \frac{\phi^2}{2}, \tag{48}$$

i.e. the physical potential  $v(\phi) = \phi^2/2$ . Unlike the Gaussian case the diffusive behaviour will depend on the sign of the inverse temperature  $\beta$ . When  $\beta$  is positive the Langevin particle is attracted to regions where  $\phi = 0$ . In a  $D$ -dimensional space the regions where  $\phi = 0$  form  $D - 1$  dimensional subspaces; at low temperatures one thus expects the particle to be confined to these regions. However there is no clear mechanism for confining the particle and thus we expect the transport to be diffusive at all finite temperatures. When  $\beta$  is negative the particle is attracted to points where the field  $\phi$  is maximal or minimal where  $\nabla\phi = 0$ .

In the generic case where attractive regions are zero dimensional they correspond to localized traps. In this case the average time to escape from a trap is given by the Arrhenius law

$$\tau \sim \tau_0 \exp(\beta \Delta E), \tag{49}$$

where  $\Delta E$  is the energy barrier associated with the trap and  $\tau_0$  a microscopic time scale. Now we will assume that effective energy barriers scale like the potential  $V$  itself and hence write  $\Delta E = \bar{v} - v(\phi)$  where  $\bar{v}$  represents an arbitrary energy level at which one is deemed to be not trapped. This gives the mean residence time of a trap averaged over traps to be

$$\langle \tau \rangle \sim \tau_0 \exp(\beta \bar{v}) \langle \exp(-\beta v) \rangle. \tag{50}$$

It is now easy to see that the average number of jumps from trap to trap is given by  $n \sim 1/\langle \tau \rangle$  and thus we find that

$$\kappa_e \sim \frac{1}{\tau} \sim \frac{1}{\langle \exp(-\beta v) \rangle}. \tag{51}$$

In terms of the physical potential  $v$  our main result equation (46) reads

$$\kappa_e = \frac{\langle \exp(-\beta(1 - \frac{2}{D})v(\phi)) \rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}}{\langle \exp(-\beta v(\phi)) \rangle}. \tag{52}$$

Comparing equations (51) and (52) we see the appearance on the same average  $\langle \exp(-\beta v(\phi)) \rangle$  in the denominator; it is the divergence of this term which is thus responsible for the vanishing of the diffusion constant. Let us note that, even though this term may diverge at a certain value  $\beta = \beta_c$ , the term in the numerator which is the effective diffusion constant for the effective permeability, i.e.

$$\kappa_e^{(p)} = \left\langle \exp\left(-\beta\left(1 - \frac{2}{D}\right)v(\phi)\right) \right\rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}} \tag{53}$$

remains finite beyond this value of  $\beta$  and thus the random diffusivity problem can have a finite diffusion constant while the gradient flow problem exhibits a vanishing diffusion constant.

The localization of a dynamical transition, characterized by a vanishing diffusion constant, via numerical simulations is notoriously difficult. First the low but finite value of the diffusion constant as one approaches the transition means that one must carry out simulations over long time scales to diffuse sufficiently to place one in the steady state (time translationally invariant regime) and in order to reach the long time regime of the diffusion process. Furthermore, it was shown by the authors [6] that there are finite-size effects if one uses a finite number of modes to simulate the random field à la Kraichnan [20]; these effects smooth out the dynamical transition in a similar way to which finite size effects affect simulations of critical phenomena. This is for this reason that it is sometimes better to simulate the random diffusivity problem, corresponding to the gradient flow problem, and then deduce the effective diffusion constant for the gradient flow problem via the exact relation equation (12). We will show a numerical example of the effectiveness of this approach later on.

A specific example where the effective diffusion constant can be explicitly evaluated is

$$v(\phi) = \frac{1}{2}(\phi - a)^2, \tag{54}$$

here we find

$$\kappa_e = \frac{(1 + \beta)^{\frac{1}{2}}}{(1 + \beta(1 - \frac{2}{D}))^{\frac{1}{2(1-\frac{1}{D})}}} \exp\left(-\frac{\beta^2 a^2}{D} \frac{1}{(1 + \beta(1 - \frac{2}{D}))(1 + \beta)}\right). \tag{55}$$

In the case  $D = 1$  we find

$$\kappa_e = (1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\beta^2 a^2}{(1 - \beta^2)}\right), \tag{56}$$

which is an exact result. For  $D = 2$  we find

$$\kappa_e = (1 + \beta)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\beta}{2}\right) \exp\left(-\frac{\beta^2 a^2}{2} \frac{1}{(1 + \beta)}\right). \tag{57}$$

We note that for  $D = 1$  there is a transition for both positive and negative  $\beta$ . However in higher dimensions there is only a transition predicted for  $\beta$  negative ( $\beta = -1$ ), that is to say when local maxima and minima of the field  $\phi$  behave as traps. In the case where  $a = 0$  the diffusion constant vanishes in a power-law fashion reminiscent to that predicted by mode coupling type theories [21]. In the case where  $a \neq 0$  the dominant behaviour in the vanishing of the diffusion constant (or the divergence in the characteristic time scale) has the form

$$\kappa_e \sim \exp\left(-\frac{C}{|T - T_c|}\right) \tag{58}$$

which has the Vogel–Fulcher–Tammann form often evoked in the analysis of the experimental glass transition. Let us note that in one dimension the result for the diffusion constant is a function of  $\beta^2$  and there is a dynamical transition at  $\beta = 1$  and  $-1$ . The transition at  $\beta = -1$  is of course already guaranteed due to our formulation of the problem via the diffusivity representation; the transition at  $\beta = 1$  is however predicted directly by the renormalization group analysis.

The behaviour of  $\kappa_e$  at positive  $\beta$  in two and higher dimensions is very interesting. Recall here that the particle will be localized on the  $D - 1$  dimensional surfaces  $\phi = a$  at low temperatures. For large  $\beta$  the renormalization group prediction is

$$\kappa_e \sim T^{\frac{1}{D-2}} \exp\left(-\frac{a^2}{D-2}\right) \left(1 - \frac{2}{D}\right)^{-\frac{1}{2(1-\frac{1}{D})}} \tag{59}$$

for  $D > 2$  and

$$\kappa_e \sim \frac{1}{T^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2T}(1 + a^2)\right) \tag{60}$$

for  $D = 2$ . We thus see that the dimension plays a crucial role in the low temperature behaviour of the diffusion constant. For  $D = 2$  the dominant effect of temperature on the diffusion constant is of the Arrhenius form, implying that the crossing of energy barriers is the major mechanism contributing to diffusion. However for more than two dimensions there is a simple power-law behaviour of the diffusion constant at low temperature, implying that the effect of energy barriers is somehow marginal. This implies that most transport can be achieved without crossing energy barriers which are of order 1 and that the particle manages to diffuse while staying close to the surface  $\phi = a$ . It is worth remarking here that the way in which the Volger–Fulcher–Tammann law arises here is identical to the mechanism arising in the glass model of Vilgis [22]. Here the local energy barriers are taken to be of the form  $Ez$ , where  $E$  is the typical energy barrier due to a neighbouring atom or molecule in a network type glass, and  $z$  is the local coordination number. The energy barrier is thus  $Ez$ , and if one assumes that  $z$  has a Gaussian distribution about an average value  $z_0$  then one easily finds, via the Arrhenius law, the VFT form for the relaxation time.

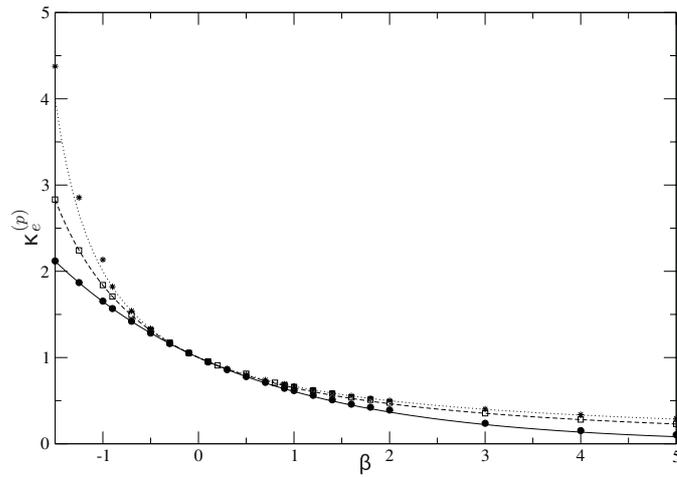
#### 4. Numerical simulations

In this section we test the predictions of the renormalization group analysis against numerical simulations of the Langevin equations (1) and (10). In what follows we will generate the random fields using the method due to Kraichnan [3, 20]. In the simulations carried out here we found that away from any dynamical transition the results were not significantly changed in going between 64 and 128 modes. The results reported here will be in the majority of cases for 128 modes. The stochastic differential equations for both the gradient flow and the random diffusivity problem were integrated using the second-order Runge–Kutta integration schemes developed in [23, 24] and reviewed in [3]. In all simulations the effective diffusion constant for a given realization of the disorder was obtained by fitting the mean squared displacement averaged over 10 000 particles at late times. The time of the simulation was chosen so that particles had typically diffused ten or so correlation lengths of the field. The diffusion constant is determined by a fit of the average mean square displacement over the last half of the time of the simulation (to ensure that the mean squared displacement is well within the linear regime). In three and higher dimensions the late time average mean square displacement is fitted with a simple linear fit of the form  $At + B$  and in two dimensions a logarithmic correction is used, i.e.  $At + B \ln(t)$ . Finally, the average over the disorder induced by the random field was made over 500 realizations of the field. In all simulations the Gaussian field was taken to have the correlation function

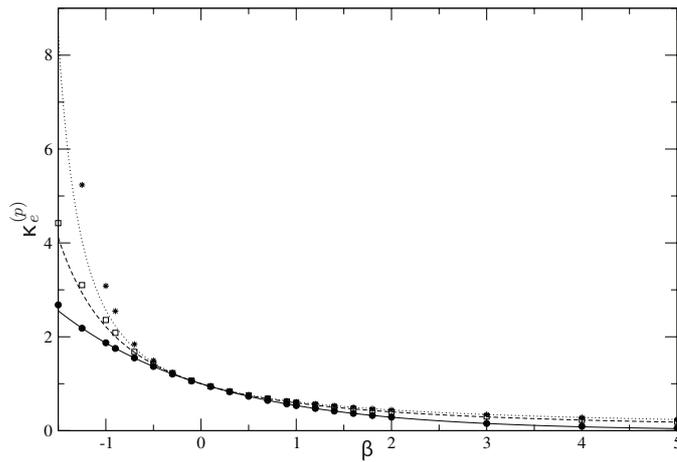
$$\Delta(\mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^2\right) \quad (61)$$

and we concentrate on quadratic forms for the potential of the form  $v = (\phi - a)^2/2$ . First we carried out numerical simulations of the diffusivity problem described by the Langevin equation (10). The numerically measured value for the diffusion constant in two, three and four dimensions compared to that given by the renormalization group prediction for the case  $a = 0$  is shown in figure 2. We see that the agreement is excellent up to very large values of  $|\beta|$  showing that the RG approach works well outside the expected perturbative regime. The RG prediction appears to improve as the dimensions of the space are increased. In figure 3 we show the corresponding curves for the case  $a = 0.5$ , again we see excellent agreement.

The predictions of the RG analysis can also be directly compared with a simulation of the stochastic equation (1) and the results are found to be in excellent agreement for small values of  $|\beta|$ . However near the dynamical transition finite size effects play a role. Direct

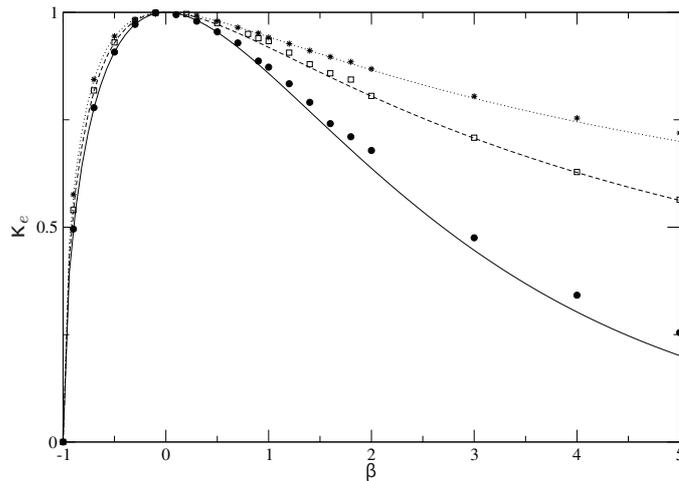


**Figure 2.** Analytical calculation of equation (53) for  $\kappa_e^{(p)}$  for  $a = 0$  in 2 (solid line), 3 (dashed line) and 4 (dotted line) dimensions, confronted with direct simulation of the random diffusivity problem. The simulation results are shown as circles (2D), squares (3D) and stars for (4D). We have excellent agreement except at negative  $\beta$  for  $\beta < -1$  in 4D. This is to be expected as locally  $\kappa(\mathbf{x})$  can become very big which is obviously a problem for simulation.



**Figure 3.** Analytical calculation of equation (53) for  $\kappa_e^{(p)}$  for  $a = 0.5$  in 2 (solid line), 3 (dashed line) and 4 (dotted line) dimension, confronted with direct simulation of the random diffusivity problem. The circles stand for 2D, squares for 3D and stars for 4D. We have an excellent agreement except for  $\beta < -1$  in 4D. In this case,  $\kappa_e^{(p)}$  become indeed very large which forces us to use a smaller time step and thus the simulations are harder.

simulation of the gradient flow case also requires much longer simulation times to estimate the asymptotic diffusion constant as finite time corrections seem to be more important. It is clearly much better to simulate the stochastic equation (10) and then determine the effective diffusion constant for the gradient flow problem using the relation equation (12). The results using this method for the case  $a = 0$  are shown in figure 4. We see that the results for three



**Figure 4.** Renormalization group prediction for  $\kappa_e$  for the case  $a = 0$  in 2 (solid line), 3 (dashed line) and 4 (dotted line) dimensions, confronted with numerical results deduced via the simulation of the random diffusivity problem and using equation (12) to estimate  $\kappa_e$  (2D circles, 3D squares and 4D stars). We see that the results are excellent and improve on increasing the spatial dimension.

and four dimensions are in excellent agreement with our analytical calculations and that for two dimensions the only discrepancy is at large positive values of  $\beta$ .

### 5. Conclusion and discussion

We have seen that the renormalization group scheme developed in [1, 2] can be refined to take into account non-Gaussian potentials. The new scheme retains the merit of reproducing exactly known results in lower dimensions and has good agreement with numerical simulations in cases where exact results are not known. The main breakthrough is that this scheme is capable of predicting dynamical phase transitions where the self-diffusion constant vanishes, a transition analogous to the glass transition. A key point in the analysis was to apply the approximate renormalization group not to the problem of diffusion in a random gradient field but to a mathematically related problem of diffusion in a random diffusivity field. This renormalization group calculation applied to this problem produces a form of the celebrated Landau–Lifshitz–Matheron conjecture from the field of random porous media as given in equation (44).

Of course, the problem we are considering is one with quenched disorder, in glass formers the disorder is thought to be somehow self-induced. Let us consider for a moment the problem of  $N$  Brownian particles (of bare diffusion constant 1) interacting via a pairwise potential  $u$ . The Langevin equation can be written as

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \eta - \beta \nabla v(\mathbf{X}). \tag{62}$$

Here the potential is given by

$$v(\mathbf{X}) = \sum_{i < j} u(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j), \tag{63}$$

i.e. the energy due to the pairwise interaction between particles. The corresponding permeability problem thus has

$$\kappa(\mathbf{x}) = \exp(-\beta v(\mathbf{x})). \tag{64}$$

Clearly, the system is not disordered but we shall treat it as it was and apply the formula (44) to estimate the self-diffusion constant. First we have

$$\langle \kappa(\mathbf{x}) \rangle = \frac{N!}{V^N} Z_N, \tag{65}$$

where  $V$  is the volume of the system,  $N$  is the number of particles (assumed indiscernible) and  $Z_N$  is the canonical partition function for the system. Here we have simply replaced the disorder average by the spatial average (this is in fact the correct average to make if one looks at the derivation of equation (12) [3, 8, 14]; it is replaced by a disorder average by appealing to ergodicity). If one introduces the free energy per particle  $f(\beta)$  we find that

$$\langle \kappa(\mathbf{x}) \rangle = \exp(-N(\beta f(\beta) - \ln(\rho) + 1)), \tag{66}$$

where  $\rho$  is the particle density  $\rho = N/V$ . Similarly we denote the dimension of the space of the diffusivity problem by  $D = Nd$  where  $d$  is the physical space dimension and find

$$\langle \kappa(\mathbf{x})^{1-\frac{2}{D}} \rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}} = \exp \left[ -N \left( \beta f \left( \beta \left( 1 - \frac{2}{D} \right) \right) - \frac{\ln(\rho) - 1}{\left( 1 - \frac{2}{D} \right)} \right) \right]. \tag{67}$$

We see that the above two quantities have logarithms which are extensive in  $N$ , but we expect the self-diffusion constant to be intensive. Remarkably, the ratio of the above two quantities is intensive and we find, to a leading order in  $N$ , that

$$\kappa_e = \exp \left( \frac{2\beta^2}{d} f'(\beta) + \frac{2 \ln(\rho) - 2}{d} \right). \tag{68}$$

Now we use the trivial thermodynamic identity that the entropy per particle is given by  $s = -\partial f / \partial T = \beta^2 \partial f / \partial \beta$  and also the fact that at  $\beta = 0$  we have  $s(0) = -\ln(\rho) + 1$ , to obtain

$$\begin{aligned} \kappa_e &= \exp \left( 2 \frac{(s(\beta) - s(0))}{d} \right) \\ &= \exp \left( \frac{2}{d} s_{ex}(\beta) \right), \end{aligned} \tag{69}$$

where  $s_{ex}$  is simply the excess entropy per particle with respect to the perfect gas. Thus the approximative line of mathematical reasoning we have followed has led to quite an interesting relation between a dynamic quantity (the diffusion constant) and a thermodynamic quantity (the excess entropy per particle). The celebrated Adam–Gibbs relation for glasses relates the relaxation time to the configurational entropy [25]. Here we have a relation between the self-diffusion constant and the full entropy and the relationship is quite different from the Adam–Gibbs form. However for some time in the chemical physics literature [26–29] it has been observed that the diffusion constant in molecular dynamics simulations, when written in a dimensionless form, can often be well fitted (in the denser phase) by the expression

$$\kappa = C \exp(A s_{ex}). \tag{70}$$

Now our computation is for Langevin systems, so one would have to coarse grain a real molecular dynamics to a Brownian level to determine  $\kappa_0$  (which here we have set to 1) for the effective Langevin dynamics. We thus cannot reasonably expect to predict the value  $C$  without further study. However our naive prediction would be  $A = 2/d$ . Numerical simulations [26] have revealed that  $A$  varies quite weakly depending on the species, and it is reported that

$A \approx 0.65$  for hard spheres and  $A \approx 0.8$  for Lennard–Jones fluids, both in three dimensions. In another study, it was proposed that  $A = 1$  [28] and the subject is still debated and studied (see [29]) for a recent review. Here we predict  $A = 2/3$  which is in intriguing agreement for the hard sphere result! The only other analytical derivation that we are aware of for relations of the type of equation (69) is via mode coupling theory (and thus quite different to that given here) [30] where the effect of mixtures was also included. It will be interesting to see if this last application of our method could be refined to treat mixtures and also it should be confronted with numerical simulations of Langevin systems [31]. Finally, we remark that equation (69) agrees with the first nontrivial order (which is  $O(\beta^2)$ ) with the weak coupling expansion introduced in [32] for the computation of the self-diffusion constant of interacting Langevin particles. However comparison with the  $O(\beta^3)$  term in the weak coupling expansion of [32] shows that equation (69) cannot be exact [31].

## References

- [1] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 5135
- [2] Deem M W and Chandler D 1994 *J. Stat. Phys.* **76** 911
- [3] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 2007 *J. Stat. Mech.* P07013
- [4] Drummond I T, Horgan R R and da Silva Santos C A 1998 *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** 1341
- [5] Risken H 1996 *The Fokker-Planck Equation* 3rd edn (Berlin: Springer)
- [6] Touya C and Dean D S 2007 *J. Phys. A: Math. Theor.* **40** 919
- [7] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 2039
- [8] Dean D S, Drummond I T, Horgan R R and Lefèvre A 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 10459
- [9] Matheron G 1967 *Eléments pour une théorie des milieux poreux* (Paris: Masson)
- [10] King P R 1987 *J. Math. Phys.* **20** 3935
- [11] Sposito G 2001 *Transport Porous Med.* **42** 181
- [12] Hristopulos D T 2003 *Water Resources* **26** 279
- [13] Eberhard J, Attinger S and Wittum G 2004 *Multiscale Model. Sim.* **2** 2259
- [14] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 1997 *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** 385
- [15] Dykhne A M 1971 *Sov. Phys.—JETP* **32** 63
- [16] Dykhne A M 1971 *Sov. Phys.—JETP* **32** 348
- [17] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 1995 *J. Phys. A: Math. Gen.* **28** 1235
- [18] De Wit A 1995 *Phys. Fluids* **72** 553
- [19] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 1997 *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** 385
- [20] Kraichnan R H 1976 *J. Fluid Mech.* **77** 753
- [21] Götze W 1989 *Liquids, Freezing and the Glass Transition* ed Les Houches (Amsterdam: North Holland)
- [22] Vilgis T A 1993 *Phys. Rev. B* **47** 2882
- [23] Drummond I T, Hoch A and Horgan R R 1986 *J. Phys. A: Math. Gen.* **19** 387
- [24] Honeycutt R L 1992 *Phys. Rev. A* **45** 600
- [25] Gutzow I and Schmelzer J 1995 *The Vitreous State* (Berlin: Springer)
- [26] Rosenfeld Y 1977 *Phys. Rev. A* **15** 2545
- [27] Rosenfeld Y 1999 *J. Phys.: Condens. Matter* **11** 5415
- [28] Dzugutov M 1996 *Nature* **381** 137
- [29] Mittal J, Errington J R and Truskett M 2007 *J. Phys. Chem. B* **111** 10054
- [30] Samanta A, Musharaf Aki Sk and Ghosh S W 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 245901
- [31] Dean D S and Touya C in preparation
- [32] Dean D S and Lefèvre A 2004 *Phys. Rev. E* **69** 061111



## Dipole diffusion in a random electrical potential

J. Phys. A : Math. Theor. **42**, 9375001 (2009).

# Dipole diffusion in a random electrical potential

Clément Touya, David S Dean and Clément Sire

Laboratoire de Physique Théorique, IRSAMC, Université de Toulouse, CNRS, 31062 Toulouse, France

Received 12 June 2009, in final form 28 July 2009

Published 25 August 2009

Online at [stacks.iop.org/JPhysA/42/375001](http://stacks.iop.org/JPhysA/42/375001)

## Abstract

We study the Langevin dynamics of a dipole diffusing in a random electrical field  $\mathbf{E}$  derived from a quenched Gaussian potential. We show that in a suitable adiabatic limit (where the dynamics of the dipole moment is much faster than the dynamics of its position), one can reduce the coupled stochastic equations to an effective Langevin equation for a particle diffusing in an effective potential with a spatially varying and anisotropic local diffusivity  $\kappa_{ij}$ . Analytic results, close to the adiabatic limit, for the diffusion constant  $\kappa_e$  are found in one dimension and a finite temperature dynamical transition is found. The system is also studied numerically. In particular, we study the anomalous diffusion exponent in the low-temperature regime. Our findings strongly support the conclusion that the location of the dynamical transition and the anomalous diffusion exponents are determined by purely static considerations, i.e. they are independent of the relative values of the diffusion constants of the particle position and its dipole moment.

PACS number: 05.10.Gg

(Some figures in this article are in colour only in the electronic version)

## 1. Introduction

Computing bulk transport properties in random media is an important physical problem [1–8] having many applications. Two important models of random media have widely been studied (i) where the randomness is due to a random potential and (ii) where the local diffusion constant is random. There are mathematical relations between the problems (i) and (ii) and problems of type (ii) are also related to a wide variety of physical problems such as the effective conductivity and dielectric constants of random conductors and dielectrics and the effective permeability of porous media [1]. An important quantity to understand those properties is the *late time diffusion constant* of a Brownian tracer particle in interaction with the medium. In the system we will study, the local transport properties are modified by the interaction of the dipole moment of the tracer particle with a random electric field drawn from an appropriate

statistical ensemble. If the electric field disorder is statistically invariant under translation and short range correlated in space, we expect that the diffusion constant and mobility due to an applied force are self-averaging in the regime where the diffusion is normal. If the transport is normal, then in the long time limit ( $t \rightarrow \infty$ ), the mean-squared displacement of the particle position behaves as

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle \sim 2D\kappa_e t, \quad (1)$$

where  $D$  is the dimension of space and  $\kappa_e$  is the late time diffusion or the effective diffusion constant. In general there are subdominant corrections to the above, which depend strongly on the dimensionality of the problem [9, 10].

If the random field is frozen or evolves over very long timescales with respect to those of the tracer particle, then one is in the situation of *quenched disorder*, where the potential does not depend on time. The motivation for studying models of particles diffusing in a random potential comes from the fact that such systems arise very naturally in nature; for instance in zeolites where random electric fields are generated by the presence of frozen charged impurities [11]. If the particle has a net charge, then the particle interacts with the electric field and the case of diffusion in a quenched scalar field has been extensively studied in the literature [1–3, 10, 12]. However, if the particle is polarizable but without charge, it also interacts with the field. In this case, the problem is quite different and much less well studied [12, 13]. We also note that systems with quenched disorder, spin glasses for example, are often good paradigms for systems having structural glass transition (where no random field is present). It is often argued heuristically, that for sufficiently complex and frustrated systems, a single particle in the system sees an effectively random potential due to the other particles. At a mean field level, there exist models where this analogy has been used successfully to analyse the statistical mechanics of frustrated but non-disordered models. In practice one can have two models, one with quenched disorder and the other without but highly frustrated, which exhibit the same thermodynamics in the high temperature phase and the same glass transition at low temperatures [14–16]. Even if the frustrated non-random system possesses a crystalline ground state, not shared by the disordered system, this fact is practically irrelevant as this state is dynamically never attained. Therefore, these models are often adopted as toy models for structural glass transition. In the liquid phase, we expect the tracer particle to have a non-zero diffusion constant  $\kappa_l$ . Now consider the situation in which the same particle diffuses in a quenched background, where all the other particles have been frozen in a particular configuration. A realistic choice would be to select a configuration from a Gibbs–Boltzmann equilibrium ensemble. If  $\kappa_e$  is the diffusion constant, it has been shown [17, 18] that  $\kappa_e < \kappa_l$  which makes physical sense, because if the background particles can move about, the cages, which trap the tracer, will break up on some timescale and free it to disperse more quickly than in the quenched case. Moreover, in some special cases,  $\kappa_e$  can vanish at a critical temperature or disorder strength [10, 12]. If the system has a finite correlation length  $l_0$  (which will be the case, as our field will be short range correlated), the diffusion constant can be used to give an effective relaxation time  $\tau$

$$\tau \sim \frac{l_0^2}{\kappa_e}. \quad (2)$$

If  $\kappa_e \rightarrow 0$ , it means that we have a diverging timescale in the same way in which a structural glass has a diverging timescale which, experimentally, can be extracted from the divergence of the liquid's viscosity.

In this paper we study the physical case of dipoles diffusing in a random electric field  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  which is spatially varying but time independent (or quenched). It is generated by a random potential  $\phi(\mathbf{x})$  which gives  $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla\phi(\mathbf{x})$ , with the correlation function

$$\langle\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}')\rangle = \Delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|). \quad (3)$$

The potential  $\phi(\mathbf{x})$  is thus statistically isotropic and invariant by translation in space. The most convenient choice is to take  $\phi$  to be Gaussian. If the dipole moment, denoted by  $\mathbf{p}$ , is modelled as two opposite charges connected to a Harmonic spring and  $\mathbf{x}$  denotes the position of the dipole centre, then the total energy of a particle at the point  $(\mathbf{p}, \mathbf{x})$  is given by

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\chi}\mathbf{p}^2 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}). \quad (4)$$

The first term is the Harmonic energy of the spring, and  $\chi$  is simply the dipole polarizability. The second term is the energy of the dipole's interaction with the field  $\mathbf{E}$ . The partition function for the system, where  $\mathbf{x}$  is confined to a volume denoted by  $\mathcal{V}$  of a  $D$  dimensional space, is given, up to an overall factor, by

$$Z = \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{x} \int_{\mathbb{R}^D} d\mathbf{p} \exp\left(-\beta\frac{\mathbf{p}^2}{2\chi} + \beta\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x})\right), \quad (5)$$

where  $\beta = 1/k_B T$  is the inverse temperature. If we trace over the dependence on  $\mathbf{p}$ , we find an effective partition function for the variable  $\mathbf{x}$  given, again up to a constant, by

$$Z_{eff} = \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{x} \exp(-\beta V(\mathbf{x})), \quad (6)$$

where  $V$  is the effective potential for  $\mathbf{x}$  and is given by

$$V(\mathbf{x}) = -\frac{\chi\mathbf{E}^2(\mathbf{x})}{2}. \quad (7)$$

This represents the case where the dipole moment adapted instantaneously to the external field and motivated the study in [10, 12] of diffusion in non-Gaussian potentials. In [10] the diffusion constant for a particle diffusing in non-Gaussian potentials such as given by equation (7) was computed exactly in one dimension, and in [12] a self-renormalization group scheme was developed to study the problem in higher dimensions.

In [10, 12] a critical temperature at which the diffusion constant vanishes, signalling a dynamical transition from a normal diffusive regime to a subdiffusive regime, was identified. We thus expect that, in a suitable adiabatic limit where the dynamics of the dipole degree of freedom  $\mathbf{p}$  is much more rapid than that of the spatial variable  $\mathbf{x}$ , the effective potential seen by the variable  $\mathbf{x}$  is  $V$  as defined by equation (7).

If we take an overdamped Langevin dynamics for both the dipole and positional degrees of freedom, the equations of motion are given by

$$\frac{dx_i}{dt} = \beta\kappa_x p_j \frac{\partial E_j}{\partial x_i} + \sqrt{2\kappa_x}\eta_{x_i} \quad (8)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\kappa_p \beta \left(\frac{p_i}{\chi} - E_i\right) + \sqrt{2\kappa_p}\eta_{p_i}. \quad (9)$$

In the above equations  $\kappa_x$  is the bare diffusion constant for the spatial variable and the other diffusion constant  $\kappa_p$  sets the timescale for the relaxation of the dipole and the adiabatic limit is where  $\kappa_p \rightarrow \infty$ . In principle both diffusion constants depend on the temperature but for notational simplicity this dependence is suppressed. In the dynamical equations (8) and (9), terms of the form  $A_i$  represent the component of the vector  $\mathbf{A}$  in the direction  $i$ ; we have also

used the Einstein summation convention and will stick with this convention throughout the paper. The noise terms are white noise and their correlation functions are given by

$$\langle \eta_{p_i}(t)\eta_{p_j}(s) \rangle = \langle \eta_{x_i}(t)\eta_{x_j}(s) \rangle = \delta_{ij}\delta(t-s) \quad \text{and} \quad \langle \eta_{p_i}(t)\eta_{x_j}(s) \rangle = 0. \quad (10)$$

If we rewrite (9) and substitute it into equation (8) we find

$$\frac{dx_i}{dt} = \sqrt{2\kappa_x}\eta_{x_i} + \kappa_x\beta \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\chi E_j^2}{2} - \frac{\kappa_x}{\kappa_p}\chi \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \left( \frac{dp_j}{dt} - \sqrt{2\kappa_p}\eta_{p_j} \right). \quad (11)$$

If we now take the adiabatic limit ( $\kappa_p \gg \kappa_x$ ), equation (11) reduces to the Langevin equation for a particle in the potential  $V(\mathbf{x})$  defined by equation (7). In the appendix, we rederive this result in a more rigorous way and also see, at first order, the effect of a finite value of  $\kappa_p$ . We thus expect that for very large values of  $\kappa_p$ , we find the same dynamics for  $\mathbf{x}$  studied in [10, 12, 13]. Consequently there should also be a dynamical transition in this problem when the field  $\phi$  is Gaussian. We can now ask the question, what happens if the timescale for the relaxation of the dipole moment is non-zero? Will the dynamical transition remain or is it a pathology of the limit  $\kappa_p \rightarrow \infty$ ?

In the appendix we derive the effective dynamics for the marginal distribution of  $\mathbf{x}$  to order  $\kappa_x/\kappa_p$ . To this order the effective dynamics of  $\mathbf{x}$  can still be described by a Langevin equation, with the same potential as equation (7) but with a spatially varying non-isotropic diffusion constant. This is a rather remarkable fact and can be shown using operator projection techniques [19]. However we will present a derivation based on a direct manipulation of the Langevin equations similar to that of [20]. We chose this route as it gives a physical feeling for why the effective process for  $\mathbf{x}$  is to this order Markovian and also because the computation in spaces of dimension greater than 1 is more straightforward within this formalism. We also compute the first-order corrections to the effective diffusion constant in the high temperature limit via a Kubo formula for the effective diffusion constant.

In section 3 we present the exact result for the diffusion constant in one dimension. In section 4 we confront our results with numerical simulation (stochastic second-order Runge–Kutta) of the coupled Langevin equations (8) and (9) in the diffusive and sub-diffusive regimes. Finally in section 5 we will conclude and discuss our results.

## 2. Large $\kappa_p$ and small $\beta$ approximations

The timescale for the relaxation of the dipoles should be proportional to  $\kappa_p^{-1}$  and thus the adiabatic limit (where the dipoles adapt very quickly to the local field) will correspond to the limit where  $\kappa_p$  becomes large. Interestingly, in this limit, one can simplify the coupled equations (8) and (9) to an effective Langevin equation for  $\mathbf{x}$  up to the order  $O(\kappa_x/\kappa_p)$  by direct manipulation of the Langevin equations [20]. The exact derivation is a little long and technical and for clarity's sake it is thus given in the appendix. As a result, we can write the following Fokker–Planck equation which describes the effective process for  $\mathbf{x}$ ,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = H\rho = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \kappa_{ki} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \beta \rho \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) \right] \quad (12)$$

where  $V$  is the effective potential given by equation (7) and  $\kappa_{ij}$  is a spatially varying and anisotropic diffusivity tensor given by

$$\kappa_{ij} = \kappa_x \left[ \delta_{ij} - \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \chi^2 \frac{\partial E_k}{\partial x_i} \frac{\partial E_k}{\partial x_j} \right]. \quad (13)$$

The Fokker–Planck equation (12) has the correct Gibbs–Boltzmann equilibrium distribution with the effective potential  $V$  and from this one can write a Langevin equation which corresponds to the process

$$\frac{dx_i}{dt} = -\beta\kappa_x \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\chi E_j^2}{2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \kappa_{ij} + \sqrt{2\kappa_{ij}} \eta_i. \quad (14)$$

We note that if we take the limit where  $\kappa_p \rightarrow \infty$  in (14), the diffusivity reduces to  $\kappa_{ij} = \kappa_x \delta_{ij}$  and we recover the Langevin equation for a particle in the potential  $V(\mathbf{x})$  rigorously. In equation (A.21) of the appendix we performed an expansion in  $\alpha^{-1}$  (with  $\alpha = \kappa_p \beta / \chi$ ) and assumed  $\alpha$  to be large. However if  $\kappa_p$  is large but finite we see that as  $\beta$  becomes small (the high temperature limit) the expansion will fail. To predict the behaviour of  $\kappa_e$  at high temperature we will thus use a Kubo formula for the effective diffusion constant. Integrating the stochastic differential equation (8) between 0 and  $t$  we have

$$x_i(t) - x_i(0) = \sqrt{2\kappa_x} B_i(t) + \beta\kappa_x \int_0^t ds p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)), \quad (15)$$

where  $\mathbf{B}_t$  is a standard  $D$ -dimensional Brownian motion with  $\langle \mathbf{B}_t^2 \rangle = 2Dt$  and  $x_i(0)$  is the initial position in the direction  $i$ . Thus squaring the above equation and taking the average yields

$$\begin{aligned} 2\kappa_x t = \langle (x_i(t) - x_i(0))^2 \rangle + 2\kappa_x \beta \left\langle (x_i(t) - x_i(0)) \cdot \int_0^t ds p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \right\rangle \\ + (\kappa_x \beta)^2 \int_0^t ds \int_0^s ds' \langle p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) p_k(s') \cdot \nabla_i E_k(\mathbf{x}(s')) \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Using the property of detail balance, which ensures time translation invariance at equilibrium, we have for any two functions  $A$  and  $B$  that

$$\langle A(\mathbf{x}(t)) B(\mathbf{x}(s)) \rangle = \langle A(\mathbf{x}(t-s)) B(\mathbf{x}(0)) \rangle, \quad (17)$$

and the Onsager symmetry relation

$$\langle A(\mathbf{x}(t)) B(\mathbf{x}(s)) \rangle = \langle B(\mathbf{x}(t)) A(\mathbf{x}(s)) \rangle. \quad (18)$$

Assuming that the system starts in equilibrium<sup>1</sup> one can thus apply (17) and (18) to the second term of (16) and show that it should vanish

$$\begin{aligned} \left\langle (x_i(t) - x_i(0)) \cdot \int_0^t ds p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \right\rangle \\ = \int_0^t ds [\langle x_i(t) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle - \langle x_i(0) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle] \\ = \int_0^t ds [\langle x_i(t-s) p_j(0) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(0)) \rangle - \langle x_i(0) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle] \\ = \int_0^t ds [\langle p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) x_i(0) \rangle - \langle x_i(0) p_j(s) \cdot \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s)) \rangle] \\ = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Thus, (16) reduces to

$$\begin{aligned} \langle (x_i(t) - x_i(0))^2 \rangle = 2\kappa_x t \\ - (\kappa_x \beta)^2 \int_0^t ds \int_0^s ds' \langle p_j(s-s') p_k(0) \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s-s')) \nabla_i E_k(\mathbf{x}(0)) \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

<sup>1</sup> We assume that the system is in equilibrium in a finite volume and the subsequent late time diffusion constant is computed at times such that the particle has diffused over a distance much larger than the system's correlation length but much smaller than the system's size.

This equation is however exact and can be evaluated to order  $\mathbf{E}^2$  by calculating the integral on its right-hand side using the statistics for  $\mathbf{x}$  and  $\mathbf{p}$  in the absence of  $\mathbf{E}$ , i.e. in the weak disorder limit which should become exact at high temperatures. Here  $\mathbf{p}$  and  $\mathbf{x}$  are purely Gaussian with correlation functions

$$\langle p_j(s)p_k(0) \rangle = \frac{\chi}{\beta} \exp\left(-\frac{\kappa_p \beta}{\chi} s\right) \delta_{jk}, \quad (21)$$

and

$$\langle (x_i(t) - x_j(0))^2 \rangle = 2\delta_{ij}\kappa_x t. \quad (22)$$

This approximation yields

$$\begin{aligned} & \langle p_j(s - s')p_k(0)\nabla_i E_j(\mathbf{x}(s - s'))\nabla_i E_k(\mathbf{x}(0)) \rangle \\ &= \frac{\chi}{\beta} \exp\left(-\frac{\kappa_p \beta}{\chi}(s - s')\right) \langle \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s - s'))\nabla_i E_k(\mathbf{x}(0)) \rangle \delta_{jk}. \end{aligned} \quad (23)$$

Summing over the spatial indices then gives

$$\kappa_e = \kappa_x - \frac{\kappa_x^2 \beta \chi}{Dt} \int_0^t ds \int_0^s ds' \exp\left(-\frac{\kappa_p \beta}{\chi}(s - s')\right) \langle \nabla_i E_j(\mathbf{x}(s - s'))\nabla_i E_j(\mathbf{x}(0)) \rangle. \quad (24)$$

The correlation function of the random field component in the above can be computed in terms of the correlation function  $\Delta(\mathbf{x})$  of the random electrostatic field  $\phi$ :

$$\begin{aligned} \langle (\nabla_i E_j \mathbf{x}(s - s'))\nabla_i E_j(\mathbf{x}(0)) \rangle &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \tilde{\Delta}(\mathbf{k}) \mathbf{k}^4 \langle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}(s - s')) \rangle \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \tilde{\Delta}(\mathbf{k}) \mathbf{k}^4 \exp(-\mathbf{k}^2 \kappa_x (s - s')), \end{aligned} \quad (25)$$

where  $\tilde{\Delta}(\mathbf{k})$  is the Fourier transform of  $\Delta(\mathbf{x})$ . Finally, we are left with a simple double integration over  $s$  and  $s'$ , and from the large time behaviour we can extract  $\kappa_e$  as

$$\kappa_e = \kappa_x - \frac{\kappa_x^2 \beta \chi}{D} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{\tilde{\Delta}(\mathbf{k}) \mathbf{k}^4}{\mathbf{k}^2 \kappa_x + \frac{\kappa_p \beta}{\chi}}. \quad (26)$$

### 3. Analytic results in one dimension

In the previous section, all the results we derived were for an arbitrary dimension  $D$ . To analyse our results to first order beyond the adiabatic limit, we will restrict our study to the one-dimensional case where one can compute exactly the diffusion constant  $\kappa_e$  for the effective Fokker–Planck equation (12). We apply the general results of [1] to compute the effective diffusivity via a static problem:

$$\kappa(x) \left( \frac{d\rho}{dx} + \beta\rho \frac{dV}{dx} \right) = j, \quad (27)$$

where  $j$  is the current and  $\kappa(x)$  is the spatially varying diffusivity in one dimension

$$\kappa(x) = \kappa_x \left[ 1 - \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \chi^2 \left( \frac{dE(x)}{dx} \right)^2 \right]. \quad (28)$$

We can solve (27) and find

$$\rho(x) = j e^{-\beta V(x)} \int_0^x \frac{e^{\beta V(y)}}{\kappa(y)} dy. \quad (29)$$

The diffusion constant  $\kappa_e$  is then given as  $\kappa_e \langle \frac{d\rho}{dx} \rangle = j$  where  $\langle \cdot \rangle$  is the average over the disorder in the random electrical field. This gives

$$\kappa_e \left\langle \frac{d\rho}{dx} \right\rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\kappa_e j}{L} \left\langle e^{-\beta V(L)} \int_0^L \frac{e^{\beta V(y)}}{\kappa(y)} dy \right\rangle = j, \quad (30)$$

and finally

$$\kappa_e = \frac{1}{\langle e^{-\beta V} \rangle \left\langle \frac{e^{\beta V}}{\kappa} \right\rangle}. \quad (31)$$

This result can also be obtained via a first passage time argument [21, 22]. The electrical potential  $\phi(x)$  is Gaussian and if we choose a correlator of the form  $\Delta(x) = f(x^2)$ , where  $f$  is analytic at  $x = 0$ , then we find that  $\langle E^2(0) \rangle = -2f'(0)$ , and  $\langle E'(0)E(0) \rangle = 0$ . Therefore,  $E'$  and  $E$  are uncorrelated and we can write

$$\kappa_e = \frac{\langle \kappa^{-1} \rangle^{-1}}{\langle e^{-\beta V} \rangle \langle e^{\beta V} \rangle}. \quad (32)$$

In [10] (corresponding to the adiabatic case here) it was shown that the dynamical transition could be identified, via an Arrhenius-type argument, with the divergence of one or other of the first two terms on the denominator of the equation above. We thus see that to first order beyond the adiabatic approximation the location of the transition temperature should be the same in the adiabatic limit and close to this limit.

In the numerical simulations we will carry out we take the choice of correlation function  $f(u) = \exp(-\frac{1}{2}u)$  for which we find

$$\kappa_e = \kappa_x (1 - \chi^2 \beta^2)^{1/2} \left( 1 - \frac{\kappa_x \chi^2}{\kappa_p} \right). \quad (33)$$

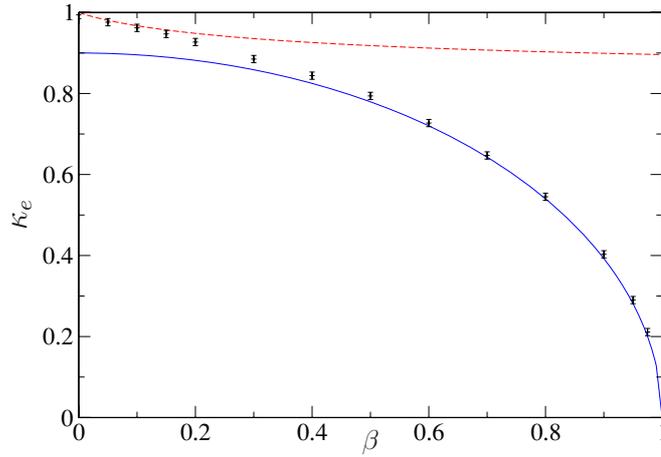
#### 4. Numerical simulations

In this section we test our analytical predictions against numerical simulations of the Langevin equations (8) and (9) in one dimension. In our simulation, we set the diffusion constant without disorder  $\kappa_x$  to 1 for convenience and we used rescaled variables  $p_i = \tilde{p}_i \sqrt{\kappa_p}$  and  $E_i = \tilde{E}_i \sqrt{\kappa_p}$ , so that both equations have the same timescale,

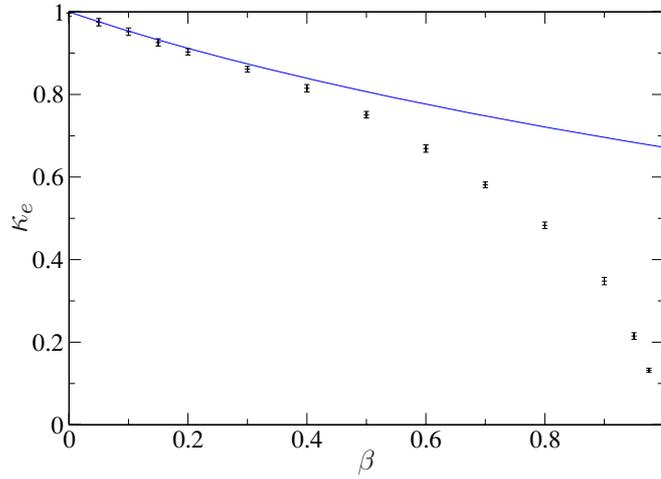
$$\frac{dx_i}{dt} = \beta \kappa_p \tilde{p}_j \frac{\partial \tilde{E}_j}{\partial x_i} + \sqrt{2} \eta_{x_i} \quad (34)$$

$$\frac{d\tilde{p}_i}{dt} = -\kappa_p \beta \left( \frac{\tilde{p}_i}{\chi} - \tilde{E}_i \right) + \sqrt{2} \eta_{p_i}. \quad (35)$$

The coupled stochastic differential equations were integrated using second-order Runge–Kutta integration schemes developed in [23, 24] and reviewed in [1] with a time step  $\Delta t = 0.001$ . In all simulations the effective diffusion constant for a given realization of the disorder was obtained by fitting the mean-squared displacement averaged over 2000 particles at late times. The time of the simulation was chosen so that particles had typically diffused ten or so correlation lengths of the field. The fit of the average mean-squared displacement was done over the last half of the time of the simulation (to ensure that the mean-squared displacement is well within the linear regime) by a nonlinear form:  $at + bt^\theta$ , with  $\theta < 1$ . The correction to the linear term has to be taken into account as it becomes more and more relevant close to the transition due to the slowing down of the dynamics [10].



**Figure 1.** Numerical value of  $\kappa_e$  (stars) for  $\kappa_p = 10$ , compared with analytical results (26) (dashed line) and (33) (solid line).



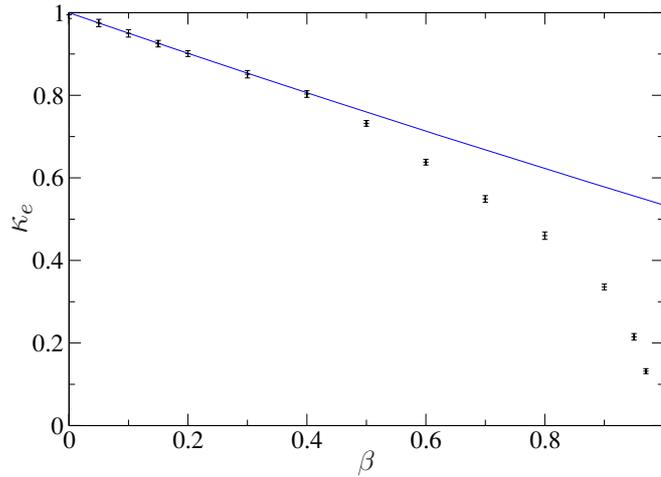
**Figure 2.** Numerical value of  $\kappa_e$  (plus) for  $\kappa_p = 1$ , compared with analytical results (26) (solid line).

To generate the Gaussian field characterized by a correlator (3), we used the technique presented in [25, 26]. The process can be written in a general form

$$\phi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x - x')\eta(x') dx', \tag{36}$$

where  $K$  is a kernel function and  $\eta(x)$  is a Gaussian white noise. The linear form of (36) ensures that  $\phi(x)$  is a Gaussian process and the translational invariance of the kernel  $K(x - x')$  ensures its stationarity. Now taking the Fourier transform defined by  $\tilde{\phi}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) \exp(-i\omega x) dx$  of (36), we find

$$\tilde{\phi}(\omega) = \tilde{K}(\omega)\tilde{\eta}(\omega). \tag{37}$$



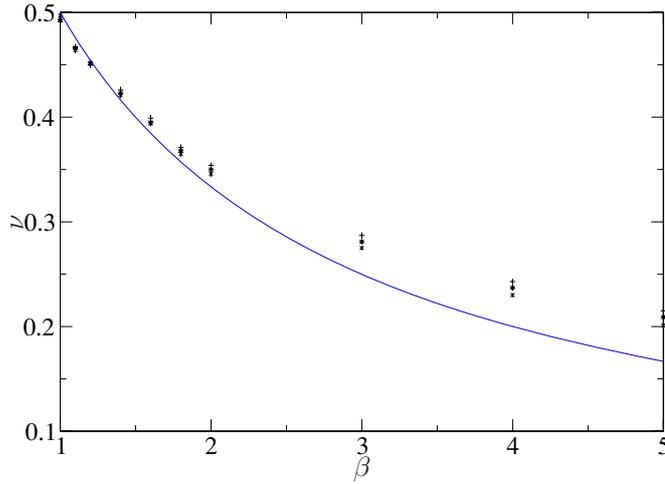
**Figure 3.** Numerical value of  $\kappa_e$  (plus) for  $\kappa_p = 0.1$ , compared with analytical results (26) (solid line).

If we now take the Fourier transform of the correlator (3) and the correlator  $\langle \phi(\omega)\phi(\omega') \rangle$  from (37), then by identification we have  $\tilde{\Delta}(\omega) = |\tilde{K}(\omega)|^2$  and thus from (37),

$$\tilde{\phi}(\omega) = \sqrt{\tilde{\Delta}(\omega)}\tilde{\eta}(\omega). \quad (38)$$

We can now create  $\phi(x)$  by sampling  $\tilde{\phi}(\omega)$  on a frequency mesh and taking the inverse fast Fourier transform (FFT). In [10, 12], the authors used a method due to Kraichnan [1, 27] which gives some finite size corrections for the diffusion constant close to the transition. However as we wish to precisely locate the transition and tests its dependence on  $\kappa_p$  (and as we do not have analytical results for all parameter ranges) we use this FFT-based method. Again we take a correlator of the form  $\Delta(x) = \exp(-\frac{1}{2}x^2)$  and we average our sample over 2000 realizations of the field. In all our simulation we set  $\chi = 1$ . We measured the average value of  $\kappa_e$  over the field with an error bar estimated from the standard deviation from sample to sample. The result in one dimension is compared in figure 1 for  $\kappa_p = 10$  with the analytical result (33) and the Kubo formula (26). As expected, we are well in the adiabatic regime and (33) is in very good agreement with the numerical simulations. Moreover, we find a dynamical transition at  $\beta_c = 1$  where the diffusion constant becomes zero, and below the critical temperature  $T_c$  the diffusion turns out to be anomalous (see later). Finally, the agreement between (33) and the numerical results breaks down at high temperature, but fortunately in this regime the results agree with the weak disorder/high temperature analytical expression (26). We have thus a crossover between two analytical approximations which allows us to predict the behaviour of  $\kappa_e$  in the whole normal diffusion regime.

Beyond the adiabatic approximation, that is to say when  $\kappa_p$  is of the same order as  $\kappa_x$  or smaller, we lack analytical results (except for weak disorder), thus we must calculate  $\kappa_e$  numerically. The results are plotted in figure 2 for  $\kappa_p = 1$  and figure 3 for  $\kappa_p = 0.1$  and compared with the weak disorder result of equation (26). In both cases, the transition still appears to occur at, or very close to, the same critical temperature  $T_c = 1$ . Moreover, the diffusion constant clearly decreases monotonically with the value of  $\kappa_p$  at fixed temperature.



**Figure 4.** Numerical value of  $\nu$  (cross) for  $\kappa_p = 10$ , (stars) for  $\kappa_p = 1$  and (plus) for  $\kappa_p = 0.1$  compared with analytical results (40) (solid line) in the low-temperature phase.

The low temperature phase, below  $T_c$ , is characterized by an anomalous sub-diffusive behaviour

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0))^2 \rangle \sim Ct^{2\nu}, \tag{39}$$

where the exponent associated with the anomalous diffusion  $\nu < 1/2$ . The subject of anomalous diffusion in disordered media has extensively been studied and a good review of it can be found in [9]. In the case of  $\kappa_p \rightarrow \infty$  the authors in [10] were able to evaluate  $\nu$  by means of first passage calculation and replica trick and they found

$$\nu = \frac{1}{1 + \beta}. \tag{40}$$

We plot in figure 4 the value of the exponent  $\nu$  fitted from simulations with (39) for different values of  $\kappa_p$ . The results agree relatively well with equation (40) for temperatures below but close to the transition temperature. However for very low temperature, the exponent is significantly larger than that predicted by equation (40). However we have verified that as the time of the simulation is increased, the measured exponent appears to decrease (indeed this was the case in [10] where analytical results and an effective trap model were available to identify the correct exponent).

### 5. Conclusions and discussion

We have studied the dynamics of a dipole diffusing in a random electrical field  $\mathbf{E}$  derived from a quenched Gaussian potential. In the adiabatic limit (where the dipoles adapt very quickly to the local field), we showed that the coupled stochastic equation can be reduced, up to the order  $O(\kappa_x/\kappa_p)$ , to an effective Langevin equation for a particle diffusing in an effective potential with a spatially varying and anisotropic local diffusivity  $\kappa_{ij}$ . In one dimension, we could compute exactly the diffusion constant of this process and we found a dynamical transition at finite temperature  $\beta_c = 1$  with a crossover between a diffusive and a sub-diffusive regime. The validity of the effective Langevin equation (14) breaks down for small  $\beta$ , but

a high-temperature treatment allowed us to compute a Kubo formula of  $\kappa_e$  for a given value of  $\kappa_p$ . We numerically checked our analytical predictions in one dimension, finding good agreement and confirming the presence of the transition. We also ran simulations far from the adiabatic regime and found strong indications that the transition remains at, or close to, the same  $\beta_c$  as for the adiabatic limit. Finally, we performed extensive numerical simulations in the low-temperature phase to compute the anomalous exponent  $\nu$ . We found that it does not depend on the relative values of diffusion constants of the particle's position and dipole moment and agrees rather well with a calculation made for the adiabatic case [10].

In [12], the authors showed that in higher dimensions, for the adiabatic case  $\kappa_p \rightarrow \infty$ , the same type of dynamical transition is also present. It would be interesting to investigate the dipole problem in higher dimensions to see if the conclusions of our current study remain valid. It would also be interesting to see if renormalization group type treatments or other approximation schemes could be developed in order to obtain analytical results in higher dimensions.

### Appendix. Derivation of the effective long-time Langevin equation for $\mathbf{x}$

This appendix gives the detail of the calculation of the effective long-time Langevin equation for  $\mathbf{x}$ . The first step is to formally integrate equation (9) for the variable  $\mathbf{p}$  to obtain

$$p_i(t) = p_i(0) \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}t\right) + \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \kappa_p \beta E_i(\mathbf{x}(s)) + \sqrt{\frac{2}{\kappa_p}} \frac{\chi}{\beta} \zeta_i(t), \quad (\text{A.1})$$

where

$$\zeta_i(t) = \frac{\kappa_p \beta}{\chi} \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \eta_{p_i}(s) \quad (\text{A.2})$$

is a coloured noise. At late times the first term of equation (A.1) is exponentially suppressed and can thus be dropped giving

$$p_i(t) = \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \kappa_p \beta E_i(\mathbf{x}(s)) + \sqrt{\frac{2}{\kappa_p}} \frac{\chi}{\beta} \zeta_i(t). \quad (\text{A.3})$$

Substituting this into equation (8) yields

$$\frac{dx_i}{dt} = \beta\kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \left[ \int_0^t ds \exp\left(-\frac{\beta\kappa_p}{\chi}(t-s)\right) \kappa_p \beta E_j(\mathbf{x}(s)) + \sqrt{\frac{2}{\kappa_p}} \frac{\chi}{\beta} \zeta_j(t) \right] + \sqrt{2\kappa_x} \eta_{x_i}. \quad (\text{A.4})$$

To proceed further we will find an effective Fokker–Planck equation corresponding to the stochastic equation (A.4). We follow the standard procedure of evaluating the change of an arbitrary function of  $x(t)$ :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \int d\mathbf{x} \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} f(\mathbf{x}) \\ &= \int d\mathbf{x} H \rho(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}) \\ &= \int d\mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t) H^\dagger f(\mathbf{x}) = \langle H^\dagger f(\mathbf{x}(t)) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

where  $\rho(\mathbf{x}, t)$  is the probability density for the process  $\mathbf{x}$  at time  $t$ . The operator  $H$  is the forward Fokker–Planck operator and  $H^\dagger$  is its adjoint commonly called the backward Fokker–Planck

operator. We now write using the Stratonovich prescription for white noise in stochastic calculus (where normal differentiation applies) to give

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} f(\mathbf{x}(t)) \frac{d\mathbf{x}_i(t)}{dt} \right\rangle \\ &= T_1 + T_2 + T_3. \end{aligned} \tag{A.6}$$

The first term is

$$T_1 = \sqrt{2\kappa_x} \langle \nabla_i f(\mathbf{x}(t)) \eta_{x_i} \rangle, \tag{A.7}$$

which can be evaluated via Novikov's theorem as

$$T_1 = \sqrt{2\kappa_x} \left\langle \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \int_0^t ds \frac{\delta x_j(t)}{\delta \eta_{x_i}(s)} \langle \eta_{x_i}(s) \eta_{x_i}(t) \rangle \right\rangle, \tag{A.8}$$

which is true for any Gaussian noise. Now for a white noise correlation, if we work with a symmetrized Dirac delta function corresponding to the Stratonovich prescription, the above integral picks up half the weight of the delta function. And we obtain

$$T_1 = \sqrt{\frac{\kappa_x}{2}} \left\langle \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\delta x_j(t)}{\delta \eta_{x_i}(s)} \Big|_{s=t} \right\rangle. \tag{A.9}$$

The functional derivatives required in the above calculations can be evaluated using a path integral formalism as in [20]. However they can also be obtained directly from the stochastic equation as follows. Consider a general differential equation of the form

$$\frac{dx_i}{dt} = W_i + B_{ij} \xi_j. \tag{A.10}$$

In order to compute  $\frac{\delta x_i(t)}{\delta \xi_j(s)}$  one can define the process

$$\frac{dx_i^\epsilon}{dt} = W_i + B_{ij} (\xi_j + \epsilon_j \delta(t - s)). \tag{A.11}$$

Now from one of the standard definitions of the functional integral we have

$$\frac{\delta x_i(t)}{\delta \xi_j(s)} = \frac{\partial x_i^\epsilon(t)}{\partial \epsilon_j} \Big|_{\epsilon=0}. \tag{A.12}$$

Integration of equation (A.11) in an infinitesimal interval about  $t = s$  yields

$$x^\epsilon(t^+) = x(t^-) + B_{ij} \epsilon_j, \tag{A.13}$$

as long as the  $W_i$  do not depend on the derivative of  $x$ . We see that in the case considered here the  $W_i$  will be continuous at  $s = t$  and thus give no contribution to the functional derivative. This thus yields

$$\frac{\delta x_i(t)}{\delta \xi_j(s)} \Big|_{s=t} = B_{ij}. \tag{A.14}$$

Using this result we obtain

$$\frac{\delta x_j(t)}{\delta \eta_{x_i}(s)} \Big|_{s=t} = \sqrt{2\kappa_x} \delta_{ij}, \tag{A.15}$$

which upon substitution into equation (A.9) gives

$$T_1 = \kappa_x \left\langle \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} f(\mathbf{x}_t) \right\rangle. \tag{A.16}$$

This is the familiar Laplacian form arising for standard white noise. The second term  $T_2$  is given by

$$T_2 = \sqrt{2\kappa_x\chi} \sqrt{\frac{\kappa_x}{\kappa_p}} \left\langle \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \zeta_j(t) \right\rangle. \quad (\text{A.17})$$

Once again using Novikov's theorem we find

$$T_2 = \sqrt{2\kappa_x\chi} \sqrt{\frac{\kappa_x}{\kappa_p}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \int_0^t ds \frac{\delta x_k(t)}{\delta \zeta_i(s)} \langle \zeta_j(t) \zeta_i(s) \rangle. \quad (\text{A.18})$$

The correlation function of the Gaussian field  $\zeta$  is easily computed and is given for  $t > s$  by

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(s) \rangle = \alpha^2 \int_0^s du \exp(-\alpha(t + s - 2u)t), \quad (\text{A.19})$$

where  $\alpha = \kappa_p \beta / \chi$ . At large  $t$  and  $s$  this becomes

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(s) \rangle = \frac{\alpha \delta_{ij}}{2} \exp(-\alpha(t - s)). \quad (\text{A.20})$$

We now consider the action of this correlation function as an operator on an arbitrary function  $g(s)$  via the following operator expansion

$$\int_0^t ds \exp(-\alpha s) g(t - s) = \frac{1}{\alpha} \left[ g(t) - \frac{1}{\alpha} \frac{d}{dt} g(t) + O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) \right] \quad (\text{A.21})$$

and to leading order in  $1/\alpha$  we thus obtain

$$T_2 = \sqrt{2\kappa_x\chi} \sqrt{\frac{\kappa_x}{\kappa_p}} \left\langle \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \frac{\delta x_k(t)}{\delta \zeta_j(s)} \Big|_{t=s} \right\rangle. \quad (\text{A.22})$$

Now repeating the argument leading to equation (A.15) we find that

$$\frac{\delta x_k(t)}{\delta \zeta_j(s)} \Big|_{t=s} = \sqrt{\frac{2}{\kappa_p}} \chi \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \quad (\text{A.23})$$

and thus

$$T_2 = \kappa_x \chi^2 \left( \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \right) \left\langle \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \right\rangle. \quad (\text{A.24})$$

One thus sees that the noise  $\zeta$  is to leading order white noise interpreted via the Stratonovich prescription. The final term to evaluate is

$$T_3 = \beta^2 \kappa_x \kappa_p \left\langle \frac{\partial f(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \frac{\partial E_j(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \int_0^t ds \exp(-\alpha(t - s)) E_j(\mathbf{x}(s)) \right\rangle \quad (\text{A.25})$$

and so one needs to compute terms of the form

$$I = \left\langle A(\mathbf{x}(t)) \int_0^t ds \exp(-\alpha(t - s)) B(\mathbf{x}(s)) \right\rangle, \quad (\text{A.26})$$

bearing in mind that  $\alpha$  is large. Now if  $\rho(\mathbf{x}, t)$  is the probability density for the position  $\mathbf{x}$  and  $H$  the effective forward Fokker–Planck operator, we may write the above as

$$I = \int d\mathbf{x} B(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, s) \exp(-(t - s)(\alpha - H^\dagger)) A(\mathbf{x}). \quad (\text{A.27})$$

The density  $\rho$  obeys the Fokker–Planck equation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = H\rho. \quad (\text{A.28})$$

The integration over  $s$  can be evaluated by integrating by parts, we have

$$\int_0^t ds \rho(\mathbf{x}, s) \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) = \rho(\mathbf{x}, t) [1 - \exp(-t(\alpha - H^\dagger))] (\alpha - H^\dagger)^{-1} - \int_0^\infty ds \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, s)}{\partial s} \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) (\alpha - H^\dagger)^{-1}. \quad (\text{A.29})$$

Now because the eigenvalues of  $H$  must be negative or zero, we may neglect the second term in the square brackets on the right-hand side above. Another integration by parts yields

$$\int_0^t ds \rho(\mathbf{x}, s) \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) = \rho(\mathbf{x}, t) (\alpha - H^\dagger)^{-1} - [H\rho(\mathbf{x}, t)] (\alpha - H^\dagger)^{-2}, \quad (\text{A.30})$$

where we have used equation (A.28) in the second term of the right-hand side and the operator  $H$  in this term only acts on  $\rho$  inside the square bracket. All other operators act on the right and we can now expand in powers of  $1/\alpha$  to obtain

$$\int_0^t ds B(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, s) \exp(-(t-s)(\alpha - H^\dagger)) A(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}, t) \left[ \frac{A(\mathbf{x})B(\mathbf{x})}{\alpha} + B(\mathbf{x}) \frac{H^\dagger}{\alpha^2} A(\mathbf{x}) - \frac{H^\dagger}{\alpha^2} A(\mathbf{x})B(\mathbf{x}) \right]. \quad (\text{A.31})$$

Now putting all these together yields

$$\begin{aligned} \langle H^\dagger f(\mathbf{x}) \rangle &= \kappa_x \left\langle \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} f(\mathbf{x}_t) \right\rangle \\ &+ \kappa_x \left( \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \right) \chi^2 \left\langle \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \right\rangle \\ &+ \kappa_x \beta \chi \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j + \frac{\chi}{\kappa_p \beta} E_j H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - \frac{\chi}{\kappa_p \beta} H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

This can be written in the form

$$\begin{aligned} \langle H^\dagger f(\mathbf{x}) \rangle &= \langle H_0^\dagger f(\mathbf{x}) \rangle + \chi^2 \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \left[ \left\langle \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \right. \right. \\ &\left. \left. + E_j H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - H^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle \right] + O\left(\left(\frac{\kappa_x}{\kappa_p}\right)^2\right), \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

where

$$H_0^\dagger f = \kappa_x \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_i} + \beta \chi \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right]. \quad (\text{A.34})$$

This is the only term remaining strictly in the limit  $\kappa_p \rightarrow \infty$  and corresponds exactly to a Langevin particle in an effective potential  $V$  given by equation (11). Now keeping the first term of  $O(\kappa_x/\kappa_p)$  we may write equation (A.33) as

$$\begin{aligned} \langle H^\dagger f(\mathbf{x}) \rangle &= \langle H_0^\dagger f(\mathbf{x}) \rangle \\ &+ \chi^2 \frac{\kappa_x}{\kappa_p} \left[ \left\langle \kappa_x \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) + E_j H_0^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - H_0^\dagger \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} E_j \right\rangle \right] \\ &= \langle H_0^\dagger f(\mathbf{x}) \rangle - \kappa_x \frac{\kappa_x \chi^2}{\kappa_p} \left\langle \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) + \beta \chi \frac{\partial E_j}{\partial x_k} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} E_l \frac{\partial E_l}{\partial x_k} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Finally the above may be written as

$$\langle H^\dagger f(\mathbf{x}) \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \kappa_{ki} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) - \beta \kappa_{ki} \frac{\partial V}{\partial x_k} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right\rangle, \quad (\text{A.36})$$

with  $\kappa_{ij}$  being the spatially varying and anisotropic diffusivity tensor given by (13) and  $V$  the potential defined by (7).

## References

- [1] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 2007 *J. Stat. Mech.* **P07013**
- [2] Dean D S, Drummond I T and Horgan R R 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 5135
- [3] Deem M W and Chandler D 1994 *J. Stat. Phys.* **76** 911
- [4] Matheron G 1967 *Éléments pour une Théorie des Milieux Poreux* (Paris: Masson)
- [5] King P R 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** 3935
- [6] King P R 1989 *Transport Porous Media* **4** 37
- [7] De Wit A 1995 *Phys. Fluids* **7** 2553
- [8] Sposito G 2001 *Transport Porous Media* **42** 181
- [9] Bouchaud J-P and Georges A 1990 *Phys. Rep.* **195** 127
- [10] Touya C and Dean D S 2007 *J. Phys. A: Math. Theor.* **40** 919
- [11] Chen L G, Falcioni M and Deem M W 2000 *J. Phys. Chem. B* **104** 6033
- [12] Dean D S and Touya C 2008 *J. Phys. A: Math. Theor.* **41** 335002
- [13] Drummond I T, Horgan R R and da Silva Santos C A 1998 *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** 1341
- [14] Marinari E, Parisi G and Ritort F 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 7615
- [15] Marinari E, Parisi G and Ritort F 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 7647
- [16] Bouchaud J-P and Mézard M 1994 *J. Physique I* **4** 1109
- [17] De Masi A, Ferrari P A, Goldstein S and Wick W D 1989 *J. Stat. Phys.* **55** 787
- [18] Osada H 1998 *Probab. Theor. Relat. Fields* **112** 53
- [19] Risken H 1996 *The Fokker–Planck Equation* 3rd edn (New York: Springer)
- [20] San Miguel M and Sancho J M 1980 *J. Stat. Phys.* **22** 605
- [21] Zwansig R 1988 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **85** 2029
- [22] De Gennes P G 1975 *J. Stat. Phys.* **12** 463
- [23] Drummond I T, Hoch A and Horgan R R 1986 *J. Phys. A: Math. Gen.* **19** 387
- [24] Honeycutt R L 1992 *Phys. Rev. A* **45** 600
- [25] Majumdar S N and Sire C 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 1420
- [26] Sire C 2008 *Phys. Rev. E* **78** 011121
- [27] Kraichnan R H 1976 *J. Fluid Mech.* **77** 753

# Bibliographie

- [1] Fischer K. J. et Hertz J. A. *Spin Glasses*. Cambridge university press, 1991.
- [2] Liu A. J. et Nagel S. R. Jamming is not just cool any more. *Nature*, 396 :21, 1998.
- [3] Parisi G Mézard M and Virasoro M. *Spin Glass Theory and Beyond*. Singapore : World Scientific, 1987.
- [4] Ocio M. Bouchaud J.-P. et Cugliandolo L. F. Vincent E., Hammann J. Slow dynamics and aging in spin glasses. *Springer Verlag Lecture Notes in Physics*, 492 :184–219, 1997.
- [5] Struick L C E. *Physical Aging In Amorphous Polymers And Other Materials*. Houston : Elsevier, 1978.
- [6] Ocio M. et Hammann J. Alba M. Ageing process and response function in spin glasses : An analysis of the thermoremanent magnetization decay in ag :mn. *Europhys. Lett.*, 2 :45, 1986.
- [7] Hammann J. Bouchaud J.-P. et Nordbla P. Jonason K., Vincent E. Memory and chaos effects in spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :3243, 1998.
- [8] Alba M. Hammann J.-Ocio M. et Bouchaud J.-P. Vincent E., Alet F. Aging phenomena in spin glasses and frustrated ferromagnets. *Physica B*, 280 :260, 2000.
- [9] Angell C. A. *Relaxation in complexe systems*. Ngai K. L. and Wright G. B., eds., 1985.
- [10] Vogel H. *Phys. Z.*, 22 :645, 1921.
- [11] Fulcher G. S. *J. Amer. Ceram. Soc.*, 8 :339, 1925.
- [12] Tammann G. et Hesse W. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 156 :245, 1926.
- [13] Kauzmann W. The nature of the glassy state and the behavior of liquids at low temperatures. *Chem. Rev.*, 43 :219, 1948.
- [14] Adam G. et Gibbs J. H. The temperature dependence of cooperative relaxation properties in glass-forming liquids. *J. Chem. Phys.*, 43 :139, 1965.
- [15] Bouchaud J-P. Weak ergodicity breaking and aging in disordered systems. *J. Phys. I*, 2 :1705, 1992.
- [16] Cohen M. H. et Turnbull D. *J. Chem. Phys.*, 31 :1164, 1959.
- [17] Gibbs J. H. et Di Marzio E. A. *J. Chem. Phys.*, 28 :373, 1958.
- [18] Gotze W. *Liquids, freezing and the glass transition*. Les Houches, 1989.
- [19] Goldstein M. *J. Chem. Phys.*, 51 :3728, 1969.
- [20] Zwanzig R. *J. Chem. Phys.*, 33 :1338, 1960.
- [21] Zwanzig R. *Phys. Rev.*, 124 :983, 1961.

- [22] Mori H. *Prog. Theor. Phys.*, 33 :423, 1965.
- [23] Wolynes P G Kirkpatrick T R, Thirumalai D. Scaling concepts for the dynamics of viscous liquids near an ideal glassy state. *Phys. Rev. A*, 40 :1045, 1989.
- [24] Kurchan J Bouchaud J-P, Cugliandolo L and Mézard M. Mode coupling approximations, glass theory and disordered systems. *Physica A*, 226 :243, 1996.
- [25] King P R. The use of field theoretic methods for the study of flow in a heterogeneous porous medium. *J. Phys. A*, 20 :3935, 1987.
- [26] King P R. The use of renormalization for calculating effective permeability. *Transport in Porous Media*, 4 :37, 1989.
- [27] Attinger S Eberhard J and Wittum G. Coarse graining for upscaling of flow in heterogeneous porous media. *Multiscale Model. Simul.*, 2 :269, 2004.
- [28] D.T. Hristopulos. Renormalization group methods in subsurface hydrology : Overview and applications in hydraulic conductivity upscaling. *Water Resour.*, 26 :279, 2003.
- [29] Sposito G. Methods of quantum field theory in the physics of subsurface solute transport. *Transport Porous Media*, 42 :181, 2001.
- [30] Matheron G. *Éléments pour une Théorie des Milieux Poreux*. Paris : Masson, 1967.
- [31] De Wit A. Correlation structure dependence of the effective permeability of heterogeneous porous media. *Phys. Fluids*, 7 :2553, 1995.
- [32] Falcioni M Chen L G and Deem M W. Disorder-induced time-dependent diffusion in zeolites. *J. Phys. Chem. B*, 104 :6033, 2000.
- [33] Parisi G Marinari E and Ritort F. Replica field theory for deterministic models : I. binary sequences with low autocorrelation. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 27 :7615, 1994.
- [34] Parisi G Marinari E and Ritort F. On the 3d ising spin glass. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 27 :7647, 1994.
- [35] Bouchaud J-P and Mézard M. Self induced quenched disorder : a model for the glass transition. *J. Physique*, I 4 :1109, 1994.
- [36] Toulouse G. *Commun Phys.*, 2 :115, 1977.
- [37] Bouchaud J-P and Georges A. Anomalous diffusion in disordered media : Statistical mechanisms, models and physical applications. *Physics Reports*, 195(4-5) :127–293, 1990.
- [38] Bertin E and Bouchaud J-P. Subdiffusion and localization in the one-dimensional trap model. *Phys. Rev. E*, 67 :026128, 2003.
- [39] Hammann J Vincent E and Ocio M. *Recent Progress In Random Magnet*. Singapore : World Scientific, 1992.
- [40] Monthus C. Nonlinear response of the trap model in the aging regime : Exact results in the strong-disorder limit. *Phys. Rev. E*, 69 :026103, 2004.
- [41] Monthus C. Localization properties of the anomalous diffusion phase in the directed trap model and in the sinai diffusion with a bias. *Phys. Rev. E*, 67 :046109, 2003.
- [42] Monthus C. Anomalous diffusion, localization, aging, and subaging effects in trap models at very low temperature. *Phys. Rev. E*, 68 :036114, 2003.
- [43] Ben Arous G and Cerny J. Bouchaud's model exhibits two different aging regimes in dimension one. *Ann. App. Prob.*, 15 :1161, 2005.
- [44] Monthus C and Bouchaud J-P. Models of trap and glass phenomenology. *J. Phys. A : Math Gen*, 29 :3847, 1996.

- [45] Monthus C. On a non-linear fluctuation theorem for the ageing dynamics of disordered trap models. *J. Phys. A : Math Gen*, 36 :11605, 2003.
- [46] Bertin E and Bouchaud J-P. Linear and nonlinear response in the aging regime of the one-dimensional trap model. *Phys. Rev. E*, 67 :065105, 2003.
- [47] Junier I and Kurchan J. Microscopic realizations of the trap model. *J. Phys. A : Math Gen*, 37 :3945, 2004.
- [48] Einstein A. Investigations on the theory of the brownian movement. *Ann. d. Physik*, 17 :549, 1905.
- [49] Goldstein S De Masi A, Ferrari P A and Wick W D. Invariance principle for reversible markov processes with application to diffusion in the percolation regime. *J. Stat. Phys.*, 55 :787, 1989.
- [50] Osada H. *Probab. Theory Relat. Fields*, 112 :53, 1998.
- [51] Langevin P. Sur la théorie du mouvement brownien. *Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences*, 146 :530–532, 1908.
- [52] Drummond IT Dean DS and Horgan RR. Perturbation theory for effective diffusivity in random gradient flows. *J. Phys. A : Math Gen*, 28 :1235, 1995.
- [53] Gardiner G W. *Handbook of stochastic methods*. Springer-Verlag, 1985.
- [54] Fokker A D. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 42 :310, 1915.
- [55] Planck M. *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math.*, K1 :325, 1917.
- [56] Drummond IT Dean DS and Horgan RR. Effective transport properties for diffusion in random media. *Journal of Statistical Mechanics*, page P07013, 2007.
- [57] Hoch A Drummond IT and Horgan RR. Numerical integration of stochastic differential equations with variable diffusivity. *J. Phys :A : Math Gen*, 19 :3871, 1986.
- [58] Honeycutt R L. Stochastic runge-kutta algorithms. i. white noise. *Phys. Rev. A*, 45 :600, 1992.
- [59] Milstein G N. *Numerical integration of stochastic differential equations*. Berlin : Springer, 1994.
- [60] Kloeden P E and Platen E. *Numerical solution of stochastic differential equations*. Berlin : Springer, 1999.
- [61] Schneider W Alexander S, Bernasconi J and Orbach R. *Rev. Mod. Phys.*, 53 :175, 1981.
- [62] Sneppen K Hwa T, Marinari E and Tang L-H. Localization of denaturation bubbles in random dna sequences. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 100 :4411–4416, 2003.
- [63] Derrida B. Random-energy model : An exactly solvable model of disordered systems. *phys. Rev. B*, 24 :2613, 1981.
- [64] Derrida B and Toulouse G. A generalization of the random energy model which includes correlations between energies. *J. Physique Lett.*, 46 :L223, 1985.
- [65] Gardner E and Derrida B. The probability distribution of the partition function of the random energy model. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 22 :1975, 1989.
- [66] Georges A Bouchaud J P, Comtet A and Le Doussal P. Classical diffusion of a particle in a one-dimensional random force field. *Ann. Phys.*, 201 :285, 1990.
- [67] Bouchaud J P and Mézard M. Universality classes for extreme-value statistics. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 30 :7997–8015, 1997.

- [68] Haus J W and Kehr K W. Diffusion in regular and disordered lattices. *Phys. Rep.*, 150 :263, 1987.
- [69] Gnedenko B V and Kolmogorov A N. *Limit distributions for sum of independent random variables*. Addison Wesley, reading, MA, 1954.
- [70] Levy P. *Théorie de l'addition des variables aléatoires*. Gauthier Villars, Paris, 1954.
- [71] Khintchine A Y and Levy P. Sur les lois stables. *C.R. Acad. Sci.*, 202 :374, 1936.
- [72] Abramowitz M and Stegun I A. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, 1964.
- [73] Machta J. *J. Phys. A*, 18 :531, 1985.
- [74] Georges A Bouchaud J P and Le Doussal P. *J. Physique*, 48 :1855, 1987.
- [75] Zwanzig R. Diffusion in a rough potential. *Proc. Natl. Acad. Sci USA*, 85 :2029, 1988.
- [76] De Gennes P G. *J. Stat. Phys.*, 12 :463, 1975.
- [77] Keller J B. *J. Math. Phys.*, 5 :548, 1964.
- [78] Dykhne AM. Conductivity of a two-dimensional two-phase system. *Sov. Phys.-JETP*, 32 :63, 1971.
- [79] Dykhne AM. Anomalous plasma resistance in a strong magnetic field. *Sov. Phys.-JETP*, 32 :348, 1971.
- [80] Drummond I T Dean D S and Horgan R R. Perturbation schemes for flow in random media. *J. Phys. A : Math Gen*, 27 :5135, 1994.
- [81] Drummond I T Dean D S and Horgan R R. Effective diffusivity in non-isotropic gradient flows. *J. Phys. A : Math Gen*, 28 :6013, 1995.
- [82] Deem M W and Chandler D. Classical diffusion in strong random media. *J. Stat. Phys.*, 76 :911, 1994.
- [83] Mézard M and Paris G. Replica field theory for random manifolds. *J. Phys. I*, 1 :809, 1991.
- [84] Engel A. Replica symmetry breaking in zero dimension. *Nucl. Phys. B*, 410 :617, 1993.
- [85] Fyodorov Y V and Sommers H-J. Classical particle in a box with random potential : Exploiting rotational symmetry of replicated hamiltonian. *Nucl. Phys. B*, 764 :128, 2007.
- [86] Franz S and Mézard M. On mean field glassy dynamics out of equilibrium. *Physica A*, 210 :48, 1994.
- [87] Cugliandolo L F and Le Doussal P. Large time nonequilibrium dynamics of a particle in a random potential. *Phys. Rev. E*, 53 :1525, 1996.
- [88] Kinzelbach H and Horner H. Dynamics of manifolds in random media : the selfconsistent hartree approximation. *J. Phys. I*, 3 :1329, 1993.
- [89] Horgan R R Dean D S, Drummond I T and Da-Silvo-Santos C A. Inertial effects in the short-range toy model. *Europhys. Lett.*, 42 :241, 1998.
- [90] Touya C and Dean DS. Dynamical transition for a particule in a squared gaussian potential. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 40 :919, 2007.
- [91] Horgan R R Drummond I T and da Silva Santos C A. Effective drift and diffusivity in non-gaussian random gradient flows. *J. Phys. A : Math Gen*, 31 :1341, 1998.
- [92] Kraichnan RH. *Journal of Fluid Mechanics*, 77 :753, 1976.
- [93] Spohn H. *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*. Heidelberg : Springer, 1991.

- 
- [94] Castillo H E and Le Doussal P. Freezing of dynamical exponents in low dimensional random media. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4859, 2001.
- [95] Hammann J Bouchaud J-P, Dupuis V and Vincent E. Separation of time and length scales in spin glasses : Temperature as a microscope. *Phys. Rev. B*, 65 :024439, 2002.
- [96] 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.
- [97] Bethier 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.
- [98] Mehta M L. *Random Matrices*. Academic Press, New York, 1991.
- [99] Drummond I T Dean D S and Horgan R R. Effective diffusion constant in a two-dimensional medium of charged point scatterers. *J. Phys. A : Math Gen*, 37 :2039, 2004.
- [100] Horgan R R Dean D S, Drummond I T and Lefèvre A. Perturbation theory for the effective diffusion constant in a medium of random scatterers. *J. Phys. A : Math Gen*, 37 :10459, 2004.
- [101] Dean DS and Touya C. A self-similar renormalization group applied to diffusion in non-gaussian potentials. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 41 :335002, 2008.
- [102] Drummond I T Dean D S and Horgan R R. Renormalization of drift and diffusivity in random gradient flows. *J. Phys. A : Math Gen*, 29 :7867, 1996.
- [103] Wilson K G. The renormalization group (rg) and critical phenomena 1. *Physical Review B*, 4 :3174, 1971.
- [104] Wilson K G. The renormalization group : critical phenomena and the kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 47 :773, 1975.
- [105] Onsager L. *Phys. Rev.*, 65 :117, 1944.
- [106] Vilgis TA. Strong and fragile glasses : A powerful classification and its consequences. *Phys. Rev. B*, 47 :2882, 1993.
- [107] Gutzow I and Schmelzer J. *The vitreous state*. Springer-Verlag, 1995.
- [108] Musharaf Aki Sk Samanta A and Ghosh SW. Universal scaling laws of diffusion in a binary fluid mixture. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :245901, 2001.
- [109] Rosenfeld Y. Relation between the transport coefficients and the internal entropy of simple systems. *Phys. Rev. A*, 15 :2545, 1977.
- [110] Rosenfeld Y. A quasi-universal scaling law for atomic transport in simple fluids. *J. Phys. Condens. Matter*, 11 :5415, 1999.
- [111] Dzугutov M. A universal scaling law for atomic diffusion in condensed matter. *Nature*, 381 :137, 1996.
- [112] Errington JR Mittal J and Truskett M. Relationships between self-diffusivity, packing fraction, and excess entropy in simple bulk and confined fluids. *J. Phys. Chem. B*, 111 :10054, 2007.
- [113] Errington J R Mittal J, Shen V K and Truskett T M. Confinement, entropy, and single-particle dynamics of equilibrium hard-sphere mixtures. *J. Chem. Phys*, 127 :154513, 2007.
- [114] Dean DS Touya C and Sire C. Dipole diffusion in a random electrical potential. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 42 :375001, 2009.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [115] Risken H and Frank T. *The Fokker-Planck Equation : Methods of Solutions and Applications*. Springer, 1996.
- [116] San Miguel M and Sancho J M. *J. Stat. Phys.*, 22 :605, 1980.
- [117] S. N. Majumdar and C. Sire. Survival probability of a gaussian non-markovian process : Application to the  $t = 0$  dynamics of the ising model. *Phys. Rev. Lett.*, 77 :1420, 1996.
- [118] C. Sire. Crossing intervals of non-markovian gaussian process. *Phys. Rev. E*, 78 :011121, 2008.
- [119] Novikov E A. *Sov. Phys. JETP*, 20 :1290, 1965.

# Index

- Équation du flot, 73
- Adam-Gibbs, 12, 84
- Approximation adiabatique, 41, 88, 90
- Arrhénius, 10, 29, 42, 46, 52
- Bruit blanc, 89
- Champ Gaussien, 21, 36, 37, 41
- CLT, 32, 48
- Constante de diffusion, 24, 26, 36, 43, 65, 74
- Couplage de modes, 13
- Désordre
  - recuit, 18, 33, 49
  - trempe, 18, 33, 50
- Darcy, 35
- Diffusion
  - anormale, 20, 31
  - normale, 19, 31, 47
- Diffusivité aléatoire (DA), 24, 77
- Dipôle, 40, 88
- Entropie configurationnelle, 11, 12
- Exposant anormal, 34, 53, 57, 100
- Faible désordre, 63, 90
- Fluctuation-dissipation, 22, 75
- Fokker-Planck, 23, 24
- Fonction de Green, 62, 69
- Frustration, 18
- GOE, 58
- Gumbel, 29
- Hubbard-Stratanovich, 44
- Ito, 22
- Landau-Lifshitz-Matheron, 74
- Langevin, 21, 24, 89
- Levy, 30, 33, 53
- Marcheur aléatoire, 30, 47
- Markovien, 18, 22
- MCT, 77
- Modèle de pièges, 11, 19, 28, 57
- Mouvement Brownien, 21
- Potentiel aléatoire (PA), 20, 43, 77
- Réplique, 11, 54
- Rajeunissement, 8
- REM, 29, 59
- Renormalisation, groupe, 37, 65, 70
- Runge-Kutta, 27, 47
- SDE, 22
- Self energie, 63
- Sherrington-Kirkpatrick, 29
- SK, 59
- Stratanovich, 22
- Température
  - Critique  $T_c$ , 14, 43, 53, 77, 95
  - Fusion  $T_m$ , 11
  - Kauzmann  $T_K$ , 11, 13
  - Transition vitreuse  $T_g$ , 10
  - Vogel  $T_0$ , 10, 13
- Temps de premier passage, 53
- Temps de relaxation, 9, 14, 20, 52, 87
- Transition dynamique, 31, 43, 75, 95, 100
- Verre
  - fort, 10
  - fragile, 10
- Vieillessement, 8
- Viscosité, 9
- Vogel-Fulcher-Tammann, 10, 13, 77