# Théorie statistique des champs : des polymères aux transitions de phase

**A. Georges** **M. Mézard** **R. Monasson**

Février 2009

# Table des matières

# Préambule

Une grande partie de la physique théorique des trente dernières années a cherché à comprendre les systèmes comportant un grand nombre de degrés de liberté. La théorie des champs fournit le cadre conceptuel moderne pour décrire ces systèmes. A ce titre elle permet d'étudier de nombreux problèmes allant de la physique de la matière condensée (transitions de phases, polymères, interfaces, électrons dans les solides, etc...) aux interactions fondamentales des constituants élémentaires de la matière (théorie quantique des champs). Le but du présent cours est de fournir une introduction à quelques notions de théorie statistique des champs (non relativiste) en se fondant sur des problèmes concrets de physique de la matière condensée.

Le problème de la marche aléatoire, ou du polymère idéal, fournit une introduction au champ libre à une dimension, et permet de comprendre la notion cruciale de l'universalité des comportements à grande échelle, qui est ensuite illustrée par une étude qualitative du polymère auto-évitant.

L'utilisation des intégrales de chemin est développée sur le cas des polymères, et on esquisse à ce propos la description de ces intégrales de chemin en mécanique quantique, et leur lien avec l'équation de Schrödinger.

L'étude des fluctuations d'interfaces conduit à la théorie des champs en dimension supérieure à 1. L'interface libre, ou confinée par un potentiel harmonique, permet d'illustrer la théorie du champ libre.

L'une des applications les plus importantes de la théorie des champs est la description des systèmes proches d'une transition de phase dite du second ordre, c'est à dire où la longueur de corrélation diverge. La compréhension de ces transitions de phase nécessite dans un premier temps de bien comprendre les différentes phases d'un système physique, pour lequel la théorie de champ moyen fournit un outil simple et efficace.

La théorie des champs en interaction fournit des nouvelles classes d'universalité pour les distributions de probabilité de nombreuses variables aléatoires couplées, qui sont étudiées par des méthodes de groupe de renormalisation. Les idées fondamentales de cette méthode sont décrites à propos des transitions de phase, et illustrées sur des exemples simples.

Les calculs avancés de théorie des champs nécessitent souvent l'utilisation de techniques élaborées qu'il n'était pas question de traiter ici. Le lecteur désireux d'approfondir l'un ou l'autre des thèmes abordés pourra par exemple consulter l'un des ouvrages suivants, dont nous évoquerons parfois les contenus :

1. Ouvrages généraux ou introductifs

– P.M. Chaikin et T.C. Lubensky, "Principles of Condensed Matter Physics", Cambridge University Press, 2000
– M. Le Bellac, "Des phénomènes critiques aux champs de jauge", Interéditions / Editions du CNRS, 1988
– G. Parisi, "Statistical field theory", Addison Wesley 1988
– S.K. Ma, "Statistical mechanics", World Scientific, 1985.
– S.K. Ma, "Introduction to the renormalization group", Rev. Mod. Phys. 45 (1973) 589
– J. Cardy, "Scaling and renormalisation in Statistical Physics", Cambridge Lecture notes in Physics, Cambridge University Press 1996
– P.G. De Gennes, "Scaling concepts in polymer physics", Cornell University Press 1979
– R.P. Feynman et A.R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals", Mc Graw Hill

2. Ouvrages plus spécialisés ou plus avancés

– C. Itzykson et J.M. Drouffe, "Théorie statistique des champs", Interéditions / Editions du CNRS, 1989.
– C. Itzykson et J.B. Zuber, "Quantum field theory", Mc Graw Hill 1980.
– J. Zinn-Justin, "Quantum field theory and critical phenomena", Oxford University Press 1989
– J. des Cloizeaux et G. Janninck, "Les polymères en solution : leur modélisation et leur structure", les Editions de Physique 1987
– A. Tsvelik, "Quantum field theory in condensed matter physics", Cambridge University Press, 1995.

Le présent cours est une version remaniée et enrichie de l'ouvrage intitulé 'Introduction à la théorie statistique des champs' écrit par A. Georges et M. Mézard en 1995.

# Chapitre 1

# Théorie des champs libres

## 1.1 Mouvement Brownien

### 1.1.1 Marche au hasard

Le problème de la marche au hasard, étudié par ailleurs dans d'autres cours, peut sembler rebattu, mais il constitue un excellent “laboratoire” pour introduire les concepts de la théorie des champs de manière simple. Il nous fournira le premier exemple de “loi d'échelle”, et le passage à la limite continue nous permettra d'introduire la notion d'intégrale fonctionnelle et de théorie des champs sans interaction.

Dans sa version la plus simple, le problème classique de la marche au hasard est le suivant : un marcheur se déplace sur les noeuds d'un réseau (hyper)cubique en dimension $d$. A intervalles de temps réguliers $\Delta t = 1$, il quitte le point où il se trouvait et passe avec une probalité $\frac{1}{2d}$ sur l'un des $2d$ voisins de ce point (voir fig. 1.1). On cherche la probabilité $P(\vec{x}, t)$ que le marcheur parti de $\vec{x} = \vec{0}$ en t=0 se trouve en $\vec{x}$ à l'instant t, et en particulier son comportement à temps long.

Pour que le marcheur soit en $\vec{x}$ à l'instant t+1, il devait être à l'instant t sur l'un des $2d$ voisins de $\vec{x}$, soit $\vec{x}'$, et avoir choisi la direction de saut conduisant de $\vec{x}'$ à $\vec{x}$ parmi les $2d$ possibles. La probalité $P(\vec{x}, t)$ vérifie donc l'équation de récurrence :

$$P(\vec{x}, t+1) = \frac{1}{2d} \sum_{\vec{x}'} P(\vec{x}', t) \tag{1.1}$$

où la somme est restreinte aux $2d$ points $\vec{x}'$ voisins de $\vec{x}$. Notant $\vec{e}_\mu, \mu = 1, ..., d$ les vecteurs de base du réseau que nous supposerons normés ($\vec{e}_\mu . \vec{e}_\nu = \delta_{\mu\nu}$), et $\vec{x} = \sum_\mu x_\mu \vec{e}_\mu$, on a $\vec{x}' = \vec{x} \pm \vec{e}_\mu$ et donc :

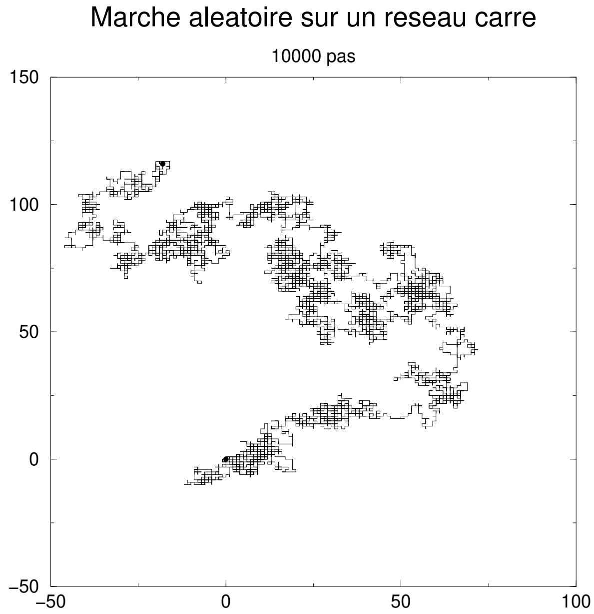



FIG. 1.1 – Trajet réalisé par un marcheur aléatoire sur un réseau carré (d=2) en 10000 pas. Les points de départ (origine) et d'arrivée sont signalés par les points noirs. Notez la faible excursion de la marche, comparée à celle d'un marcheur non aléatoire !

$$P(\vec{x}, t+1) = \frac{1}{2d} \sum_{\mu=1}^{d} [P(\vec{x} + \vec{e}_\mu, t) + P(\vec{x} - \vec{e}_\mu, t)] \tag{1.2}$$

Cette équation de récurrence permet par exemple de calculer numériquement la loi de probabilité pour des temps courts. Il s'agit d'une équation linéaire et invariante par translation dans l'espace, ce qui suggère de la résoudre en introduisant la transformée de Fourier $\tilde{P}(\vec{k}, t)$ de $P(\vec{x}, t)$, définie par :

$$\tilde{P}(\vec{k}, t) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{k}.\vec{x}} P(\vec{x}, t) \tag{1.3}$$

où la somme porte sur tous les points du réseau. Notons que la transformée de Fourier inverse est :

$$P(\vec{x}, t) \;=\; \prod_{\mu=1}^{d} \left( \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_\mu}{2\pi} e^{ik_\mu x_\mu} \right) \tilde{P}(\vec{k}, t) \;\;\equiv\;\; \int_B \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}.\vec{x}} \tilde{P}(\vec{k}, t) \;, \tag{1.4}$$

où B est le cube $[-\pi, \pi]^d$, appelé zone de Brillouin.

L'équation de récurrence temporelle (1.2) sur $P(\vec{x}, t)$ se traduit pour $\tilde{P}$ en :

$$\tilde{P}(\vec{k},t+1) = \left(\frac{1}{d}\sum_{\mu=1}^{d}\cos k_\mu\right)\tilde{P}(\vec{k},t) \tag{1.5}$$

Avec la condition initiale $P(\vec{x},0) = \delta_{\vec{x},\vec{0}}$, qui s'écrit $\tilde{P}(\vec{k},0) = 1$, on trouve donc

$$\tilde{P}(\vec{k},t) = \left(\frac{1}{d}\sum_{\mu=1}^{d}\cos k_\mu\right)^t \tag{1.6}$$

et l'inversion de la transformée de Fourier fournit la probabilité que le marcheur soit en $\vec{x}$ à l'instant t :

$$P(\vec{x},t) = \int_B \frac{d^dk}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}.\vec{x}} \left(\frac{1}{d}\sum_{\mu=1}^{d}\cos k_\mu\right)^t \tag{1.7}$$

Quel est le comportement de cette probabilité à temps long ? Notant que la somme $S = (1/d)\sum_{\mu=1}^{d}\cos k_\mu$ est inférieure ou égale à 1, il est clair que les régions de B où S n'est pas proche de 1 contribueront peu à l'intégrale lorsque t est grand. Dans ce régime $t \gg 1$, l'intégrale est donc dominée par le voisinage de $\vec{k} = \vec{0}$, où l'on peut remplacer $\left((1/d)\sum_\mu \cos k_\mu\right)^t$ par $\exp(-\vec{k}^2 t/(2d))$ [1]. Le volume d'intégration B peut alors être remplacé par $R^d$ à cause de la décroissance très rapide de cette gaussienne pour des $|\vec{k}| \gg 1/\sqrt{t}$. Ceci donne :

$$P(\vec{x},t) \simeq_{t\gg 1} \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\, e^{i\vec{k}.\vec{x}}\, e^{-\frac{\vec{k}^2 t}{2d}} = \left(\frac{d}{2\pi t}\right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{\vec{x}^2 d}{2t}} \tag{1.8}$$

Le lecteur soucieux d'une formulation mathématique plus précise de ce comportement asymptotique pourra démontrer le théorème suivant :

$$\lim_{t\to\infty}\left[\sum_{\vec{x}/\frac{\vec{x}}{\sqrt{t}}\in\upsilon} P(\vec{x},t)\right] = \left(\frac{d}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}} \int_{\vec{z}\in\upsilon} d^dz e^{-\frac{\vec{z}^2 d}{2}} \tag{1.9}$$

où $\upsilon$ est un sous ensemble de $R^d$. On notera que cet énoncé ne dit rien sur les “queues de distribution”, c'est à dire sur les valeurs de la variable $\vec{x}$ non comprises dans le domaine d'échelle $\frac{\vec{x}}{\sqrt{t}} \in \upsilon$ (par exemple, les valeurs de $\vec{x}$ qui ne sont pas d'ordre $\sqrt{t}$). L'universalité de la loi limite ci-dessus ne s'applique qu'à ce domaine d'échelle. Nous reviendrons sur cette question en petite classe.

[1] En fait il y a aussi le voisinage de $k_\mu = \pi$, qui crée des oscillations de l'ordre du pas du réseau. Mais celles-ci sont lissées lorsqu'on moyenne $P$ sur un nombre de sites grand, comme on peut le voir facilement par exemple en convoluant $P$ avec une loi gaussienne

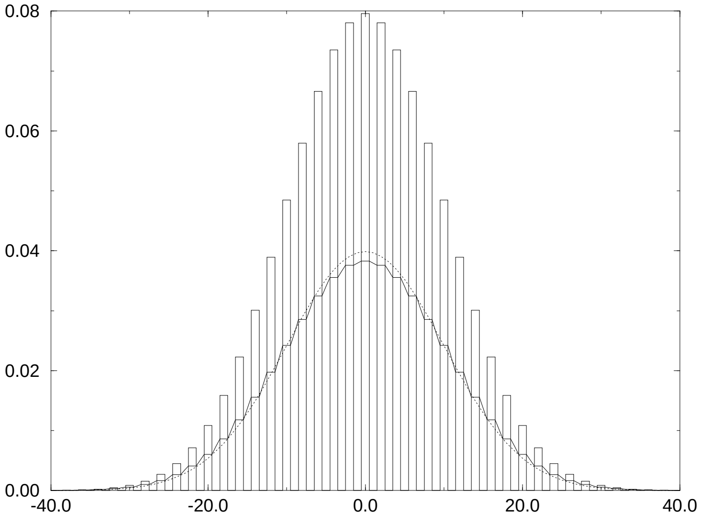



FIG. 1.2 – Probabilité pour un marcheur à une dimension, parti de l'origine, d'arriver en un point $x$ après 100 pas. L'histogramme donne la probabilité exacte obtenue par itération de (1.1), la courbe en traits pleins est une moyenne glissante de l'histogramme sur 20 points, la courbe en traits plein est la pédiction gaussienne (1.8).

La formule 1.8 nous montre que le marcheur au bout d'un temps $t$ s'est déplacé d'une distance d'ordre $\sqrt{t}$ ; à temps long, la probabilité de présence du marcheur, dans la région où elle est non nulle, vérifie une relation appelée loi d'échelle :

$$P(\vec{x},t) \simeq \frac{1}{\sqrt{t}^d}\ f(\frac{\vec{x}}{\sqrt{t}}) \tag{1.10}$$

et en l'occurence $f$ est une gaussienne. Toutes ces propriétés universelles s'obtiennent en regardant le système sur des échelles grandes ($|\vec{x}| \sim \sqrt{t} \to \infty$).

### 1.1.2 Limite continue

Une autre façon d'obtenir ce comportement asymptotique est de supposer que le marcheur se déplace sur un réseau où la distance entre voisins est $a$, et que le déplacement se fait à chaque intervalle de temps $\Delta t = \tau$. Les calculs précédents qui correspondent à $a = \tau = 1$ se refont aisément dans ce cas et la loi 1.7 donnant la probabilité de présence en $\vec{x}$ à l'instant t (multiple de $\tau$) devient :

$$P_a(\vec{x},t) = \int_{B_a} \frac{d^d k}{(2\pi/a)^d}\, e^{i\vec{k}.\vec{x}} \left( \frac{1}{d} \sum_{\mu=1}^{d} \cos(k_\mu a) \right)^{t/\tau} , \tag{1.11}$$

où $B_a$ est le cube $[-\pi/a, \pi/a]^d$. Une limite non triviale est obtenue en faisant tendre simultanément le pas du réseau $a$ et l'intervalle de temps $\tau$ vers zéro, en gardant fixe le rapport $a^2/\tau$. Dans cette approche, au lieu de regarder le comportement à longue distance (et temps long) pour la marche sur un réseau de pas fixe, nous gardons $\vec{x}$ (et $t$) fixes, mais nous faisons tendre vers zéro le pas du réseau. Calculons dans cette limite la probabilité de présence $P_v(t)$ dans un petit volume $v$ de taille $(\Delta x)^d$ au voisinage du point $\vec{x}$, à l'instant $t$. Si $a \ll \Delta x \ll 1$, cette probabilité dépend linéairement de $(\Delta x)^d$, le coefficient de proportionnalité n'étant autre que la densité de probabilité de présence du marcheur $\rho(\vec{x},t)$. On définira donc :

$$\rho(\vec{x},t) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{1}{(\Delta x)^d} \lim_{a \to 0} P_v(t) \ . \tag{1.12}$$

Un calcul simple que nous laisserons en exercice permet d'obtenir à partir de 1.11, en prenant toujours la limite $a \to 0,\ \tau \to 0$ avec $D = \frac{a^2}{d\tau}$ fixe :

$$\rho(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi t D)^{d/2}} e^{-\frac{\vec{x}^2}{2Dt}}. \tag{1.13}$$

En adaptant convenablement $a$ et $\tau$, nous avons ainsi pu définir une limite continue pour la marche aléatoire. Le fait que la densité de probabilité correspondante $f(\vec{x},t)$ soit une gaussienne n'est pas dû au hasard : la relation de récurrence pour la généralisation de 1.2 s'écrit :

$$P_a(\vec{x},t+\tau) - P_a(\vec{x},t) = \frac{1}{2d} \sum_{\mu} [P_a(\vec{x}+a\vec{e}_\mu) + P_a(\vec{x}-a\vec{e}_\mu) - 2P_a(\vec{x})] \tag{1.14}$$

Cette forme fait apparaître dans le membre de gauche une forme discrète de la dérivée temporelle, et dans celui de droite une forme discrète de l'opérateur laplacien. Plus précisément, 1.14 s'écrit :

$$\begin{aligned} &\frac{P_a(\vec{x},t+\tau)/\Delta x^d - P_a(\vec{x},t)/\Delta x^d}{\tau} \\ &\quad = \frac{a^2}{2d\tau}\ \frac{\sum_\mu [P_a(\vec{x}+a\vec{e}_\mu)/\Delta x^d + P_a(\vec{x}-a\vec{e}_\mu)/\Delta x^d - 2P_a(\vec{x})/\Delta x^d]}{a^2} \end{aligned} \tag{1.15}$$

Prenant toujours la limite $a \to 0, \tau \to 0$ avec $D = a^2/d\tau$, et intégrant dans le petit volume $v$ au voisinage de $\vec{x}$, cette équation aux différences finies devient l'équation différentielle :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{D}{2} \Delta \rho \tag{1.16}$$

qui n'est autre que l'équation de la chaleur. Bien sur, la solution de cette équation avec la condition initiale $\rho(\vec{x}, t = 0) = \delta(\vec{x})$ est la loi de diffusion gaussienne déjà trouvée en 1.13. La marche au hasard est une version discrétisée d'un phénomène de diffusion.

### 1.1.3 Loi d'échelle, universalité

Les deux formulations de la marche aléatoire (pas du réseau et intervalle de temps entre sauts fixes, à $\vec{x}$ et t grands, ou bien $\vec{x}$ et t fixe, mais pas spatial et temporel tendant vers 0) sont clairement équivalentes. Revenons à notre formulation originelle. Nous avons déjà noté que la probabilité de présence $P(\vec{x}, t)$ s'écrit dans le régime d'échelle sous la forme :

$$P(\vec{x}, t) \sim \frac{1}{t^{d/2}}\ f(\frac{\vec{x}}{\sqrt{t}})\ , \tag{1.17}$$

où f est gaussienne. Notons que cette loi est invariante par rotation, alors que le processus élémentaire de la marche possède la symétrie cubique. On peut dès lors se demander si la nature du réseau est importante. Qu'adviendrait-il pour la probabilité de présence $P(\vec{x}, t)$, dans le cas d'un marcheur se déplaçant sur un réseau hexagonal compact à d = 3 ? [2] En fait le comportement à grande échelle (ce qui signifie toujours $|\vec{x}|$ grand, t grand et $|\vec{x}|^2/t$ fixé) est toujours donné par 1.17, quel que soit le réseau sur lequel se déplace le marcheur, et d'ailleurs même si le déplacement ne se fait pas sur un réseau : sous quelques conditions que nous allons préciser, la probabilité de présence à grande échelle prend toujours la forme universelle :

$$P(\vec{x}, t) \sim \frac{1}{(2\pi D t)^{d/2}} e^{-\frac{\vec{x}^2}{2Dt}}\ , \tag{1.18}$$

et seul $D$ dépend des détails "microscopiques" de la marche. En particulier la distance parcourue par le marcheur après $t$ sauts est toujours d'ordre $\sqrt{t}$. On a coutume de définir un exposant de diffusion $\nu$ par

$$< \vec{x}(t)^2 > \simeq_{t \to \infty} c\ t^{2\nu}\ . \tag{1.19}$$

Pour les marches aléatoires, $\nu$ est un exposant universel et vaut $\frac{1}{2}$. Ce résultat est une conséquence directe du fait que le déplacement $\vec{\eta}_t \in \{\vec{e}_1, ..., \vec{e}_d, -\vec{e}_1, ..., -\vec{e}_d\}$ du marcheur

[2] Le calcul explicite analogue à celui que nous venons de faire est un bon exercice. Voir le livre d'Itzykson Drouffe

à l'instant $t$ est une variable aléatoire *indépendante* de $\vec{x}_t = \sum_{t'=0}^{t-1} \vec{\eta}_{t'}$. A partir de $\vec{x}_{t+1} = \vec{x}_t + \vec{\eta}_t$, on trouve :

$$< \vec{x}_{t+1}^2 >=< \vec{x}_t^2 > + < \vec{\eta}_t^2 > +2 < \vec{\eta}_t > . < \vec{x}_t > \tag{1.20}$$

qui redonne bien $< \vec{x}_t^2 >= t$ (car $< \vec{\eta}_t >= 0$ et $< \vec{\eta}_t^2 >= 1$).

Il est clair au vu de ce calcul que nos résultats découlent en fait du théorème de la limite centrale : la composante $x_t^\mu$ du déplacement dans la direction $\mu$ est une somme de t variables aléatoires indépendantes, $x_t^\mu = \sum_{t'=0}^{t-1} \eta_{t'}^\mu$. Sa distribution à temps long est donc une gaussienne, centrée à l'origine (car $< \eta_t^\mu >= 0$) et de variance égale à $t < (\eta_t^\mu)^2 >$, donc égale à $t$. L'universalité et le comportement d'échelle avec exposant $\nu = 1/2$ sont des conséquences de ce théorème, qui affirme que $x_t^\mu$ aura une distribution gaussienne quelle que soit la distribution des $\eta_t^\mu$, pourvu que les $\eta_t^\mu$ soient des variables aléatoires indépendantes dont la variance est finie. Comme nous allons le voir, ce résultat est en fait un peu plus général, car les $\eta^\mu$ dans diverses directions peuvent même être corrélées. Considérons un marcheur dans $R^d$. A intervalles de temps réguliers $\Delta t = \tau$, il fait des sauts. La densité de probabilité pour passer du point $\vec{x}$ à l'instant $t$ au point $\vec{x} + a\vec{y}$ à l'instant $t + \tau$ est une loi $\Psi(\vec{y})$, dont nous supposerons simplement qu'elle est isotrope ($< \vec{y} >= \int \Psi(\vec{y})\vec{y}dy = 0$), et de second moment normalisé ($< y^\mu y^\nu >= \delta^{\mu\nu}$). Deux exemples de trajets parcourus, avec deux choix différents de la fonction $\Psi$, sont donnés en figure 1.3.

La relation de récurrence sur la densité de probabilité de présence est :

$$\rho(\vec{x}, t + \tau) = \int d\vec{y}\ \Psi(\vec{y})\ \rho(\vec{x} - a\vec{y}, t) \tag{1.21}$$

La résolution de cette équation de récurrence, par les méthodes de transformation de Fourier développées plus haut, conduit à :

$$\rho(\vec{x}, t) = \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d}\ e^{-i\vec{k}.\vec{x}}\ \left(\int \Psi(\vec{y}) e^{ia\vec{k}.\vec{y}} d\vec{y}\right)^{t/\tau} \tag{1.22}$$

Faisant tendre comme à l'habitude $\tau$ vers 0 et $a$ vers 0 avec $\frac{a^2}{\tau} = D$ fixé, nous trouvons :

$$\begin{aligned}\rho(\vec{x}, t) &\simeq \lim_{a\to 0, \tau\to 0} \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}.\vec{x}}\ \left[1 - \frac{a^2}{2} < (\vec{k}.\vec{y})^2 > +O(a^3)\right]^{t/\tau} \\ &\simeq \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}.\vec{x}} e^{-\frac{Dt\vec{k}^2}{2}} = \frac{1}{(2\pi Dt)^{d/2}} e^{-\frac{\vec{x}^2}{2Dt}}\end{aligned} \tag{1.23}$$

Nous avons ainsi établi l'universalité de la loi d'échelle gaussienne et de l'exposant de diffusion $\nu = 1/2$, sous les deux hypothèses qu'il importe de garder présentes à l'esprit :

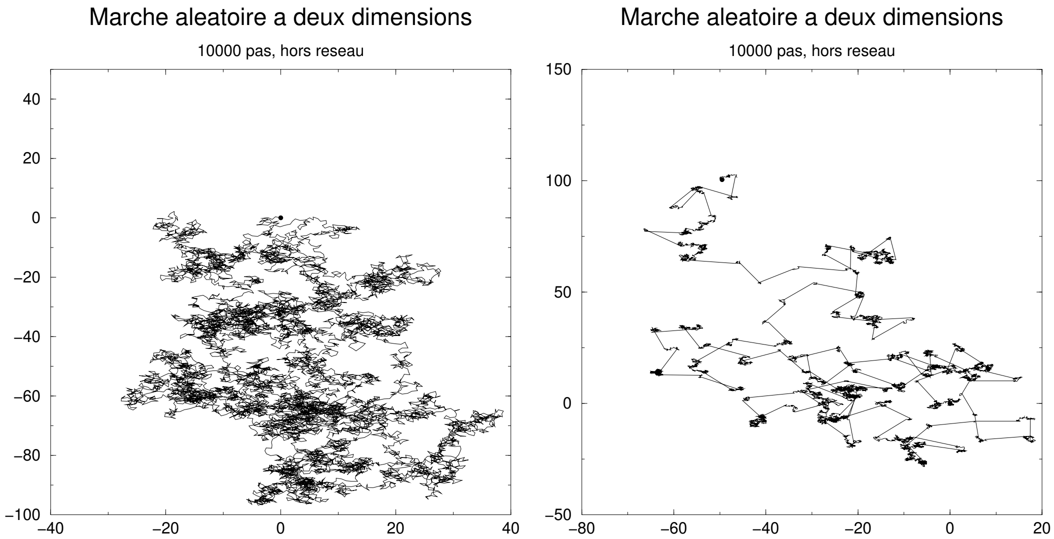



FIG. 1.3 – Trajet réalisé par un marcheur aléatoire en dimension deux, en 10000 pas, en l'absence de réseau. Les deux figures correspondent au processus décrit dans le texte, avec $a = 1$, et deux choix différents de la fonction $\Psi$. Dans la figure de gauche, à chaque itération, le marcheur fait un pas $\vec{\eta}_t$ de norme unité et de direction aléatoire. Dans la figure de droite, à chaque itération, le marcheur fait un pas de direction aléatoire, mais dont la norme vaut $\sqrt{100}$ avec probabilité $1/111$, et vaut $\sqrt{.1}$ avec probabilite $1 - 1/111$, de telle sorte que le deuxième moment de la distribution des sauts est le meme dans les deux cas. Malgré les nettes différences entre ces deux marches au niveau microscopique, visible ici, elles ont le même comportement universel à grande échelle, identique aussi au comportement de la marche sur un réseau carré montré en figure 1.1.

les sauts $\vec{y}$ à chaque instant sont des variables aléatoires indépendantes, et leur variance est finie. (exercice : quel est le comportement universel lorsque $<\vec{y}>=\vec{u}\neq\vec{0}$ ?) (Bien entendu, le raisonnement ci dessus peut se transposer au cas où $a=\tau=1$, mais $\vec{x}$ et t tendent vers l'infini avec $|\vec{x}|^2/t$ fixé).

### 1.1.4 Intégrales de chemins

Revenant à notre problème de marche au hasard sur les noeuds d'un réseau cubique de maille a, nous voyons que $P(\vec{x},t)$ s'interprète comme une somme sur des chemins :

$$P(\vec{x},t)=\frac{\text{Nombre de chemins de } t/\tau \text{ pas joignant } \vec{0} \text{ à } \vec{x}}{\text{Nombre total de chemins de } t/\tau \text{ pas issus de } \vec{0}} \tag{1.24}$$

(ceci découle simplement de l'itération de l'équation de récurrence 1.2). Une telle interprétation vaut aussi pour la densité de probabilité de présence $\rho(\vec{x},t)$ obtenue en prenant la limite continue $a,\tau\to 0$, avec $a^2/\tau=\text{constante}=dD$. Nous avons vu à plusieurs reprises que $\rho(\vec{x},t)$ prend la forme

$$\rho(\vec{x},t)=\frac{1}{(2\pi Dt)^{d/2}}e^{-\frac{\vec{x}^2}{2Dt}} \ . \tag{1.25}$$

Il est immédiat de généraliser cette expression pour obtenir $\rho(\vec{x}_2,t_2|\vec{x}_1,t_1)$, la densité de probabilité de présence au voisinage de $\vec{x}_2$ à l'instant $t_2$, sachant que le marcheur est parti de $\vec{x}_1$ à l'instant $t_1$ (bien sur $t_2\geq t_1$) :

$$\rho(\vec{x}_2,t_2|\vec{x}_1,t_1)=\frac{1}{(2\pi D(t_2-t_1))^{d/2}}e^{-\frac{(\vec{x}_2-\vec{x}_1)^2}{2D(t_2-t_1)}} \ . \tag{1.26}$$

Cette probabilité vérifie une propriété de convolution :

$$\forall t'\in]t_1,t_2[: \qquad \rho(\vec{x}_2,t_2|\vec{x}_1,t_1)=\int d^dx'\rho(\vec{x}_2,t_2|\vec{x}',t')\rho(\vec{x}',t'|\vec{x}_1,t_1) \ . \tag{1.27}$$

(Cette propriété, qui traduit le caractère Markovien de la marche aléatoire, exprime tout simplement le fait que le marcheur parti de $\vec{x}_1$ à l'instant $t_1$ est passé quelque part à l'instant $t'$ avant de rejoindre $\vec{x}_2$ à l'instant $t_2$ !).

La probabilité de présence $\rho(\vec{x},t)$ pour le marcheur issu de $\vec{0}$ à t=0 peut alors s'écrire en divisant l'intervalle de temps [0,t] en $n+1$ intervalles $t_0<t_1<t_2........<t_n<t_{n+1}=t$ sous la forme :

$$\rho(\vec{x},t)=\prod_{i=1}^{n}\left(\int d^d\vec{x}_i\right)\prod_{i=0}^{n}\rho(\vec{x}_{i+1},t_{i+1}|\vec{x}_i,t_i) \ , \tag{1.28}$$

où nous avons posé $\vec{x}_0 = \vec{0}$ et $\vec{x}_{n+1} = \vec{x}$. De manière plus explicite, utilisant la forme gaussienne 1.26 pour la probabilité conditionnelle, on obtient :

$$\rho(\vec{x}, t) = \prod_{i=1}^{n} \left( \int d^d \vec{x}_i \right) \prod_{i=0}^{n} \left( \frac{1}{(2\pi D(t_{i+1} - t_i))^{d/2}} e^{-\frac{(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i)^2}{2D(t_{i+1} - t_i)}} \right) \ . \tag{1.29}$$

Nous considérons maintenant la limite où $n$ est grand, les extrémités $\vec{0}$ et $\vec{x}$, ainsi que le temps total $t$, étant fixés. Les intervalles de temps $t_{i+1} - t_i$ tendent ainsi vers zéro. Nous admettrons que la mesure discrétisée :

$$\prod_{i=0}^{n} \frac{d^d \vec{x}_i}{(2\pi D(t_{i+1} - t_i))^{d/2}} \tag{1.30}$$

apparaissant dans (1.29) permet de définir dans cette limite une *mesure sur les chemins* $\vec{x}(\tau)$. Nous noterons cette mesure $d[\vec{x}(\tau)]$. La densité de probabilité prend ainsi la forme :

$$\rho(\vec{x}, t) = \int_{\vec{x}(0)=\vec{0}}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} d[\vec{x}(\tau)] \ e^{-\frac{1}{2D} \int_0^t d\tau |\partial \vec{x} / \partial \tau|^2} \ . \tag{1.31}$$

Cette formule est notre premier contact avec les "intégrales de chemin". L'intégrale $\int_{\vec{x}(0)=\vec{0}}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} d[\vec{x}(\tau)]$ porte sur tous les chemins $\vec{x}(\tau)$ qui vérifient les deux conditions aux limites $\vec{x}(0) = \vec{0}$ et $\vec{x}(t) = \vec{x}$. La forme (1.31) est élégante et compacte ; on peut la considérer comme un symbole dont le sens précis est donné par la formule discrétisée 1.29. Nous rencontrerons souvent par la suite ces intégrales fonctionnelles (ici, il s'agit de l'intégration sur les fonctions de [0,t] dans $R^d$), qui sont à la base de la théorie des champs.

Physiquement il importe de bien comprendre la différence entre les expressions (1.24) et (1.31) : toutes deux expriment la probabilité de présence (dans le deuxième cas la densité de probabilité de présence) comme une somme sur des chemins. La première formulation (1.24) considère les chemins au niveau microscopique, il s'agit de marches sur le réseau dont la maille est a. C'est donc une quantité non universelle (par exemple le nombre total de chemins de $t/\tau$ pas dépend du réseau : c'est $z^{t/\tau}$ où $z$ est le nombre de coordination du réseau). La formulation continue sous forme d'intégrale de chemin (1.31-1.29) est universelle : la discrétisation comme convolution de gaussiennes (1.29) est valable quels que soient les détails de la marche sous jacente, pourvu que les intervalles de temps $t_{i+1} - t_i$ soient tels que $t_{i+1} - t_i \gg a^2$, où $a$ est l'échelle microscopique de discrétisation.

### 1.1.5 Petite classe 1 : temps et probabilité de premier passage.

On étudie une marche brownienne sur un réseau cubique de dimension arbitraire $D$. Le marcheur est à $\mathbf{x}$=0 pour $t = 0$. La probabilité d'être en $\mathbf{x}$ à l'instant $t$ est notée $P(\mathbf{x}, t)$.

1. On étudie la probabilité pour que le marcheur arrive en $\mathbf{x}$ *pour la première fois* au temps $t$, notée $P_1(\mathbf{x}, t)$. Quelle relation satisfont $P$ et $P_1$ ? Il est utile de considérer les fonctions génératrices :

$$\hat{P}(\mathbf{x}, \lambda) = \sum_{t=0}^{\infty} P(\mathbf{x}, t)\lambda^t \,,\ \hat{P}_1(\mathbf{x}, \lambda) = \sum_{t=1}^{\infty} P_1(\mathbf{x}, t)\lambda^t.$$

   Relier ces deux fonctions en prenant garde au cas $\mathbf{x} = 0$.

2. Calculer la transformée de Fourier spatiale de $P$, que l'on appellera $\tilde{P}(\mathbf{k}, \lambda)$, pour une marche aléatoire dont la distribution des sauts élémentaires est donnée par $\psi(\mathbf{y})$. Considérer le cas où les sauts se font entre sites voisins sur le réseau.

3. Calculer la probabilité $p_{\mathbf{0}}$ de revenir au moins une fois à l'origine au bout d'un temps quelconque. Etudier le comportement de cette quantité en fonction de la dimension.

4. Même question pour la probabilité $p_{\mathbf{x}}$ de visiter au moins une fois le site $\mathbf{x}$. Pour quelles dimensions $D$ peut-on dire que "tous les chemins (browniens) mènent à Rome" ?

5. Caractériser la loi de distribution du temps de premier retour au site de départ aux longs temps en dimension $D = 1$ puis en dimension $D = 2$.

## 1.2 Polymères

### 1.2.1 Généralités

Les polymères sont des macromolécules qui forment de longues chaînes sur lesquelles se greffent des groupements chimiques. Les exemples abondent et sont importants tant pour leurs aspects technologiques (polyéthylène, polystyrène,...), que dans le monde du vivant (ADN, protéines, ...). Le monde des polymères est un monde d'une extrême diversité, dont l'étude fait intervenir des notions de chimie, de thermodynamique, de mécanique des fluides, de diffusion, etc... Nous nous intéresserons dans ce chapitre uniquement à une certaine classe de propriétés physiques, dites universelles, liées à la structure géométrique en longue chaîne. Nous considérerons ici le cas des homopolymères où les monomères sont tous identiques (sauf en bout de chaîne bien sûr), et linéaires (il existe aussi des polymères branchés). L'objet de notre étude est donc essentiellement le squelette du polymère, c'est à dire la longue chaîne d'atomes de carbone sur laquelle se greffent divers groupements chimiques. Considérons une telle chaîne, formée de N atomes, l'atome i étant à la position $\vec{x}_i$. Nous noterons $\vec{b}_i = \vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i$ l'orientation du lien entre les atomes i et i+1. La géométrie du polymère est caractérisée par la donnée des points $\vec{x}_i$, ou bien par la position de l'atome 1, notée $\vec{x}_1$, et de l'ensemble des liens $\vec{b}_i$, i = 1, ... N-1.

Il importe de bien faire la distinction entre deux types d'interactions entre les atomes de la chaîne. Les interactions entre atomes voisins le long de la chaîne correspondent aux liaisons covalentes et sont responsables de la cohésion et de la structure linéaire. Il existe également des interactions (électrostatiques) entre des atomes éloignés le long de la chaîne. Ces interactions dépendent de la distance entre atomes dans l'espace (ne pas confondre distance le long de la chaîne et distance dans l'espace !), mais aussi de la nature du solvant, des conditions de pH etc....

### 1.2.2 Polymère idéal, longueur de persistance

Le polymère idéal est un polymère pour lequel on peut négliger les interactions entre atomes très éloignés le long de la chaîne. C'est une idéalisation du problème initial, ou une première approximation consistant à ne prendre en compte que les interactions dominantes dûes aux liaisons covalentes ; mais cette approximation peut également être bien justifiée dans certaines conditions physico-chimiques. Les forces covalentes font intervenir les atomes voisins. Elles produisent des contraintes sur la longueur des liaisons d'une part ($\vec{b}_i \simeq \ell$, les fluctuations de longueur pouvant être étudiées par un potentiel élastique en $C(|\vec{b}_i| - \ell)^2$), et également des contraintes portant sur les angles entre liens successifs. Dans la chaîne de polyéthylène par exemple, les atomes d'hydrogène portés par deux carbones successifs ont une préférence énergétique pour la configuration "trans" qui va contraindre les angles de liaison. On le voit, la nature et le détail de ces interactions de liaison requièrent une analyse détaillée, et au cas par cas. Il existe malgré tout certaines propriétés des polymères qui ne dépendent pas de ces interactions le long de la chaîne. La situation est en fait très proche de celle de la marche aléatoire. Une configuration d'un polymère idéal est une marche aléatoire, avec une certaine probabilité de saut du marcheur qui prend en compte les interactions. Dans la mesure où on peut négliger les interactions à longue distance le long de la chaîne (polymère idéal), les propriétés universelles obtenues pour les marches aléatoires restent vraies pour les polymères. Par exemple la distance entre les deux extrémités d'un polymère de N atomes croît comme $\sqrt{N}$.

Ce lien entre polymère idéal et marche aléatoire mérite quelque élaboration. Commençons par un cas simple, où l'interaction dépend seulement des longueurs des liens. On peut écrire l'énergie potentielle de la chaîne sous la forme :

$$E = \sum_{i=1}^{N-1} V(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i) \tag{1.32}$$

où V est un certain potentiel (par exemple on pourrait utiliser des liens rigides avec $\mid \vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i \mid = \ell$, ou bien inclure des vibrations, des corrections anharmoniques etc...). En mécanique statistique classique [3], la densité de probabilité d'une conformation $\vec{x}_1, .....\vec{x}_N$ de la chaîne est :

$$P(\vec{x}_1, ....\vec{x}_N) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \Sigma_{i=1}^{N-1} V(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i)} \tag{1.33}$$

Dans cette formule, la fonction de partition $Z = \int d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_N e^{-\beta \Sigma_{i=1}^{N-1} V(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i)}$ assure la normalisation de $P(\vec{x}_1, ....\vec{x}_N)$. (1.33) n'est autre que la densité de probabilité d'une marche aléatoire de N pas dans laquelle le marcheur au point $\vec{x}$ saute vers un point $\vec{x}'$ avec une densité de probabilité :

$$\psi(\vec{x} \to \vec{x}') = \frac{e^{-\beta V(\vec{x}' - \vec{x})}}{\int d\vec{y} e^{-\beta V(\vec{y} - \vec{x})}} \tag{1.34}$$

Si le potentiel croît suffisamment vite à l'infini pour que le deuxième moment de $\vec{x}$ existe, il résulte du premier chapitre que

$$< (\vec{x}_N - \vec{x}_1)^2 >= C \ N^{2\nu} = C \ N \ , \tag{1.35}$$

où la constante $c$ dépend du potentiel, mais l'exposant $\frac{1}{2}$, lui, est universel. Ce résultat vaut aussi dans le cas d'interactions plus compliquées, par exemple mettant en jeu les angles entre liaisons. Dans ce cas le potentiel d'interaction s'écrira :

$$E = \sum_{i=1}^{N-k} V(\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}, ...., \vec{x}_{i+k}) \tag{1.36}$$

(Par exemple k = 3 pour contraindre les angles entre $\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i$ et $\vec{x}_{i+2} - \vec{x}_{i+1}$). On peut en effet se ramener de nouveau au problème d'une marche aléatoire, en introduisant un vecteur à 3(k-1) composantes $\vec{u}_i = (\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}, ..., \vec{x}_{i+k-1})$, et en considérant la marche aléatoire dans l'espace des $\vec{u}_i$. En effet la distribution de probabilité de $\vec{u}_N$ ne dépend que de la valeur de $\vec{u}_{N-1}$, puisqu'on peut écrire

$$e^{-\beta V(\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}, ...., \vec{x}_{i+k})} = c^{te} \psi(\vec{u}_{i-1} \to \vec{u}_i) \tag{1.37}$$

On a donc de nouveau une marche aléatoire markovienne (dans un espace de dimension plus grande) caractérisée par l'exposant de diffusion $\frac{1}{2}$. Bien entendu ce raisonnement ne

[3] parfaitement justifiée ici car la physique des polymères qui nous intéresse se situe à des températures proches de la température ambiante, pour laquelle kT est grand devant les écarts entre niveaux d'énergie quantiques

tient que si $k \ll N$ ; dans le cas contraire les interactions sont à longue portée et changent le comportement, comme nous le verrons dans le paragraphe 4. En se fondant sur cette propriété d'universalité, divers modèles de polymère idéal peuvent se concevoir. Bien que conduisant tous au même exposant critique, ils peuvent différer par leur plus ou moins grande adéquation à la réalité du problème physique considéré, et donc par leur pertinence pour des calculs de propriétés de chaînes de taille N finie (n'oublions pas que l'universalité est une propriété qui vaut dans la limite $N \gg 1$). Un modèle simple souvent utile est celui de la chaîne Brownienne. Si on ne prend en compte que des contraintes élastiques, la densité de probabilité d'une chaîne est :

$$P(\vec{x}_1....\vec{x}_N) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{1}{2\ell^2}\sum_{j=1}^{N}(\vec{x}_j - \vec{x}_{j+1})^2\right) \tag{1.38}$$

(décrivant des points liés par des ressorts de longueur au repos nulle et de constante élastique $\frac{k_B T}{\ell^2}$). Si cette description est de toute évidence complètement irréaliste au niveau des atomes, elle est pertinente si l'on voit les points $\vec{x}_i$ comme certains atomes "marqués" sur la chaîne, par exemple un atome marqué tous les p atomes. Ce morceau de chaîne entre $\vec{x}_i$ et $\vec{x}_{i+1}$ est lui même une marche aléatoire, et si p est assez grand on peut oublier les corrélations microscopiques, ce qui conduit à la distribution (1.38). En général au niveau microscopique la chaîne possède une certaine rigidité, si bien que les tangentes à la chaîne en deux points proches le long de la chaîne sont corrélées. La description en terme de chaîne Brownienne n'est alors possible que si p est assez grand pour que ces corrélations soient négligeables. La longueur typique correspondante est appelée longueur de persistance $\ell_p$ (voir fig.1.4). Sa définition plus précise est la suivante : à grande distance, la fonction de corrélation des tangentes à la chaîne entre deux points d'abcisse curviligne $u$ et $u+s$ décroît exponentiellement, la longueur caractéristique de cette décroissance est la longueur de persistance :

$$< \vec{t}(u+s)\vec{t}(u) >\sim exp(-s/\ell_p) \ . \tag{1.39}$$

Les propriétés d'un polymère idéal sur des échelles de longueur grandes devant $\ell_p$ sont bien caractérisées par un modèle Brownien. Au contraire pour des distances petites devant $\ell_p$ la rigidité est importante si bien que la distance physique entre deux atomes de la chaîne croît proportionnellement à leur distance le long de la chaîne.

Il est souvent utile lorsqu'on s'intéresse aux propriétés de grande distance de procéder comme pour les marches aléatoires et de prendre une limite continue $N \to \infty, \ell \to 0$, avec $S = N\ell^2$ fixé. On retrouve alors le chemin aléatoire Brownien du chapitre précédent

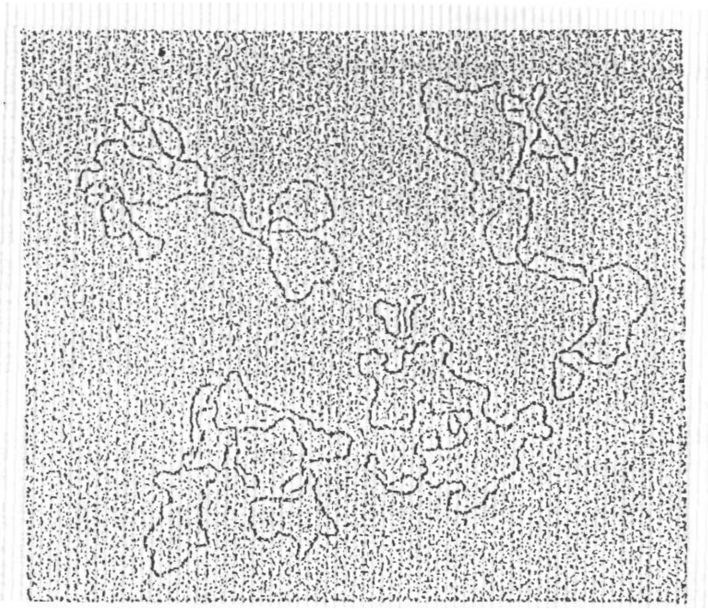


FIG. 1.4 – Images prises au microscope électronique de chaines de plasmides d'ADN contenant 7000 paires de bases. La largeur totale du domaine exploré sur la figure est de 9000$\AA$. A cause de sa conformation en double hélice, la chaine d'ADN est une molécule particulièrement rigide : sa longueur de persistance dans des conditions de salinité normales est de l'ordre de 500$\AA$. (Extrait de Boles, White, Cozzarelli, J. Mol. Biol. (1990) 931).

et la probabilité d'une configuration $\vec{x}(s)$ s'écrira formellement, après un choix d'échelle approprié, comme en (1.29) :

$$P[\vec{x}(s)] = c^{te} e^{-\frac{1}{2}\int_0^s ds' \left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial s'}\right)^2} . \tag{1.40}$$

### 1.2.3 Chaîne Brownienne dans un potentiel extérieur : équation d'évolution de $Z(\vec{x}, t)$

Dans ce paragraphe, nous considérons une chaîne Brownienne soumise à un potentiel extérieur $V(\vec{x})$, et établissons une équation aux dérivées partielles régissant l'évolution de $Z(\vec{x}, t)$. Le potentiel $V$ peut être dû à la gravité, à l'attraction par une paroi, etc... La fonction de partition pour une chaîne de longueur t attachée à l'une des extrémités en $\vec{x}(0) = \vec{0}$ et à l'autre en $\vec{x}(t) = \vec{x}$ s'écrit en notation continue :

$$Z(\vec{x}, t) = \int_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} d[\vec{x}(s)] e^{-\frac{1}{2}\int_0^t ds (\frac{\partial \vec{x}}{\partial s})^2 - \int_0^t V(\vec{x}(s)) ds} \tag{1.41}$$

(les énergies sont ici mesurées en unité de température afin d'alléger la notation). En l'absence de potentiel extérieur (V = 0), nous avions montré dans le premier chapitre que Z est solution de l'équation de la chaleur, soit :

$$-\frac{\partial Z}{\partial t} = -\Delta Z \tag{1.42}$$

Voyons comment se généralise ce résultat en présence d'un potentiel. Nous avons recours à la version discrétisée analogue à (1.29). Discrétisant l'intervalle [0,t] en N intervalles égaux, $s_i = \frac{i}{N} t = i\delta$, $\vec{x}(s_i) = \vec{x}_i$, l'intégrale de chemin (1.41) s'écrit (avec $\vec{x}_0 = \vec{0}$ et $\vec{x}_N = \vec{x}$)

$$Z(\vec{x}, t) = \int \left( \prod_{i=1}^{N-1} \frac{d^d \vec{x}_i}{\sqrt{2\pi\delta}^d} \right) \exp \left( - \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i)^2}{2\delta} - \delta \sum_{i=0}^{N} V(\vec{x}_i) \right) \tag{1.43}$$

Notons que nous avons introduit ici une certaine mesure d'intégration sur les chemins, en faisant le choix de la normalisation des intégrales sous la forme $\left(\prod_{i=1}^{N-1} \frac{d^d \vec{x}_i}{\sqrt{2\pi\delta}^d}\right)$. Ce choix de mesure est tel que Z reste normalisée ($\int d\vec{x} Z(\vec{x}, t) = 1$) lorsque le potentiel est nul. En général le choix de la mesure comporte un facteur de proportionnalité arbitraire, qui ne se reflète que dans une constante additive, sans importance, dans l'entropie.

La fonction de partition se réécrit simplement en termes de la fonction de partition avec un maillon de moins, $Z(\vec{x}_{N-1}, t - \delta)$ :

$$Z(\vec{x},t) = e^{-\delta V(\vec{x})} \int \frac{d^d\vec{x}_{N-1}}{\sqrt{2\pi\delta}^d}\, e^{-\frac{(\vec{x}-\vec{x}_{N-1})^2}{2\delta}} Z(\vec{x}_{N-1}, t-\delta) \tag{1.44}$$

Pour N grand, $\delta = t/N$ tend vers zéro. Nous introduisons la variable $\vec{y} = (\vec{x} - \vec{x}_{N-1})/\sqrt{\delta}$ et obtenons, en développant $Z(\vec{x}_{N-1} = \vec{x} - \vec{y}\sqrt{\delta}, t-\delta)$ à l'ordre $\delta$ :

$$\begin{aligned} Z(\vec{x},t) = {} & -\delta\frac{\partial Z}{\partial t} + \\ & [1-\delta V(\vec{x})] \int \frac{d^d\vec{y}}{\sqrt{2\pi}^d} e^{-\frac{\vec{y}^2}{2}} \left( Z(\vec{x},t) - \sqrt{\delta}\vec{y}.\vec{\nabla} Z(\vec{x},t) + \frac{\delta}{2}\sum_{i,j} y_i y_j \frac{\partial^2 Z}{\partial y_i \partial y_j} \right) \end{aligned} \tag{1.45}$$

Remarquons qu'il est crucial de mener le développement jusqu'au deuxième ordre dans ce calcul. L'intégrale gaussienne sur $\vec{y}$ est très simple et conduit à :

$$Z(\vec{x},t) = Z(\vec{x},t) - \delta\, V(\vec{x}) Z(\vec{x},t) - \delta\, \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{\delta}{2}\,\Delta Z + \cdots \tag{1.46}$$

ce qui donne, à la limite continue $\delta \to 0$ :

$$-\frac{\partial Z}{\partial t} = HZ \tag{1.47}$$

où H est l'opérateur

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + V(\vec{x}) \tag{1.48}$$

Cette forme est familière car H n'est autre qu'un opérateur de Schrödinger (avec des échelles de distances de temps et d'énergie choisies de manière appropriées pour transformer l'énergie cinétique $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ sous la forme $-\frac{1}{2}\Delta$). En fait mis à part ces choix d'échelle, la seule différence entre l'équation (1.48) et l'équation de Schrödinger est que l'évolution temporelle dans (1.48) est en $-\frac{\partial Z}{\partial t}$, alors que l'opérateur d'évolution en mécanique quantique est $i\frac{\partial}{\partial t}$. L'évolution de $Z(\vec{x},t)$ est ainsi régie par une équation de Schrödinger en "temps imaginaire"

Le principal intérêt de cette observation est qu'elle peut être mise à profit pour reformuler les principes de la mécanique quantique en termes d'intégrale sur les chemins. Cette reformulation féconde, due à Feynman, est brièvement développée dans la section suivante.

Inversement, nos connaissances de mécanique quantique peuvent être utilisées pour résoudre cette équation, et donc obtenir $Z(\vec{x},t)$. Supposons en effet que nous connaissions le spectre de l'hamiltonien $H$, c'est à dire les vecteurs propres $\psi_\alpha(\vec{x})$ et les valeurs propres $E_\alpha$ tels que :

$$H\psi_\alpha(\vec{x}) = E_\alpha\psi_\alpha(\vec{x}) \tag{1.49}$$

Alors il est très simple de calculer la fonction de partition du polymère Brownien dans ce potentiel. La fonction de partition au temps initial, $Z_0(\vec{x})$, (qui pourrait être par exemple $Z_0(\vec{x}) = \delta(\vec{x})$) est développée sur la base des $\psi_\alpha$ :

$$Z_0(\vec{x}) = \sum_\alpha C_\alpha\psi_\alpha(\vec{x}) \ \ , \ \ C_\alpha = \int d^d x\, Z_0(\vec{x})\psi^*_\alpha(\vec{x}) \tag{1.50}$$

et la solution de (1.47) n'est autre que :

$$Z(\vec{x}, t) = \sum_\alpha C_\alpha\psi_\alpha(\vec{x})\epsilon^{-E_\alpha t} \tag{1.51}$$

(en notation de Dirac on écrirait : $\mid Z >_t = e^{-Ht} \mid Z >_0$, et donc $< \vec{x} \mid Z_t > = \sum_\alpha < \vec{x} \mid \psi_\alpha > \epsilon^{-E_\alpha t} < \psi_\alpha \mid Z >_0$).

On voit donc que les énergies propres $E_\alpha$ s'interprètent comme les inverses des temps de relaxation du problème de diffusion. A titre d'exercice, on pourra s'exercer à retrouver la distribution gaussienne à partir de cette formule, en l'absence de potentiel extérieur (les fonctions propres sont alors des ondes planes).

### 1.2.4 Mécanique quantique et intégrales de chemins (digression)

Considérons une particule décrite par l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\ \psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{1.52}$$

Rappelons que $|\psi(\vec{x}, t)|^2 d^d x$ est la probabilité de présence de la particule dans le volume $d^d x$ autour de la position $\vec{x}$.

Le vecteur d'état décrivant la particule à l'instant $t$ est donné par :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\, |\psi(0)\rangle \tag{1.53}$$

Prenant le produit scalaire avec $\langle\vec{x}|$ de manière à obtenir $\psi(\vec{x}, t) = \langle\vec{x}|\psi(t)\rangle$ et utilisant la relation de fermeture $\int d^d y|\vec{y}\rangle\langle\vec{y}| = 1$, on obtient :

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^d y\, \langle\vec{x}|e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\, |\vec{y}\rangle\, \psi(\vec{y}, 0) \tag{1.54}$$

Cette relation exprime la fonction d'onde au point $\vec{x}$ à l'instant $t$ connaissant la fonction de la fonction d'onde à l'instant $t = 0$, en tout autre point de l'espace. On remarquera l'analogie avec un problème de diffraction. L'élément de matrice de l'opérateur d'évolution :

$$G(\vec{x}, t|\vec{0}, 0) \equiv \langle\vec{x}|e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\, |\vec{y}\rangle \tag{1.55}$$

satisfait également l'équation de Schrödinger (1.52) avec comme condition initiale : $G(\vec{x},0|\vec{y},0) = \delta^d(\vec{x}-\vec{y})$. C'est donc l'amplitude de probabilité de présence en $\vec{x}$ à l'instant $t$ pour un paquet d'onde concentré en $\vec{y}$ à l'instant initial $t=0$. One notera que $G$ admet la décomposition suivante sur les états propres du hamiltonien :

$$G(\vec{x},t|\vec{0},0) = \sum_\alpha \psi^*_\alpha(\vec{y})\psi_\alpha(\vec{x})e^{-i\frac{E_\alpha}{\hbar}t} \tag{1.56}$$

$G$ est l'analogue direct de l'amplitude $Z(\vec{x},t)$ de la section précédente. En réintroduisant les constantes dimensionées et en faisant le changement de variable $t \to it/\hbar$, on voit donc que $G$ peut s'écrire comme une intégrale de chemin :

$$G(\vec{x},t \mid \vec{y},0) = \int_{\vec{x}(0)=\vec{y}}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} d[\vec{x}(\tau)]\, e^{\frac{i}{\hbar}[\frac{m}{2}\int_0^t(\frac{\partial\vec{x}}{\partial\tau})^2 d\tau - \int_0^t V(\vec{x}(\tau))d\tau]} \tag{1.57}$$

Comme dans le cas des chemins Browniens vus précédemment, cette intégrale prend un sens précis par une discrétisation du temps. La différence essentielle avec les formules précédentes (1.41) tient dans le fait que l'argument de l'exponentielle est imaginaire : on somme sur tous les chemins que peut suivre la particule, chaque chemin est affecté ici d'un facteur de *phase*. On notera que cette phase n'est autre que l'action classique $S$ du chemin considéré, divisée par $\hbar$, avec :

$$S = \frac{m}{2}\int_0^t(\frac{\partial\vec{x}}{\partial\tau})^2 d\tau - \int_0^t V(\vec{x}(\tau))d\tau \tag{1.58}$$

Les contributions de ces divers chemins à l'amplitude de probabilité interfèrent entre elles. Notons que, à la limite classique $\hbar \to 0$, le seul chemin qui contribue est celui qui rend l'action stationnaire, qui n'est autre que la trajectoire classique. La condition de stationarité $\delta S = 0$ pour une variation $\delta\vec{x}(\tau)$ de la trajectoire conduit en effet à l'équation : $m\,\partial^2\vec{x}/\partial\tau^2 = -\nabla_x V$ qui n'est autre que l'équation du mouvement de la trajectoire classique.

Cette reformulation de la mécanique quantique utilisant les intégrales de chemin est due à R.P. Feynman. L'analogie avec l'optique ondulatoire est claire : on peut soit utiliser l'équation des ondes (ici, l'équation de Schrödinger), soit utiliser des formules intégrales de diffraction et les fonctions de Green. La limite classique est l'analogue de l'optique géométrique, dans laquelle la trajectoire du rayon lumineux est celle de chemin optique extrémal. Cette représentation fournit une description intuitive de la mécanique quantique très complémentaire du formalisme opératoriel. Nous ne la pousserons pas plus avant ici, bien qu'elle mérite à elle seule de nombreux développements, qui nous amèneraient cependant loin de notre cadre introductif. Le lecteur intéressé par cette formulation de la mécanique quantique pourra consulter par exemple le livre de Feynman et Hibbs. Une application à l'oscillateur harmonique fait également l'objet d'un des problèmes du dernier chapitre de ce livre.

### 1.2.5 Petite classe 2 : élasticité de l'ADN et modèle du ver

Des expériences récentes ont permis de mesurer des caractéristiques force-élongation dans une molédule d'ADN, attachée à un bout à un plaque, à l'autre bout à une petite bille sur laquelle on exerce une force. Les résultats sont donnés sur la figure jointe pour une molécule de longueur $L = 32.7\ \mu$m (97000 paires de bases). On cherche ici à retrouver ces caractéristiques dans le cadre de deux modèles simples.

1. On considère une chaîne formée de $N$ segments rigides de longueur $b = L/N$, libres de s'articuler les uns par rapport aux autres. On applique sur une extrémité une force d'intensité $f$ suivant l'axe $z$ tout en maintenant l'autre extrémité fixe. Montrée que l'extension moyenne de la molécule suivant l'axe $z$ est
$$z(f) = L\Big[\coth\left(\frac{f\,b}{k_B\,T}\right) - \left(\frac{k_B\,T}{f\,b}\right)\Big]\ . \tag{1.59}$$
la figure jointe (haut) montre plusieurs comparaisons de cette formule avec les données expérimentales. Que concluez-vous ?
2. On suppose maintenant que la molécule possède une rigidité locale : l'énergie associée à deux chaînons successifs, de vecteurs unitaires $\vec{u}, \vec{u}'$ est $E = J(\vec{u}-\vec{u}')^2$ où $J$ est une constante énergétique. Montrer que dans la limite continue $b \to 0$ l'énergie élastique de la molécule vaut, en l'absence de force,
$$E = k_B T\,\frac{A}{2}\int_0^L ds\,\left(\frac{d\vec{u}}{ds}\right)^2\ , \tag{1.60}$$
où $\vec{u}(s)$ est le vecteur tangent à la molécule au point d'abscisse curviligne $s$. Quelle est l'unité de $A$ ? Que représente physiquement cette grandeur ?
3. Exprimer la probabilité $P(s, \vec{u})$ que le vecteur tangent en $s$ soit dans la direction $\vec{u}$ sous la forme d'un rapport d'intégrale de chemins. En déduire que, pour une force nulle, $P$ satisfait l'équation d'évolution
$$\frac{\partial P}{\partial s} = \frac{1}{2A}\,\Delta P\ , \tag{1.61}$$
où $\Delta$ est le Laplacien sur la sphère unité en dimension trois.
Quels sont les états propres et valeurs propres de $\Delta$ ? Supposons qu'une extrémité de la molécule est orientée suivant l'axe $z$. Quelle est la probabilité que le vecteur tangent en $s$ fasse un angle $\theta$ avec cet axe ? Justifier l'appellation longueur de persistance habituellement donnée à $A$.

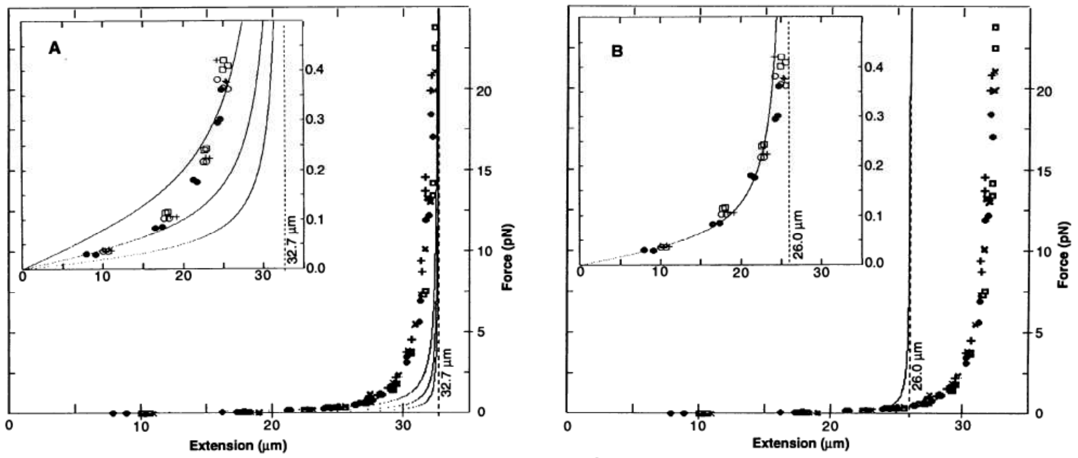



**Fig. 3.** (**A**) Force versus extension data for four different λ-dimer molecules (●, □, +, and ○) in 5 mM $Na_2HPO_4$ buffer (10 mM $Na^+$, pH 8.3). Inset: expanded vertical scale (0 to 0.5 pN). Continuous curves are from Eq. 2 assuming $L$ = 32.7 μm and $b$ = 500 Å (top), 1000 Å (middle), and 2000 Å (lower). $L$ = 32.7 μm was chosen to agree with the accepted value of 3.37 Å rise per base pair (*30*), not to fit the data. (**B**) The same data compared with a Langevin curve $L$ = 26 μm and $b$ = 1400 Å. These values were chosen to match the low-force slope.

**1124** SCIENCE • VOL. 258 • 13 NOVEMBER 1992

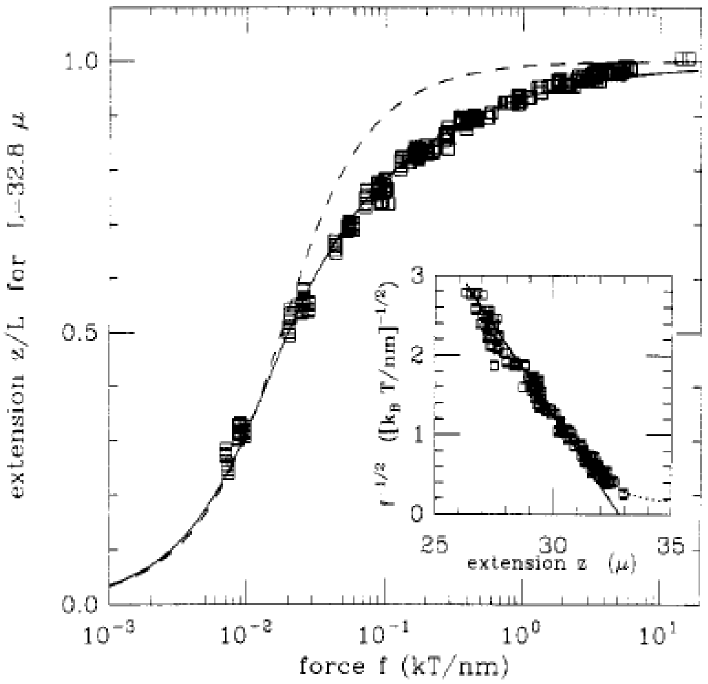



**Figure 2.** Fit of numerical exact solution of WLC force−extension curve to experimental data of Smith et al.[1] (97004 bp DNA, 10 mM $Na^+$). The best parameters for a global least-squares fit are $L = 32.8\ \mu$m and $A = 53$ nm. The FJC result for $b = 2A = 100$ nm (dashed curve) approximates the data well in the linear low-$f$ regime but scales incorrectly at large $f$ and provides a qualitatively poorer fit. Inset: $f^{-1/2}$ vs $z$ for the highest forces; the exact WLC result (solid line) is in this plot a straight line extrapolating to $L = 32.8\ \mu$m from which the experimental points begin to diverge above $z \approx 31\ \mu$m; including intrinsic elasticity (eq 19 with $\gamma = 500\ k_BT$/nm, dotted curve) improves the fit.

FIG. 1.5 – Courbes force-extension d'une molécule d'ADN. Haut : données expérimentales et comparaison avec le modèle à articulations libres (extrait de Smith, Finzi, Bustamante, Science 258, 1122 (1992)). Bas : mêmes données et comparaison avec le modèle du ver (extrait de J. Marko, E. Siggia, Macromolecules 28, 8760 (1995)).

4. On soumet maintenant la molécule à une force $f$ suivant l'axe $z$. Comment faut-il modifier l'équation d'évolution (1.61) ? Comment feriez-vous pour calculer l'extension moyenne de la molécule à : faible force, grande force ? La figure (bas) montre le meilleur fit des données obtenu pour $A = 53.4$ nm. Que vous inspire ce résultat ?
5. Est-ce-que les résultats ci-dessus vont être toujours corrects si l'on tire non plus sur une molécule d'ADN mais seulement sur l'un de ses deux filaments ?

## 1.3 Champs libres et interfaces

### 1.3.1 Intégrales fonctionnelles

Au cours des deux premiers chapitres, nous avons vu comment définir des intégrales de chemin, c'est à dire des intégrales portant sur des fonctions d'une variable, à partir de leurs expressions discrétisées. Ces intégrales se sont avérées utiles pour caractériser des marches aléatoires ou des polymères à grande échelle, c'est à dire dans un régime où le détail de la discrétisation est sans importance. Cette démarche peut être généralisée à des fonctions de plusieurs variables, ce qui permet entre autres, comme nous le verrons, d'étudier les comportements universels des systèmes au cours des transitions de phase. Dans ce chapitre, par souci d'efficacité nous allons d'abord définir le formalisme, et calculer en particulier les propriétés des champs libres. Nous traiterons en fin de chapitre seulement le problème des fluctuations thermiques des interfaces, qui nous fournira un exemple concret d'application de ce formalisme.

Nous généralisons l'intégrale de chemin en considérant un champ, qui est une fonction $\phi(\vec{x})$ où $\vec{x} \in R^d$, et en munissant l'espace de ces fonctions d'une loi de probabilité du type Boltzmann (généralisant (2.8)) :

$$P[\phi] = \frac{1}{Z} \exp\left( - \int d^d\vec{x} [\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{d} (\frac{\partial \phi}{\partial x_\mu})^2 + V(\phi)] \right) \tag{1.62}$$

où la constante de normalisation Z est donnée par :

$$Z = \int d[\phi] \exp\left( - \int d^d\vec{x} [\frac{1}{2} \sum_{\mu} (\frac{\partial \phi}{\partial x_\mu})^2 + V(\phi)] \right) \tag{1.63}$$

Cette mesure de probabilité définit une théorie des champs en $d$ dimensions. Le cas $d = 1$ redonne le polymère dans un potentiel extérieur (avec un changement de notation malheureux, mais dicté par l'usage, où les variables s,x décrivant le polymère deviennent respectivement $x_1, \phi$). En dimension d tout comme dans le cas d = 1, l'intégrale sur les fonctions $d[\phi]$ est un objet subtil que nous définissons ici par une forme discrétisée. Nous choisirons donc de considérer 1.62 et 1.63 comme des notations pour un problème de théorie des champs sur un réseau. L'espace $R^d$ est discrétisé sous forme d'un réseau $\mathcal{R}$ cubique de maille a : $\mathcal{R} = \{\vec{x} = \sum_{\mu=1}^{d} n_\mu \vec{e}_\nu a\}$, où $n_\mu \in Z$ et $\vec{e}_\mu$ sont les vecteurs d'une base orthonormée [4]. En chaque point $\vec{x}$ du réseau existe donc une variable $\phi(\vec{x})$ et la mesure d'intégration est proportionnelle à $\prod_{\vec{x}} \; d\phi(\vec{x})$ de sorte que :

$$P[\phi] = \frac{C}{Z} \exp\left(-a^d \sum_{\vec{x}\in\mathcal{R}} \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{d} \left[\frac{\phi(\vec{x}+a\vec{e}_\mu) - \phi(\vec{x})}{a}\right]^2 + V[\phi(\vec{x})]\right)\right) \tag{1.64}$$

où :

$$Z = C \int \prod_{\vec{x}\in R} d\phi(\vec{x}) \;\exp\left(-a^d \sum_{\vec{x}\in\mathcal{R}} \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{d} \left[\frac{\phi(\vec{x}+a\vec{e}_\mu) - \phi(\vec{x})}{a}\right]^2 + V[\phi(\vec{x})]\right)\right) \tag{1.65}$$

La théorie des champs ainsi discrétisée contient encore une infinité de champs (un par point du réseau), et il pourra être utile dans certains cas, en plus de la régularisation "ultraviolette" due au réseau, d'introduire une régularisation "infrarouge" en disant par exemple que $n_\mu \in \{-\frac{L}{2}, -\frac{L}{2}+1, ..., \frac{L}{2}-1, \frac{L}{2}\}$. La valeur de la constante de proportionnalité $C$ liant la mesure au $\Pi_{\vec{x}} \; d\phi(\vec{x})$ est sans importance ici puisque nous ne calculerons que des valeurs moyennes avec la mesure $P[\phi]$, où C disparaît [5].

### 1.3.2 Intégrales gaussiennes

En général, les intégrales de dimension infinie intervenant en théorie des champs ne sont pas faisables explicitement. Une exception notable, appelée théorie des champs libres, est le cas où l'énergie est quadratique dans les champs. Ce cas mérite une étude particulière car il sert de point de départ à des développements en série de perturbation. L'origine de cette simplicité tient à certaines propriétés des intégrales gaussiennes. Nous en énonçons ici quelques unes brièvement. Soient N variables aléatoires réelles $\phi_i, i = 1, ..., N$ dont la densité de probabilité est gaussienne :

[4]Bien entendu on pourrait penser à bien d'autres formes régularisées de (3.1), (3.2), ne serait-ce qu'en prenant d'autres réseaux, ou bien en imposant une borne supérieure aux modes de Fourier admis. Les problèmes physiques pour lesquels le formalisme continu (3.1) ou (3.2) est intéressant sont des cas où la physique de longue distance ne dépend pas de la régularisation.

[5]Notez toutefois que cette constante C peut être singulière lorsque l'échelle de régularisation $a \to 0$, comme nous l'avons vu en (1.29) pour les polymères Browniens.

$$P(\phi_1 ... \phi_N) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i,j} \phi_i M_{ij} \phi_j\right) \tag{1.66}$$

où $M_{ij}$ est une matrice réelle symétrique dont toutes les valeurs propres sont strictement positives, et nous noterons $G = M^{-1}$ la matrice inverse. En faisant un changement de variable pour se placer dans une base où $M$ est diagonale, on trouve :

$$Z = \int \Pi_i d\phi_i \ \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{ij} \phi_i M_{ij} \phi_j\right) = (2\pi)^{N/2} \frac{1}{\sqrt{detM}} \tag{1.67}$$

et on sait calculer aisément les "fonctions de corrélations" qui sont des valeurs moyennes de polynômes dans les champs : notant $< 0(\phi) >= \int \Pi_i d\phi_i P(\phi_1 ... \phi_n) 0(\phi)$ la valeur moyenne d'une fonction $0(\phi)$ des champs, on a en particulier :

$$< \phi_i >= 0 \quad , \quad < \phi_i \phi_j >= G_{ij} \tag{1.68}$$

La formule générale pour des corrélations contenant un nombre arbitraire de champs, connue sous le nom de "théorème de Wick", sera donnée en petite classe. On peut en donner une forme compacte en calculant la fonction génératrice de ces fonctions de corrélation, $< e^{\sum_i h_i \phi_i} >$. Le calcul est élémentaire : le changement de variable $\psi_i = \phi_i - \sum_j G_{ij} h_j$ donne :

$$\hat{Z}(h_1 ... h_N) \equiv < e^{\sum_i h_i \phi_i} >= e^{\frac{1}{2}\sum_{i,j} h_i G_{ij} h_j} \tag{1.69}$$

et on obtient ensuite les fonctions de corrélation par dérivation.

Après ces exercices simples sur des intégrales à $N$ dimensions, nous pouvons passer au cas des intégrales gaussiennes sur des champs. Les différents points $\vec{x}$ jouent le rôle des indices $i$, $\phi_i$ devient le champ $\phi(\vec{x})$, et la matrice $M_{ij}$ devient $M(\vec{x}, \vec{y})$. La forme la plus générale d'une énergie quadratique dans un champ $\phi(\vec{x})$ conduit à la mesure de probabilité :

$$P[\phi] = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2}\int d^d\vec{x} \int d^d\vec{y} \ \phi(\vec{x}) M(\vec{x},\vec{y}) \phi(\vec{y})} \tag{1.70}$$

Cette formule est l'exacte analogue de la loi de probabilité discrète (1.66). Pour lui donner un sens précis, nous pouvons suivre la procédure du paragraphe (3.1) et la discrétiser. Mais en fait le cas des mesures de probabilité gaussiennes est suffisament simple pour que nous puissions aussi deviner directement la définition correcte de ces mesures dans le cas de champs continus, par analogie avec le cas discret. En effet comparant (1.66) et (1.70), nous voyons que les points d'espace $\vec{x}$ et $\vec{y}$ jouent le rôle des indices $i$ et $j$. Dans la version continue, la matrice $M$ devient un opérateur linéaire agissant sur l'espace des champs sous la forme :

$$(M\phi)(\vec{x}) = \int d^d\vec{y}\; M(\vec{x},\vec{y})\phi(\vec{y}) \tag{1.71}$$

Nous supposerons que cet opérateur est inversible (sans quoi la loi de probabilité (1.70) n'est pas définie) et nous introduisons l'opérateur inverse $G = M^{-1}$ par la condition :

$$\int d^d\vec{z}\; M(\vec{x},\vec{z})\; G(\vec{z},\vec{y}) = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \tag{1.72}$$

où $\delta$ est la distribution de Dirac, de sorte qu'on a bien la relation d'inversion : Si $a(\vec{x}) = \int d^d\vec{y}\; M(\vec{x},\vec{y})b(\vec{y})$, alors $b(\vec{x}) = \int d^d\vec{y}\; G(\vec{x},\vec{y})a(\vec{y})$. Les fonctions de corrélations obtenues avec la mesure continue gaussienne (1.70) sont les exacts analogues de leurs versions discrètes (1.68) :

$$<\phi(\vec{x})>= 0 \quad , \quad <\phi(\vec{x})\phi(\vec{y})>= G(\vec{x},\vec{y}) \tag{1.73}$$

et la fonction génératrice [6], analogue de (1.69), prend la forme :

$$\hat{Z}[h] \equiv \int d[\phi]P[\phi]e^{\int d^d\vec{x}\;\phi(\vec{x})h(\vec{x})} = e^{\frac{1}{2}\int d^d\vec{x}\int d^d\vec{y}\; h(\vec{x})G(\vec{x},\vec{y})h(\vec{y})} \tag{1.74}$$

Notons que cette formule nous fournit en fait une définition de l'intégrale fonctionnelle dans ce cas gaussien. Cette définition est très raisonnable car le résultat (1.74) repose simplement sur le changement de variable $\psi(\vec{x}) = \phi(\vec{x}) - \int d^d\vec{y}\; G(\vec{x},\vec{y})h(\vec{y})$, et donc la seule propriété de la mesure $d[\phi]$ que nous devons supposer est l'invariance par translation dans l'espace $\phi$. Pour être complets nous devons vérifier que la définition de l'intégrale fonctionnelle que nous avons utilisée jusqu'à présent, comme limite d'une intégrale sur un nombre fini de variables obtenues en dicrétisant l'ensemble des points $\vec{x}$ par l'introduction d'un réseau, redonne bien les formules précédentes sur les fonctions de corrélation. Cette vérification est évoquée dans le paragraphe suivant, et détaillée quelque peu en appendice, dans le cas du champ libre.

### 1.3.3 Champs libres

Munis de ces outils d'intégration gaussienne, nous pouvons revenir maintenant aux théories des champs du paragraphe (3.1). Le cas du champ libre est celui ou $V(\phi)$ est quadratique : $V(\phi) = \frac{\phi^2}{\xi^2}$, auquel cas l'action (=l'énergie) prend la forme simple :

[6] Dans le cas continu on parle plutôt de fonctionnelle génératrice, puisque le développement en série de cet objet en puissances de $h$ fournit les fonctions de corrélation

$$S = \frac{1}{2} \int d^d\vec{x} \left( \sum_{\mu=1}^{d} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_\mu} \right)^2 + \frac{1}{\xi^2}\phi^2 \right) = \frac{1}{2} \int d^d\vec{x}\ \phi(\vec{x}) \left( -\Delta + \frac{1}{\xi^2} \right) \phi(\vec{x}) \tag{1.75}$$

L'opérateur linéaire $M$ de la formule (1.70) n'est autre dans le cas présent que

$$M(\vec{x},\vec{y}) = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \left( -\Delta + \frac{1}{\xi^2} \right) \tag{1.76}$$

Il s'agit donc d'un opérateur différentiel local. Dans ce cas, l'inverse $G(\vec{x},\vec{y})$ s'identifie avec la *solution élémentaire* (fonction de Green) de cet opérateur différentiel, au sens introduit dans le cours de mathématiques.

Pour calculer l'opérateur inverse $G = M^{-1}$, nous observons que la formule générale d'inversion (1.72), dans le cas d'opérateurs invariants par translation ($G(\vec{x},\vec{y}) = G(\vec{x}-\vec{y})$), est une simple convolution qui se résoud immédiatement par transformée de Fourier. De fait, en représentation de Fourier l'opérateur $M$ agit sur un champ $\tilde{\phi}(\vec{k}) \equiv \int d^d\vec{x}\ \exp(-i\vec{k}.\vec{x})\phi(\vec{x})$ par une simple multiplication par $\vec{k}^2 + 1/\xi^2$. L'opérateur inverse est donc :

$$G(\vec{x},\vec{y}) \ = \ \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{k}.(\vec{x}-\vec{y})}}{\vec{k}^2 + \frac{1}{\xi^2}} \tag{1.77}$$

Cette expression, qui donne la fonction de corrélation du champ libre $<\phi(\vec{x})\phi(\vec{y})>= G(\vec{x},\vec{y})$ peut nécessiter une certaine régularisation pour rendre l'intégrale convergente à grand k (C'est le cas si $\vec{x} = \vec{y}$ et $d \geq 2$. En suivant notre stratégie habituelle de discrétisation sur un réseau, nous trouverions (voir l'appendice 3.6) :

$$<\phi(\vec{x})\phi(\vec{y})>= \int_B \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{k}.(\vec{x}-\vec{y})}}{\frac{1}{\xi^2} + \frac{2}{a^2}\sum_\mu (1-\cos(k_\mu a))} \tag{1.78}$$

où $B = [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]^d$ est la zone de Brillouin. La formule (1.77) n'est autre que la limite continue ($a \to 0$) de la formule discrétisée (1.78), lorsque cette limite existe.

Le calcul du propagateur libre (1.77) est détaillé dans l'Appendice 1 de ce chapitre. L'expression obtenue en $d = 3$ est :

$$G(\vec{x},\vec{y}) = \frac{1}{4\pi r} e^{-r/\xi} \tag{1.79}$$

pour $r =\mid \vec{x}-\vec{y} \mid \gg a$. Ceci montre que les corrélations de la théorie des champs libres décroissent exponentiellement avec la distance, sur une longueur caractéristique $\xi$, un résultat vrai en fait à toute dimension. Des corrélations à longue portée se développent seulement dans le cas $\xi \to \infty$, c'est à dire pour une action qui ne contient qu'un terme en gradient carré : $S = \frac{1}{2}\int d^d\vec{x}\ \sum_{\mu=1}^{d}(\frac{\partial\phi}{\partial x_\mu})^2$. C'est le cas que nous allons considérer dans le prochain paragraphe.

### 1.3.4 Interface libre

Comme application du formalisme précédent, considérons les fluctuations thermiques de l'interface entre deux fluides. Nous supposerons que l'interface peut être décrite par une fonction $\phi(\vec{x})$ donnant sa hauteur $\phi$ au point $\vec{x} \in R^d$ (le cas habituel, d'une surface bidimensionnelle dans un espace de dimension 3, correspond bien sûr à $d = 2$). Ce faisant, nous spécifions une orientation privilégiée de l'interface, que nous fixerons par exemple par $\phi = 0$ aux bords d'un carré de côté L, et nous négligeons les possibilités de surplomb.

L'énergie de l'interface est proportionnelle à son aire :

$$H = \gamma \int d^d\vec{x}\sqrt{1 + (\vec{\nabla}\phi)^2} \tag{1.80}$$

où $\gamma$ est la tension de surface. Bien entendu cette formulation continue n'a de sens que sur des échelles de longueur grandes devant l'épaisseur $e$ de l'interface, et donc le problème sera régularisé (par exemple par une discrétisation de maille $a > e$).

Supposons dans un premier temps que $(\vec{\nabla}\phi)^2$ soit uniformément petit. On a alors

$$H = \gamma L^d + \frac{\gamma}{2}\int d^d\vec{x}(\vec{\nabla}\phi)^2 \tag{1.81}$$

et la probabilité de Boltzmann d'une configuration donnée $\phi(x)$ de l'interface est :

$$P(\phi) = \frac{1}{Z}e^{-\beta\frac{\gamma}{2}\int d^d\vec{x}(\vec{\nabla}\phi)^2} \tag{1.82}$$

où la fonction de partition est :

$$Z = \int d[\phi]e^{-\beta\frac{\gamma}{2}\int d^d\vec{x}(\vec{\nabla}\phi)^2} \tag{1.83}$$

On reconnaît une théorie de champ libre où la longueur de corrélation $\xi = \infty$. La fonction de corrélation est donc d'après (1.77) :

$$< \phi(\vec{x})\phi(\vec{y}) >= \frac{T}{\gamma}\int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d}\frac{e^{i\vec{k}.(\vec{x}-\vec{y})}}{k^2} \tag{1.84}$$

Une grandeur physiquement intéressante est la fluctuation de la hauteur de l'interface due aux fluctuations thermiques :

$$< (\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{y}))^2 >= \frac{2T}{\gamma} \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{1 - \cos \vec{k}.(\vec{x} - \vec{y})}{\vec{k}^2} \tag{1.85}$$

Cette fluctuation de hauteur croît avec la distance $\mid \vec{x} - \vec{y} \mid$ entre les points. Il est intéressant de regarder en particulier son comportement à grande distance, $\mid \vec{x} - \vec{y} \mid \gg 1$. Un examen de la forme (1.85) montre que, si $d > 2$ :

$$\lim_{\frac{|\vec{x}-\vec{y}|}{a} \to \infty} < (\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{y}))^2 >= \text{const.} \tag{1.86}$$

Ce qui signifie que l'interface est plane à grande échelle (NB : la $c^{te}$ dépend de la longueur de discrétisation a nécessaire pour régulariser l'intégrale à grand k). En revanche, lorsque $d < 2$, les fluctuations transverses de l'interface sont données par :

$$< (\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{y}))^2 >\sim_{|\vec{x}-\vec{y}| \gg a} \text{const.} \mid \vec{x} - \vec{y} \mid^{2-d} \tag{1.87}$$

Dans ce cas l'interface est dite rugueuse en ce sens que les fluctuations de hauteur croissent avec la distance. Cette croissance est caractérisée par un comportement universel (indépendant de la discrétisation du problème aux petites échelles $\sim a$), la différence de hauteur caractéristique croissant comme la distance à la puissance $\zeta = \frac{2-d}{2}$, qui est donc un exposant universel. Le cas d=1 correspond au problème d'une interface qui est une ligne plongée dans un espace bidimensionnel. Les fluctuations transverses d'une telle ligne sont caractérisées par $\zeta = \frac{1}{2}$, comme il se doit puisque ce problème n'est autre que celui d'une marche aléatoire [7]. Le cas le plus important physiquement, d=2, est un peu spécial. On trouve en effet :

$$< (\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{y}))^2 >= \frac{2T}{\gamma} \int \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{1 - \cos \vec{k}.(\vec{x} - \vec{y})}{\vec{k}^2} = C \frac{T}{\gamma} \mid \ln \frac{\mid x - y \mid}{a} \mid \tag{1.88}$$

donc les différences de hauteur croissent logarithmiquement avec la distance.

[7] En effet le cas $d = 1$ correspond à un champ $\phi(x)$ dont l'énergie est simplement $(1/2) \int dx (d\phi/dx)^2$, et donc à une marche aléatoire dans l'espace des $\phi$, où la variable $x$ joue le rôle du temps. Dans les deux premiers chapitres nous avions étudié les fluctuations de $\phi$ en utilisant l'équation différentielle (de la chaleur) vérifiée par la fonction de partition. L'intégration directe utilisée dans le présent chapitre retrouve bien sûr les mêmes résultats, et elle a l'avantage de se généraliser à des dimensions $d > 1$ pour lesquelles on ne peut pas écrire d'équation différentielle vérifiée par $Z$.

### 1.3.5 Accrochage d'une interface par un potentiel périodique

Un cas intéressant est celui où l'interface est soumise à un potentiel d'accrochage, $V(\phi)$, l'énergie étant :

$$H = \frac{\gamma}{2} \int d^2x[(\vec{\nabla}\phi)^2 + V(\phi)] \tag{1.89}$$

(Nous nous limitons dans ce paragraphe à la dimension d=2). En particulier si nous nous intéressons à la surface d'un cristal, il existe un tel potentiel, qui est une fonction généralement paire et périodique de $\phi$ de période b (périodicité du cristal dans la direction de $\phi$), que nous pouvons donc écrire sous la forme :

$$V(\phi) = \sum_p V_p \cos \frac{2\pi p\phi}{b} \tag{1.90}$$

L'état fondamental est obtenu en minimisant simultanément les deux termes de (1.89), ce qui impose que $\phi(\vec{x}) = \phi^*$ où $\phi^*$ est le minimum de V, que nous supposerons unique (à des translations *pb* près). Donc à température strictement nulle, le cristal aura une facette plane. Le problème est de savoir si les fluctuations thermiques vont laisser cette interface plane ou la rendre rugueuse. Il s'agit d'un problème assez délicat pour lequel nous nous contenterons ici d'une approche qualitative simple. Une méthode un peu plus élaborée, fondée sur un argument variationnel, sera développée en petite classe, le traitement complet par le groupe de renormalisation sort du cadre de ce cours introductif.

L'argument le plus simple est de nature pertubative : nous connaissons bien le cas de l'interface libre, V=0, et nous pouvons donc, dans une première approche, traiter le potentiel en pertubations. Calculons ainsi l'énergie d'accrochage $E_A =< V >_0$, où $< . >_0$ est la valeur moyenne sur les fluctuations thermiques d'une interface libre de surface $L^2$. Si $E_A$ diverge pour L grand, il est raisonnable de penser que que l'interface reste accrochée, et plane. Si au contraire $E_A$ reste finie, ou décroît, lorsque L croît, cela signifie que le potentiel d'accrochage devient sans importance à grande échelle. Or d'après le paragraphe précédent, nous savons que pour la mesure "libre", le champ $\phi(\vec{x})$ est gaussien de moyenne nulle et de variance donnée par :

$$< \phi(\vec{x})^2 >_0 = \frac{T}{\gamma} \int_{|\frac{1}{L}|<|\vec{k}|<\frac{1}{a}} \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\vec{k}^2} \simeq \frac{1}{2\pi} \frac{T}{\gamma} \ln \frac{L}{a} \tag{1.91}$$

donc :

$$< V >_0 = \int d^2\vec{x} < V(\phi(\vec{x})) >_0 = \int d^2\vec{x} \int \frac{d\phi}{\sqrt{2\pi < \phi^2 >_0}} \exp\left(-\frac{\phi^2}{2 < \phi^2 >_0}\right) V(\phi) \tag{1.92}$$

Substituant V par son développement en série de Fourier 3.24 on voit que le terme en $\cos \frac{2\pi p\phi}{b}$ a une valeur moyenne :

$$
\begin{aligned}
V_p L^2 Re & \left( \int \frac{d\phi}{\sqrt{2\pi < \phi^2 >_0}} \exp\left[ -\frac{\phi^2}{2 < \phi^2 >_0} + \frac{i2\pi p\phi}{b} \right] \right) \\
&= V_p L^2 \exp\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{b} \right)^2 p^2 < \phi^2 >_0 \right] \\
&= V_p L^2 . \exp\left[ -\frac{1}{2} 2\pi p^2 \frac{T}{\gamma b^2} \ln \frac{L}{a} \right] = c^{te} V_p L^{2 - \frac{\pi T p^2}{\gamma b^2}} \qquad (1.93)
\end{aligned}
$$

Si on considère le comportement à longue distance $L \gg 1$, l'harmonique p=1 est donc dominante. De plus on trouve qu'il existe une température de transition, dite température de transition rugueuse, donnée par :

$$
T_R = \frac{2\gamma b^2}{\pi} \qquad (1.94)
$$

et telle que : si $T < T_R$ l'interface est plane, accrochée au potentiel cristallin, et si $T > T_R$ l'interface est rugueuse. Cette transition est observée expérimentalement et des mesures précises ont permis de tester en détail les prédictions du groupe de renormalisation, en ce qui la concerne.

### 1.3.6 Petites classes 3&4 : approche variationnelle à la transition rugueuse

1. On étudie la physique d'une surface soumise à des fluctuations thermiques avec le hamiltonien :

$$
H = \int d^D x \left[ \frac{\gamma}{2} (\nabla h(x))^2 - V \cos(\frac{2\pi}{a} h(x)) \right],
$$

où $a$ est une longueur microscopique et $V, \gamma > 0$. On utilise une méthode variationnelle qui consiste à approcher le hamiltonien H par un hamiltonien libre $H_0$. On note $\langle \ldots \rangle$ les valeurs moyennes avec le poids de Boltzmann associé à H et $\langle \ldots \rangle_0$ les valeurs moyennes avec le poids de Boltzmann associé à $H_0$. Montrer que :

$$
Z = Z_0 \langle e^{-\beta(H - H_0)} \rangle_0.
$$

En déduire que, quel que soit $H_0$, on a :

$$
F = -kT \log Z \leq F_{var} = \langle H - H_0 \rangle_0 - kT \log Z_0
$$

2. On choisit un Hamiltonien d'essai libre :

$$H_0 = \frac{1}{2}\int d^D x \int d^D y \, h(x) \, G^{-1}(x,y) \, h(y),$$

où $G$ est une fonction d'essai. Calculer $F_{var}$ et minimiser par rapport à la fonction $G$. Montrer l'existence de deux phases thermodynamiques.

### 1.3.7 Appendice 1. Calcul du propagateur libre

Dans cet appendice, nous détaillons le calcul du propagateur libre :

$$G(\vec{x},\vec{y}) \;=\; \int \frac{d^d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{k}.(\vec{x}-\vec{y})}}{\vec{k}^2+\frac{1}{\xi^2}} \tag{1.95}$$

où une régularisation de l'intégrale sur le module de $\vec{k}$ ($k < \Lambda$) est sous-entendue (lorsqu'elle est nécessaire). L'invariance par translation et par rotation implique que $G(\vec{x},\vec{y})$ est en fait une fonction de la distance $r = ||\vec{x}-\vec{y}||$ seulement : $G = G(r)$.

Une première méthode consisterait à utiliser le fait que $G$ est une solution éleémentaire satisfaisant :

$$(-\Delta + \xi^{-2})G = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \tag{1.96}$$

$G(r)$ satisfait donc, pour tout $r$ non nul, l'équation différentielle :

$$-\frac{d^2}{dr^2}G - \frac{(d-1)}{r}\frac{dG}{dr} + \xi^{-2}G = 0 \tag{1.97}$$

Nous allons plutôt ici calculer directement l'intégrale, en utilisant la méthode des résidus.

Considérons tout d'abord le cas unidimensionnel ($d = 1$). On a alors :

$$G(x-y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ik(x-y)}}{k^2+\xi^{-2}} \tag{1.98}$$

L'intégrand possède deux pôles dans le plan complexe de la variable $k$ situés à $k_\pm = \pm i\xi^{-1}$. L'intégrale va être calculée en utilisant le théorème des résidus appliqué au contour fermé constitué de l'axe réel et d'un demi-cercle du côté $Imk > 0$ ou $Imk < 0$ dont on fera tendre le rayon vers l'infini.

Supposons que $x > y$ : dans ce cas la convergence de l'intégrale impose de fermer le contour du côté $Imk > 0$. Celui-ci contient donc seulement le pôle $k_+$, de résidu $\frac{\xi}{2i}e^{-(x-y)/\xi}$. Le théorème de Cauchy appliqué à ce contour donne donc :

$$G_{d=1}(r) = \frac{\xi}{2}\, e^{-r/\xi} \tag{1.99}$$

(dans le cas $x - y < 0$, c'est l'autre pôle qui contribue).

Le calcul est également très simple dans le cas $d = 3$, en utilisant des coordonnées sphériques :

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty 2\pi k^2 dk \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{e^{ikr\cos\theta}}{k^2 + \xi^{-2}} \tag{1.100}$$

soit,en effectuant l'intégrale sur $\theta$ :

$$G(r) = \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{kdk}{(2\pi)^2} \frac{\sin kr}{k^2 + \xi^{-2}} = \frac{1}{2ir} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{udu}{(2\pi)^2} \frac{e^{iur}}{u^2 + \xi^{-2}} \tag{1.101}$$

et, en utilisant le résultat ci-dessus pour $d = 1$ :

$$G_{d=3}(r) = \frac{1}{4\pi r}\, e^{-r/\xi} \tag{1.102}$$

Le cas bidimensionnel est plus délicat. Le passage en coordonnées polaires conduit à l'expression :

$$G_{d=2}(r) = \int_0^\Lambda \frac{kdk}{2\pi} \frac{J_0(kr)}{k^2 + \xi^{-2}} \tag{1.103}$$

où $J_0$ est la fonction de Bessel d'ordre 0. Dans la limite d'une grande longueur de corrélation, il est facile de vérifier qu'on retrouve la solution élémentaire du Laplacien bidimensionnel : $\frac{1}{2\pi} \ln(\Lambda r)$, alors que le comportement asymptotique pour $r \gg \xi$ est encore une décroissance exponentielle.

### 1.3.8 Appendice 2. Champ libre sur le réseau.

Dans cet appendice, nous présentons un calcul soigneux du propagateur d'un champ libre sur le réseau. Considérons un champ gaussien dont l'action est (1.75)

$$S = \int d^d\vec{x} \left( \sum_{\mu=1}^{d} \left( \frac{\partial\phi}{\partial x_\mu} \right)^2 + \frac{1}{\xi^2}\phi^2 \right) = \int d^d\vec{x}\ \phi(\vec{x})\,(-\Delta + \mu)\,\phi(\vec{x}) \tag{1.104}$$

où $\mu$ est relié à la fonction de corrélation $\xi$ introduite précédemment par $\mu = 1/\xi^2$. Nous introduisons une version discrétisée du champ $\phi$ en supposant que les point $\vec{x}$ appartiennent à un réseau hypercubique. Pour éviter des notations trop lourdes nous allons expliciter seulement le cas où $d = 2$, la généralisation à des dimensions quelconques ne pose aucun problème. Les points du réseau sont :

$$\vec{x}_{m,n} = \begin{pmatrix} ma \\ na \end{pmatrix}, \qquad avec: \ -\frac{L}{2} < ma < \frac{L}{2},\ \ -\frac{L}{2} < na < \frac{L}{2} \tag{1.105}$$

et le nombre total de degrés de liberté dans notre problème est donc : $(L/a)^2$. L'action dicrétisée est :

$$S = \frac{a^2}{2}\sum_{m,n}\left[\left(\frac{\phi(\vec{x}_{m+1,n}) - \phi(\vec{x}_{m,n})}{a}\right)^2 + \left(\frac{\phi(\vec{x}_{m,n+1}) - \phi(\vec{x}_{m,n})}{a}\right)^2\right] + \frac{\mu}{2}a^2\sum_{m,n}\phi(\vec{x}_{m,n})^2 \tag{1.106}$$

Introduisons la notation plus compacte :

$$\sum_{\vec{x}} f(\vec{x}) \equiv a^2 \sum_{m=-L/(2a)}^{L/(2a)} \sum_{n=-L/(2a)}^{L/(2a)} f\left(\vec{x}_{m,n}\right) \tag{1.107}$$

Considérant des conditions aux limites périodiques sur $\phi$, la transformée de Fourier du champ $\phi$ s'écrit :

$$\tilde{\phi}(\vec{k}) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{k}.\vec{x}}\phi(\vec{x}) \tag{1.108}$$

Les vecteurs d'onde $\vec{k}$ appartiennent au réseau réciproque :

$$\vec{k}_{p,q} = \begin{pmatrix} p\frac{2\pi}{L} \\ q\frac{2\pi}{L} \end{pmatrix} \qquad \textit{avec}: \ -\frac{L}{2a} < p < \frac{L}{2a}, \ \ -\frac{L}{2a} < q < \frac{L}{2a} \tag{1.109}$$

Il est commode d'introduire également une notation compacte pour la somme sur les modes de Fourier :

$$\sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{p=-L/(2a)}^{L/(2a)} \sum_{q=-L/(2a)}^{L/(2a)} f\left(\vec{k}_{p,q}\right) \tag{1.110}$$

de sorte que la transformée de Fourier inverse de (1.108) s'écrit :

$$\phi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{x}}\tilde{\phi}(\vec{k}) \tag{1.111}$$

En utilisant la relation

$$\sum_{\vec{x}} e^{-i(\vec{k}_{p,q}+\vec{k}_{p',q'}).\vec{x}} = \delta_{p+p',0}\delta_{q+q',0}L^2 \tag{1.112}$$

où les $\delta$ sont des symboles de Kronecker, on obtient l'expression de l'action en termes de la transformée de Fourier du champ :

$$S = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}} \tilde{\phi}(\vec{k})\tilde{\phi}(-\vec{k})\left(\frac{2}{a^2}(1-\cos(k^x a)) + \frac{2}{a^2}(1-\cos(k^y a)) + \mu\right) \tag{1.113}$$

La mesure d'intégration sur les champs est :

$$d[\phi] = C\prod_{m,n} d\phi\left(\vec{x}_{m,n}\right) \tag{1.114}$$

En passant aux nouvelles variables qui sont les transformées de Fourier des champs, nous devons faire attention au fait que, $\phi$ étant réel, sa transformée de Fourier vérifie $\tilde{\phi}(-\vec{k}) = \tilde{\phi}(\vec{k})^*$. Nous introduisons donc les parties réelle et imaginaire :

$$\tilde{\phi}(\vec{k}_{p,q}) = u_{p,q} + iv_{p,q} \tag{1.115}$$

où $u_{-p,-q} = u_{p,q}$ et $v_{-p,-q} = -v_{p,q}$, de sorte que nous pouvons prendre comme variables indépendantes les $u_{p,q}$ et $v_{p,q}$ avec $p > 0$ par exemple [8], et écrire :

$$d[\phi] = C \prod_{p>0,q} du_{p,q} dv_{p,q} \tag{1.116}$$

Après transformation de Fourier, la fonction de partition se présente sous forme d'intégrales factorisées :

$$\begin{aligned} Z = \quad & C \prod_{p>0,q} \int du_{p,q} dv_{p,q} \\ & \exp \left( -\frac{1}{2} \left( u_{p,q}^2 + v_{p,q}^2 \right) \left( \frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(p\frac{2\pi a}{L}) \right] + \frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(q\frac{2\pi a}{L}) \right] + \mu \right) \right) \end{aligned} \tag{1.117}$$

et se calcule aisément :

$$\ln Z = C^{te} - \frac{1}{2} \sum_{p,q} \ln \left( (\frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(p\frac{2\pi a}{L}) \right] + \frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(q\frac{2\pi a}{L}) \right] + \mu \right) \tag{1.118}$$

On déduit aussi facilement la fonction de corrélation entre les variables $u$. Pour $p$ et $p'$ positifs, on a :

$$< u_{p,q} u_{p',q'} >= \frac{L^2}{2} \frac{1}{\frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(p\frac{2\pi a}{L}) \right] + \frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(q\frac{2\pi a}{L}) \right] + \mu} \delta_{p,p'} \delta_{q,q'} \tag{1.119}$$

La corrélation des $v$ est donnée par la même formule et les corrélations croisées $< uv >$ s'annulent. On déduit facilement la corrélation entre les champs $\phi$, qui s'écrit en transformée de Fourier :

$$< \tilde{\phi}(\vec{k}_{p,q}) \tilde{\phi}(\vec{k}_{p',q'}) >= L^2 \delta_{p,-p'} \delta_{q,-q'} \frac{1}{\frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(p\frac{2\pi a}{L}) \right] + \frac{2}{a^2} \left[ 1 - \cos(q\frac{2\pi a}{L}) \right] + \mu} \tag{1.120}$$

et dans l'espace des $\phi(x)$ :

$$< \phi(\vec{x}) \phi(\vec{y}) >= \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}.(\vec{x}-\vec{y})}}{\frac{2}{a^2}(1 - \cos(k^x a)) + \frac{2}{a^2}(1 - \cos(k^y a)) + \mu} \tag{1.121}$$

Prenant la limite où $L \to \infty$, on voit que la somme $\sum_{\vec{k}}$ définie en (1.110) devient une intgrale sur la première zône de Brillouin et la fonction de corrélation est bien égale au résultat donné en (1.84).

[8] Il faut aussi ajouter les modes avec $p = 0$ et $q \geq 0$, nous ne les écrivons pas explicitement pour ne pas alourdir encore les notations

# Chapitre 2

# Théorie des champs en interaction

## 2.1 Transitions de phase : généralités

### 2.1.1 Introduction

Nous abordons ici un chapitre de la physique statistique dont nous allons découvrir progressivement les liens profonds avec les problèmes de marches aléatoires et surfaces fluctuantes (et de leurs interactions) considérés jusqu'ici. Il s'agit de la physique des transitions de phase (ou changement d'états) survenant entre les différents états physiques de la matière. Parmi de (nombreux) exemples, citons :

- La transition entre une phase paramagnétique et une phase ferromagnétique d'un milieu aimanté. En dessous de la température critique $T_c$ (température de Curie), l'aimantation permanente $\vec{M}$ est non-nulle. Elle est nulle au dessus de $T_c$ (expérience du barreau aimanté chauffé).

- La transition vers un état ferroélectrique, présentant une polarisation permanente $\vec{P}$ à basse température dans un isolant diélectrique.

- La transition liquide/gaz, etc...

Comme nous le verrons, le lien entre ces problèmes et les sujets précédents est qu'il s'agit de phénomènes collectifs mettant en jeu un grand nombre de degrés de liberté (une infinité) et pour lesquels les outils de la théorie des champs se révèlent indispensables. Historiquement, l'origine de ces phénomènes n'a pas toujours été claire. Une des questions centrales était de comprendre s'il s'agit d'un *changement des forces microscopiques* entre constituants d'un état à l'autre, ou bien si *un même hamiltonien* peut décrire les deux états, l'énigme du changement d'état se trouvant dans les propriétés statistiques de l'assemblée d'un grand nombre de constituants. Cette question a été posée dès les débuts de la mécanique statistique (fin XIXe s) et a dû attendre les travaux de Peierls et Onsager (1930 - 1940) pour trouver une réponse. C'est en fait la deuxième hypothèse qui se révèle valide : aucun changement des lois microscopiques n'est à invoquer. Dans la suite, on se référera constamment à l'exemple du ferromagnétisme, mais c'est surtout pour fixer les idées.

Schématiquement, nous considérerons un solide dont chaque atome porte un moment magnétique $\vec{\mu}_i$. L'origine de ce moment est, par exemple, le spin des électrons des couches externes incomplètes. Ces moments interagissent entre eux et sont en équilibre à la température T. On considérera pour simplifier un cas où les interactions microscopiques tendent à aligner les moments entre eux (ferromagnétisme).

A température nulle $T = 0$, les moments sont tous alignés entre eux de manière à minimiser l'énergie totale. A toute température finie, un désordre thermique apparait dans les orientations, mais pour $T < T_c$, le moment magnétique moyen reste fini :

$$\vec{M} =< \sum_{i=1}^{N} \vec{\mu}_i >\neq \vec{0} \tag{2.1}$$

Au contraire, pour $T > T_c$, le désordre thermique détruit entièrement cet ordre orientationnel : $\vec{M} = \vec{0}$.

L'état de haute température est très désordonné. Celui de basse température est "plus ordonné". Les deux états peuvent être distingués par la valeur de $\vec{M}$, dont le comportement typique en fonction de la température est représenté sur la fig.2.1. On appelle traditionnellement $\vec{M}$ le "paramètre d'ordre" de la transition. La fonction M(T) possède une singularité à $T_c$, ou "comportement critique". Dans le cas le plus fréquent, où cette singularité est une loi de puissance, on note :

$$M(T) \sim (T_c - T)^{\beta} \tag{2.2}$$

$\beta$ est l'exposant critique associé au paramètre d'ordre. Des singularités plus subtiles qu'une simple loi de puissance sont cependant possibles pour certains modèles !

Que veut dire en fait le terme "plus ordonné" que nous avons utilisé pour décrire la phase de basse température ? Une caractérisation plus précise consiste à considérer les symétries de chacun des états. L'état de haute température ne privilégie aucune direction : l'invariance par rotation y est clairement respectée *en moyenne*. Au contraire, l'état de basse température privilégie une direction et cette symétrie est donc "brisée". Bien entendu, la conséquence de cette symétrie microscopique est que l'alignement global des moments dans une direction quelconque à T=0 est également probable : ce sont les conditions aux limites, ou les défauts du système qui fixent la direction de brisure (ou la manière

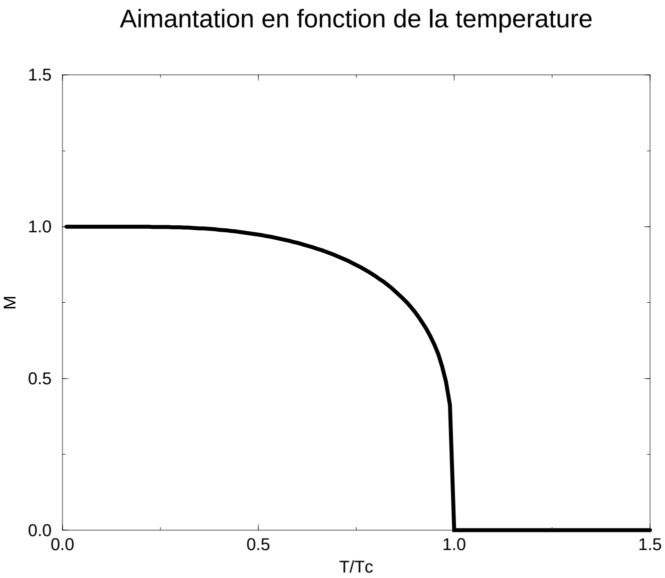



FIG. 2.1 – Allure du paramètre d'ordre (ici l'aimantation) en fonction de la température. Il s'annule à $T > T_c$, et la singularité à $T \to T_c^-$ est en $M(T) \sim (T_c - T)^\beta$.

dont on prépare le système). L'exemple de l'instabilité mécanique de flambage d'une tige (fig.2.2) donne à cette notion de brisure de symétrie un contenu très concret. Dans ce cas, c'est la contrainte extérieure appliquée à la tige qui joue le rôle de la température, et la déformation latérale celui du paramètre d'ordre.

### 2.1.2 Modèle d'Ising

Nous allons préciser ces notions sur le modèle de mécanique statistique le plus simple qui donne lieu à de tels comportements : le modèle d'Ising (Lenz 1920). Ce modèle consiste

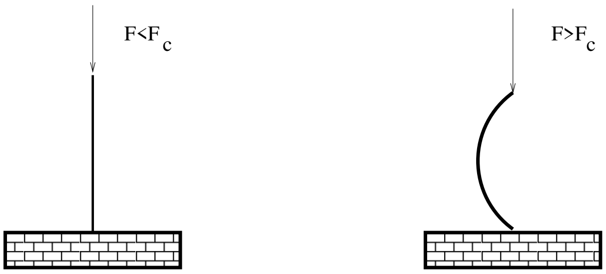



FIG. 2.2 – Un exemple de brisure de symétrie dans un problème de mécanique : le flambage d'une poutre. L'invariance par rotation est brisée lorsque la force dépasse la valeur critique du flambage

en une assemblée de "spins" $S_i = \pm 1$ placés aux noeuds d'un réseau régulier en dimension $d$, dont les interactions sont gouvernées par le hamiltonien :

$$H = -\sum_{i<j} J_{ij} S_i S_j \equiv -J \sum_{<ij>} S_i S_j \tag{2.3}$$

avec $J_{ij} = 0$ si $i, j$ ne sont pas plus proches voisins, et $J_{ij} = J$ pour $i, j$ voisins (ce que signale le symbole $< ij >$). On considèrera le cas $J > 0$ traduisant une tendance à l'alignement.

Il est clair que ce modèle est très simpliste lorsqu'il s'agit de décrire le ferromagnétisme de manière réaliste : les effets quantiques sont ignorés et le caractère vectoriel des spins également. Cependant il peut être justifié pour certains matériaux (forte anisotropie d'échange $J_z \gg J_{x,y}$), mais nous ne nous attarderons pas ici sur cette justification. De plus, la mécanique statistique d'un ensemble de variables binaires en interaction a une portée plus générale que le ferromagnétisme : gaz sur réseau, assemblée de neurones, etc...

Les principes de la mécanique statistique conduisent à considérer la fonction de partition dans l'ensemble canonique :

$$Z(\beta) = \sum_s e^{-\beta H[s]} \quad , \quad \beta \equiv \frac{1}{kT} \tag{2.4}$$

où $s$ désigne toutes les $2^N$ configurations possibles des spin $\{S_1 = \pm 1, ..., S_N = \pm 1\}$ ($N$ est le nombre de sites du réseau). Pour N fini, Z(T) est analytique en T pour tout $T \neq 0$ : on ne peut donc avoir de singularités de l'énergie libre ou de M(T). Il n'y a donc à strictement parler *pas de phénomène critique pour un sytème de taille finie.* Il s'agit d'un effet caractéristique de la limite thermodynamique $N \to \infty$, et des systèmes à *un nombre infini de degrés de liberté.*

• **Compétition ordre/désordre : origine physique des transitions de phase**.

La fonction de partition peut être réecrite sous la forme d'une somme sur les énergies accessibles au système :

$$Z = \sum_s e^{-\beta H(s)} = \sum_E e^{-\beta(E - TS(E))} \tag{2.5}$$

où $S(E) = k \ln \Omega(E)$ est l'entropie associée au niveau d'énergie $E$, $\Omega(E)$ désignant le nombre de configurations des spins ayant l'énergie $E$. $E$ et $S(E)$ sont toutes deux des quantités extensives, proportionnelles à $N$. La somme ci-dessus est donc dominée par les termes minimisant l'énergie libre $E - TS(E)$ :

- pour $T$ petit : on cherche surtout à minimiser l'énergie $E$, et les configurations ordonnées sont ainsi favorables

- pour T grand : on maximise $S$, favorisant ainsi le désordre thermique.

Cette compétition ordre/désordre (ou énergie/entropie) constitue l'origine physique des phénomènes de transition de phase. La température critique est de l'ordre de l'échelle d'énergie caractéristique du problème : $kT_c \simeq J$ (la valeur numérique précise du rapport $kT_c/J$ dépend des détails du modèle, du réseau, etc...).

Les configurations de basse énergie (ordonnées) sont peu nombreuses : très peu de termes contribuent à $Z$ à basse température. Les configurations très désordonnées sont exponentiellement nombreuses ($S \sim Nkln2$) et ont une énergie plus grande : ce sont elles qui contribuent à $Z$ à haute température.

• **Symétrie brisée (suite) : cas d'Ising**.

Dans le cas du modèle d'Ising, la symétrie de $H$ est le retournement global des spins $S_i \to -S_i$ (groupe discret $Z_2$). L'aimantation par spin est donnée par :

$$m = \frac{M}{N} =< \frac{1}{N}\sum_i S_i >=< S_1 >= \frac{1}{Z}\sum_s S_1 e^{-\beta H[s]} \tag{2.6}$$

Si on ignore les problèmes de condition aux limites, on peut changer $S_i \to -S_i$ dans cette somme et conclure que m = 0 ! Il n'y aurait donc pas de transition de phase, et pas de brisure de symétrie. Pour y voir plus clair, appliquons un champ magnétique $h$ qui brise explicitement cette symètrie en privilégiant une orientation :

$$H = -J\sum_{<ij>} S_i S_j - h\sum_i S_i \tag{2.7}$$

L'aimantation par spin peut s'écrire :

$$m = \frac{1}{N\beta}\frac{\partial}{\partial h} lnZ \tag{2.8}$$

La symétrie d'Ising impose :

$$\lim_{h\to 0^+} m_N(h) = 0 \tag{2.9}$$

pour tout N fini, et donc en particulier :

$$\lim_{N\to\infty}\lim_{h\to 0^+} m_N(h) = 0 \tag{2.10}$$

Mais on peut se demander si :

$$\lim_{h\to 0^+}\lim_{N\to\infty} m_N(h) \tag{2.11}$$

est non-nulle. La réponse n'est plus évidente : c'est cette quantité qui doit être considérée pour définir précisément la brisure de symétrie. Ainsi :

$$T > T_c : \lim_{h\to 0^+}\lim_{N\to\infty} m_N(h) = 0 \tag{2.12}$$

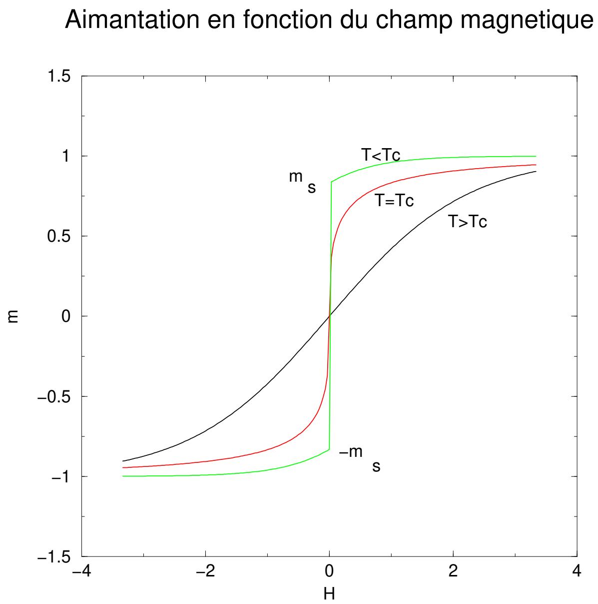



FIG. 2.3 – Allure de l'aimantation en fonction du champ magnétique, pour diverses valeurs de la température. A hautes températures, $T > T_c$, l'aimantation est une fonction analytique du champ, qui s'annule en champ nul. A basse temperature, $T < T_c$, l'aimantation est une fonction discontinue lorsque le champ s'annule : à cause du phénomène de brisure de symétrie, un champ infinitésimal positif (respectivement négatif) suffit à induire une aimantation macroscopique finie positive $m_s$ (resp négative). A la température critique, $T = T_c$, l'aimantation est une fonction continue du champ, mais qui est non analytique à $H = 0$ : pour $H \to O^+$, elle s'annule comme $m \sim H^{1/\delta}$, un exposant qui n'est en général pas entier. et la singularité à $T \to T_c^-$ est en $M(T) \sim (T_c - T)^\beta$.

$$T < T_c : \lim_{h \to 0^+} \lim_{N \to \infty} m_N(h) = m_s \neq 0 \tag{2.13}$$

$m_s$ est l'aimantation spontanée par spin, paramètre d'ordre de la transition. En dessous de $T_c$, les deux limites ne commutent pas ! Bien entendu, la symétrie entre les 2 directions possibles de brisure impose :

$$\lim_{h \to 0^+} \lim_{N \to \infty} m(h) = m_s = - \lim_{h \to 0^-} \lim_{N \to \infty} m(h) \tag{2.14}$$

A $T = T_c$ on a la dépendance singulière :

$$m(T = T_c, h) \sim h^{1/\delta} \quad , \quad h \to 0 \tag{2.15}$$

L'allure typique de $m(h)$ est représentée sur la fig.2.3.

Pour $T > T_c$ et $T < T_c$ la susceptibilité magnétique :

$$\chi \equiv \frac{\partial m}{\partial h} |_{h=0} \tag{2.16}$$

est finie. Elle diverge à $T = T_c$ :

$$\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma} \ , \ T \to T_c^+ \tag{2.17}$$

$$\chi \sim (T_c - T)^{-\gamma'} \ , \ T \to T_c^- \tag{2.18}$$

en fait, on montre et on observe que $\gamma = \gamma'$. Les fonctions thermodynamiques sont également singulières à $T = T_c$ :

$$\frac{1}{N} F(T, h = 0) = F_{reg}(T) + A(T) \mid T - T_c \mid^{2-\alpha} \tag{2.19}$$

où $F_{reg}$ est une contribution analytique en $T$ à $T = T_c$. La chaleur spécifique est obtenue en dérivant deux fois :

$$C = C_{reg}(T) + \mid T - T_c \mid^{-\alpha} \tag{2.20}$$

Les exposants $\alpha, \gamma, \delta$ constituent, avec l'exposant $\beta$ associé au paramètre d'ordre (défini plus haut), la liste des exposants critiques pour les quantités thermodynamiques.

Les quantités M(h), $\chi$(T), C(T) peuvent être mesurées expérimentalement par des mesures thermodynamiques (éventuellement en présence d'un champ extérieur).

### 2.1.3 Transitions de phase et corrélations

Lorsque $T \to T_c^+$, les spins deviennent de plus en plus interdépendants. En pratique, à une température $T > T_c$, le système s'organise en domaines de taille caractéristique $\xi(T)$ au sein desquels les spins ont des orientations fortement corrélées autour d'une direction moyenne. Pour $T \to T_c^+$, la longueur $\xi(T)$ diverge. La quantité mesurant ces effets est la fonction de corrélation ("connexe") :

$$G_{ij} = < S_i S_j > - < S_i > < S_j > \tag{2.21}$$

(La soustraction n'est opérante que pour $T < T_c$). Lorsque la distance $r_{ij}$ entre les spins $S_i, S_j$ tend vers l'infini, les spins deviennent des variables indépendantes, de sorte que :

$$< S_i S_j > \to_{r_{ij} \to \infty} < S_i > < S_j > = m_s^2 \tag{2.22}$$

Ainsi, une caractérisation directe à h = 0 de la brisure de symétrie est la valeur de la limite :

$$\lim_{r_{ij} \to \infty} < S_i S_j > \tag{2.23}$$

Pour $T > T_c$ (comme pour $T < T_c$ grâce à la soustraction), $G_{ij}$ décroît exponentiellement :

$$G_{ij} \sim e^{-R_{ij}/\xi} \tag{2.24}$$

(avec en fait également des préfacteurs algébriques en $R_{ij}$). $\xi(T)$ est la longueur de corrélation, qui est aussi la taille typique des domaines ordonnés (en dessous de $T_c$, c'est la taille des domaines d'orientation opposée à l'orientation majoritaire). Pour $T \to T_c$, la divergence de $\xi(T)$ définit un nouvel exposant critique $\nu$ :

$$\xi(T) \sim\mid T - T_c \mid^{-\nu} \tag{2.25}$$

(On peut avoir un comportement plus complexe dans certains cas).

A $T = T_c$, $\xi = \infty$ et les fonctions de corrélation décroissent plus lentement, en loi de puissance, notée conventionnellement :

$$G(R) \mid_{T=T_c} \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}} \quad , \quad R \to \infty \tag{2.26}$$

Noter que $\eta = 0$ correspond au comportement du Laplacien inverse. A $T = T_c$, le système présente des domaines emboités de toute taille : il y a invariance d'échelle sur tout le régime de distance $a << R << L$, où $a$ est une échelle microscopique (maille du réseau) et $L$ est la taille du système. L'échelle caractéristique $\xi$ disparait de la physique du problème à $T_c$.

• **Théorème de fluctuation - dissipation**.

Introduisons un champ magnétique local $h_i$ :

$$H = -J \sum_{<ij>} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \tag{2.27}$$

On montre facilement (exercice laissé au lecteur) :

$$< S_i >= \frac{1}{\beta} \frac{\partial lnZ}{\partial h_i} \quad , \ \beta G_{ij} = \frac{\partial}{\partial h_j} < S_i >= \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 lnZ}{\partial h_i \partial h_j} \tag{2.28}$$

Ainsi $\beta G_{ij}$ mesure la réponse de l'aimantation au site i à la variation du champ local au site j. Il est crucial d'avoir fait la soustraction dans la définition de $G_{ij}$ pour établir cette relation.

L'aimantation totale $M = \sum_i < S_i >$ satisfait :

$$\frac{\partial M}{\partial h_j} = \beta \sum_i G_{ij} \tag{2.29}$$

Donc, pour un champ uniforme $h_j = h$, la susceptibilité par spin est donnée par :

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{1}{N} \sum_j \frac{\partial M}{\partial h_j} \mid_{h_j = h} = \frac{\beta}{N} \sum_{i,j} G_{ij} \tag{2.30}$$

$\chi$ est donc proportionnelle à la transformée de Fourier $G(\vec{q})$ prise à $\vec{q} = \vec{0}$. On a également :

$$\chi = \frac{\beta}{N} [< (\sum_i S_i)^2 > -(\sum_i < S_i >)^2] \tag{2.31}$$

Cette dernière égalité traduit la relation entre fonction de réponse (membre de gauche) et fluctuation à l'équilibre (membre de droite).

• **Mesure expérimentale de la fonction de corrélation**.

La fonction de corrélation de spin peut être mesurée par diffusion de neutrons lents. Les neutrons possèdent une charge nulle et un moment magnétique de spin, et sont donc sensibles aux interactions dépendant du spin.

En reprenant l'argument donné au chapitre 2, on voit que l'amplitude de diffusion par un spin situé à $\vec{R} = \vec{R}_i$ s'écrit :

$$A_i = S_i e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}_i} = S_i e^{i\vec{q}.\vec{R}_i} \quad , \quad \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}' \tag{2.32}$$

et la section efficace différentielle donne donc accès à $G(\vec{q})$ :

$$\frac{d\sigma}{d\vec{q}} \propto <\mid \sum_i S_i e^{i\vec{q}.\vec{R}_i} \mid^2 >= \sum_{i,j} < S_i S_j > e^{i\vec{q}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)} \sim NG(\vec{q}) \tag{2.33}$$

• **Résumé des exposants critiques**

Chaleur spécifique : $C \sim \mid T - T_c \mid^{-\alpha}$

Paramètre d'ordre : $m \sim (T_c - T)^{\beta}$

Susceptibilité : $\chi \sim \mid T - T_c \mid^{-\gamma}$

Longueur de corrélation : $\xi \sim \mid T - T_c \mid^{-\nu}$

à $T = T_c$ : $G(R) \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}}$ , $h \sim m^{\delta}$

### 2.1.4 Lois d'échelle. Relations entre exposants

• **Forme d'échelle de la fonction de corrélation.**

A une température arbitraire, au moins deux échelles de distance sont indispensables pour caractériser un système de spin :

- une échelle microscopique, de l'ordre de la maille du réseau $a$

- la longueur de corrélation (qui est aussi la taille typique des domaines magnétiques), $\xi(T)$.

Près de la température critique $T_c$, la longueur de corrélation diverge. La physique du système est alors dominée par les fluctuations de grande distance. Autrement dit, si on regarde la fonction de corrélation pour des séparations entre spin $r >> a$, celle ci ne dépend que du rapport $r/\xi$, et prend deux formes différentes selon que $r << \xi$ ou $r >> \xi$. Cette propriété se traduit par la *forme d'échelle* valable pour $r >> a$ et près de $T_c$ :

$$G(r) = \frac{1}{r^{d-2+\eta}}\, g(\frac{r}{\xi}) \tag{2.34}$$

- Pour $r << \xi$, les deux points considérés appartiennent au même domaine, et les deux spins sont fortement corrélés. Rien ne signale donc que $\xi$ est en fait finie, et le comportement de $G(r)$ est identique à celui du point critique. La "fonction d'échelle" $g(u)$ doit donc tendre vers une constante pour $u << 1$.

- Pour $r >> \xi$, les spins sont décorrélés, et on retrouve la décroissance exponentielle. On doit donc avoir : $g(u >> 1) \sim e^{-Cu}$.

On pourra s'exercer en montrant que les fonctions de corrélation dans l'approximation du champ moyen satisfont bien une telle forme d'échelle, avec $\eta = 0$.

Pour $T \to T_c$, la longueur de corrélation diverge en $\xi \sim |T-T_c|^{-\nu}$, et la forme ci-dessus conduit au comportement en loi de puissance déjà décrit.

Les exposants critiques $\eta$ et $\nu$ caractérisant les corrélations suffisent en fait à déterminer *tous les autres exposants critiques* $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ en $d < 4$. Ce fait remarquable ne peut être pleinement justifié qu'en utilisant les méthodes du groupe de renormalisation (brièvement introduites au chapitre 6). Cependant, il est possible de donner des justification qualitatives de ces relations entre exposants critiques, que nous présentons ici. Certaines de ces relations sont toujours valables, d'autres ne le sont que pour $d < 4$, c'est à dire lorsque le champ moyen cesse de s'appliquer.

• **Expression de $\gamma$ : conséquence de la relation fluctuation-dissipation**.

On a vu au chapitre 4 que la susceptibilité est reliée à l'intégrale de la fonction de corrélation (relation fluctuation- dissipation) : $\chi \propto \int d^d r G(r)$. On peut estimer cette intégrale en la décomposant en deux régions $r < \xi$ et $r > \xi$. La seconde région contribue par des termes réguliers près de $T_c$, en raison de la décroissance exponentielle de $G(r)$. Ainsi, on peut estimer, en utilisant la décroissance algébrique de $G(r)$ pour $r < \xi$ :

$$\chi \sim \int_{r<\xi} dr r^{d-1} \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \sim \xi^{2-\eta} \sim |T - T_c|^{-\nu(2-\eta)} \tag{2.35}$$

On en déduit la relation entre exposants :

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \tag{2.36}$$

Cette relation résulte d'une propriété très générale et est donc toujours valable (pour $d < 4$ et en champ moyen où $\gamma = 1, \nu = 1/2, \eta = 0$).

• **Forme d'échelle de l'énergie libre, réponse linéaire et exposant $\delta$**.

Considérons la réponse à un faible champ magnétique $H$. Celle-ci a été brièvement décrite dans la section 2.1.2. Pour $T = T_c$, la réponse est non-linéaire : $M \sim H^{1/\delta}$. Pour $T > T_c$, l'aimantation croît linéairement avec le champ : $M \sim \chi(T)H$, alors que pour $T < T_c$ : $M \sim M_s + \chi(T)H$, avec $M_s$ l'aimantation spontanée. La question qui se pose est de caractériser la manière dont ces régimes se raccordent. Pour $T \neq T_c$, on doit retrouver le régime non-linéaire lorsque le champ appliqué excède une valeur caractéristique $H^*$. Cette valeur est obtenue en comparant l'aimantation spontanée $M_s \sim (T_c - T)^\beta$ à la loi non-lináire $H^{1/\delta}$, de sorte que : $H^* \sim (T_c - T)^{\beta\delta}$. Pour $H \gg H^*$, la réponse est non-linéaire ; elle devient linéaire pour $H \ll H^*$. On peut résumer ces observations dans la *forme d'échelle* suivante qui décrit l'équation d'état du système pour $H$ petit et près de $T_c$ (cf. fig. 2.3) :

$$M = H^{1/\delta} f_M \left( \frac{|\theta|^{\beta\delta}}{H} \right) \tag{2.37}$$

La fonction d'échelle $f_M(u)$ doit être régulière pour $u$ petit : $f_M(u \ll 1) \sim$ *const.*, et son comportement à $u$ grand est imposé par la dépendance linéaire $M = \chi H$ : $f_M(u \gg 1) \sim u^{1/\delta - 1}$. On déduit de ce comportement que la susceptibilité doit diverger en $|\theta|^{-\beta(\delta-1)}$, et donc la relation entre exposants critiques :

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \tag{2.38}$$

Comme la précédente, cette relation est générale : on vérifiera en particulier qu'elle est satisfaite en champ moyen.

Le même raisonnement conduit à écrire une forme d'échelle pour l'énergie libre elle-même. En champ nul, sa partie singulière se comporte en $\theta^{2-\alpha}$, et ce comportement doit persister pour $H \ll H^*$. On peut donc supposer la forme suivante :

$$F_{sing} \sim \theta^{2-\alpha} f_F \left( \frac{H}{\theta^{\beta\delta}} \right) \tag{2.39}$$

La susceptibilité s'obtient en prenant la dérivée seconde de l'énergie libre par rapport à $H$. Ceci conduit à une nouvelle relation entre exposants :

$$\gamma = 2\beta\delta + \alpha - 2 \tag{2.40}$$

Eliminant $\delta$ entre les deux relations ci-dessus, on voit que les exposants $\alpha, \beta, \gamma$ sont liés par la relation :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{2.41}$$

A ce stade, on a établi 3 relations entre les 6 exposants critiques. Nous verrons au chapitre suivant que deux relations indépendantes supplémentaires peuvent être établies, mais seulement pour $d < d_c = 4$.

### 2.1.5 Généralisation : le modèle O(n)

Le modèle O(n) est une généralisation du modèle d'Ising à des spins vectoriels à n composantes $S_i^\alpha$, $\alpha = 1, ..., n$ tels que, sur chaque site $i$ :

$$\vec{S}_i^2 \equiv \sum_{\alpha=1}^{n} (S_i^\alpha)^2 = n \tag{2.42}$$

Les spins sont donc des vecteurs sur la sphère à n dimensions ($S_{n-1}$).

n = 1 : une composante $S_i = \pm 1$ c'est le cas d'Ising.

n = 2 : $S_i^x, S_i^y$ on peut se ramener à une variable angulaire en chaque site en posant : $S_i^x = \cos\theta_i$ , $S_i^y = \sin\theta_i$ ; c'est le "modèle XY".

n = 3 : modèle d'Heisenberg classique.

L'énergie d'une configuration est :

$$H = -J \sum_{<ij>} \vec{S}_i.\vec{S}_j \tag{2.43}$$

H possède une invariance O(n) manifeste : $S_i^\alpha \to R^{\alpha\beta} S_i^\beta$, où $R$ est une matrice de rotation $\in O(n)$. La phase haute température est telle que $< \vec{S}_i >= \vec{0}$ et la phase basse température est caractérisée par l'alignement des spins dans une direction (par exemple $\alpha = 1$) :

$$< S_i^1 > \neq 0 \tag{2.44}$$

La symétrie O(n) est spontanément brisée, mais pour $n \geq 2$ *il reste une invariance résiduelle* O(n-1) (rotations dans le plan orthogonal à la direction de brisure, ici 2,...,n). Cette invariance résiduelle a des conséquences physiques importantes (modes de Goldstone) qui seront brièvement abordées au chapitre suivant.

### 2.1.6 Petite classe 5 : exposants critiques du modèle $O(n \to \infty)$

1. On considère des spins vectoriels à $N$ composantes, $\vec{S}_i^2 = N$, sur un réseau cubique à $D$ dimensions. L'énergie est donnée par :

$$H = - \sum_{i,j \; ppv} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \tag{2.45}$$

Ecrire la fonction de partition en utilisant une représentation intégrale de la fonction $\delta$ :

$$\delta(\vec{S}_i^2 - N) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\alpha_i}{2\pi} \exp(-i\,\alpha_i\,(\vec{S}_i^2 - N)) \tag{2.46}$$

Faire l'intégrale sur les vecteurs $\vec{S}_i$. Evaluer l'intégrale restante par la méthode du col. Quelle est la signification physique des variables $\alpha_i$ au col ?

2. Calculer la fonction de corrélation des spins. Que vaut la longueur de corrélation ? Montrer qu'il existe une température critique en dimension plus grande que 2. Que vaut l'exposant $\eta$ ?
3. Calculer les exposants $\gamma$ et $\nu$. Discuter leurs valeurs en fonction de la dimension.

## 2.2 L'approximation de champ moyen

### 2.2.1 Généralités et propriétés thermodynamiques

Nous introduisons ici, sur l'exemple des modèles de spin et plus particulièrement du modèle d'Ising, une méthode d'approximation d'une portée très générale en physique. L'idée centrale est de remplacer un système comportant un nombre infini de degrés de liberté en interaction par un problème à un constituant plongé dans un milieu effectif défini de manière auto-cohérente par tous les autres. Nous traitons le cas du modèle d'Ising :

$$H = -J \sum_{<ij>} S_i S_j \tag{2.47}$$

et exprimons $S_i$ comme la somme de sa valeur moyenne et d'une fluctuation :

$$S_i =< S_i > +(S_i- < S_i >) \tag{2.48}$$

De sorte que :

$$H = J \sum_{<ij>} m_i m_j - J \sum_{<ij>} (S_i m_j + S_j m_i) - J \sum_{<ij>} (S_i - m_i)(S_j - m_j) \tag{2.49}$$

On a noté $m_i \equiv< S_i >$ l'aimantation locale. On peut faire apparaitre le champ moyen agissant sur le site i :

$$h_i^{moy} \equiv \sum_{j(i)} J m_j \tag{2.50}$$

dû aux $z$ voisins, dénotés par $j(i)$, du site $i$ ($z = 2d$ pour un réseau cubique). C'est la moyenne du champ local :

$$h_i = \sum_{j(i)} J S_j \tag{2.51}$$

L'approximation de champ moyen revient à négliger les fluctuations, c'est à dire à remplacer $H$ par les deux premiers termes de (2.49) :

$$H_0 = J \sum_{<ij>} m_i m_j - \sum_i h_i^{moy} S_i \tag{2.52}$$

C'est un hamiltonien de N spins découplés plongés dans un champ extérieur $h^{moy}$. Pour un problème invariant par translation $h_i^{moy} = h^{moy}$, et :

$$< S_i >= \frac{TrS_i e^{-\beta H_0}}{Tre^{-\beta H_0}} = th\beta h^{moy} \tag{2.53}$$

avec la relation d'auto-cohérence :

$$h^{moy} = \sum_{j(i)} Jm_j = zJm \tag{2.54}$$

Donc : $m = th(\beta zJm)$. En présence d'un champ extérieur $H$, cette équation devient :

$$m = \text{th}\left(\beta[zJm + H]\right) \tag{2.55}$$

• **Analyse en champ magnétique nul**

Il est commode de discuter graphiquement des racines de l équation (2.55) donnant l'aimantation. Comme on le voit sur la figure 2.4, la concavite de la fonction th(x) à $x > 0$ assure qu'il existe deux régimes de température, séparés par une température critique déterminée par le fait que la pente à l'origine de la fonction $\text{th}\left(\beta[zJm]\right)$ est égale à un :

$$kT_c = zJ \tag{2.56}$$

Pour $T > T_c$, il existe une solution unique m=0

Pour $T < T_c$, il existe 3 solutions 0, $\pm m_s$

Pour $T < T_c$, la solution $m = 0$ est instable si par exemple on rajoute un champ H infinitésimal : pour $H \to 0^+$ on a $m = +m_s$, et pour $H \to 0^-$, $m = -m_s$. Il y a donc brisure de symétrie.

On posera dans toute la suite :

$$\theta \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \tag{2.57}$$

Analysons les équations de champ moyen pour $\theta \to 0^\pm$ :

$$m \simeq (1 + \theta)(m + \frac{1}{3}m^3 + ...) \tag{2.58}$$

Le paramètre d'ordre se comporte donc en :

$$m_s \simeq \sqrt{-3\theta} \;\; , \;\; T < T_c \tag{2.59}$$

L'exposant critique $\beta$ vaut donc $\beta = 1/2$ en champ moyen.

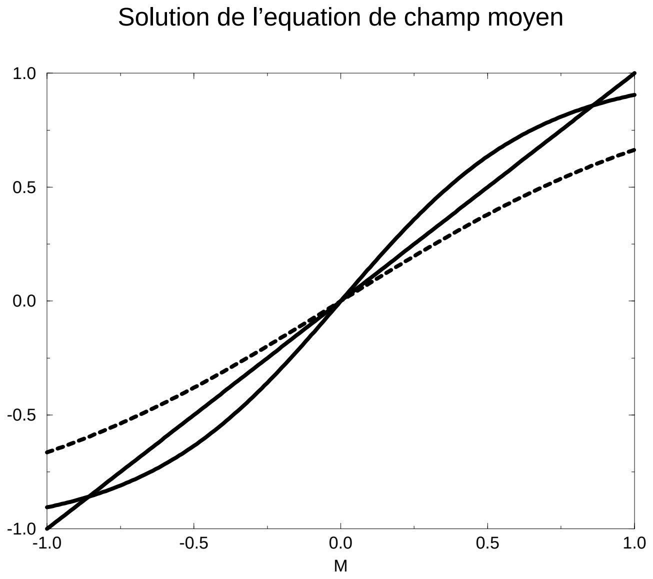



FIG. 2.4 – Pour résoudre l'équation de champ moyen (2.55) donnant l'aimantation à une température $T = 1/\beta$ donnée, on doit chercher l'intersection de la droite $y = m$ avec la courbe $y = \text{th}\,(\beta[zJm])$. Si $\beta zJm < 1$ (cas de la coube pointillée), il n'y a qu'une seule solution $m = 0$, alors que si $\beta zJm > 1$ il y a trois solutions $m = 0, \pm m_s(T)$.

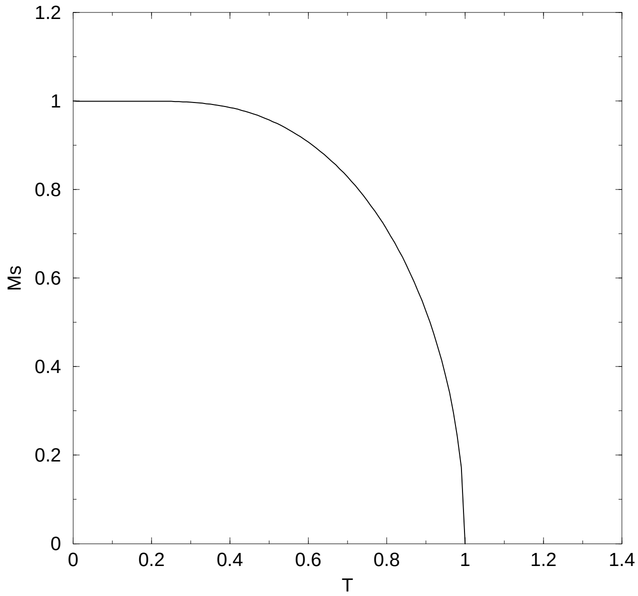



FIG. 2.5 – Aimantation spontanée en fonction de la température en champ moyen, obtenue par résolution numérique de l'équation (2.55). Les unités ont été choisies telle que $T_c = 1$. Au voisinage de la température $T = 0$, l'aimantation sature comme $T \sim 1 - 2\exp(-2/T)$. Au voisinage de $T_c$, le comportement critique est e, $m \sim \sqrt{T_c - T}$

La solution $m(T)$ pour toute température s'obtient aisément par résolution numérique (exercice) : elle est donnée en fig.2.5.

• **Réponse à un champ H petit**

a) $T > T_c$

$$m \simeq (1+\theta)m - \frac{H}{kT_c} \to m \sim \frac{H}{k(T-T_c)} \tag{2.60}$$

donc :

$$\chi \sim \chi_+ (T-T_c)^{-\gamma} \; avec \; \gamma = 1 \; et \; \chi_+ = \frac{1}{k} \tag{2.61}$$

b)$T < T_c$

Dans ce cas posons $m = m_s + \varepsilon$

$$m_s + \varepsilon = (1+\theta)(m_s+\varepsilon) + \frac{1}{3}(m_s+\varepsilon)^3 - \frac{H}{kT_c} \to \varepsilon = \frac{-H}{2k(T-T_c)} \tag{2.62}$$

On a ainsi :

$$\chi \simeq \chi_- (T_c - T)^{-\gamma'} \tag{2.63}$$

donc $\gamma' = \gamma = 1$ et $\frac{\chi_+}{\chi_-} = 2$

c) $T = T_c$

$$m = m + \frac{m^3}{3} - \frac{H}{kT_c} \to H = \frac{kT_c}{3} m^3 \tag{2.64}$$

L'exposant critique $\delta$ vaut donc $\delta = 3$ en champ moyen.

• **Energie interne**

L'énergie interne dans cette approximation est donnée par

$$E =< H_0 >= J\frac{Nz}{2}m^2 - Nh^{moy}m = -N\frac{zJ}{2}m^2 \tag{2.65}$$

puisque $Nz/2$ est le nombre de liens du réseau. On a donc :

$$\frac{E}{N} = -\frac{zJ}{2}m^2 \; (\neq 0 \, ssi \, T < T_c) \tag{2.66}$$

La chaleur spécifique par spin est donnée par :

$$\frac{C}{N} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{E}{N} = -zJm_s\frac{\partial m_s}{\partial T} \tag{2.67}$$

et $C/N = 0$ pour $T > T_c$. On trouve donc une discontinuité de la chaleur spécifique à $T = T_c$ : c'est une particularité de l'approximation de champ moyen (fig.2.6). Formellement $\alpha = 0$.

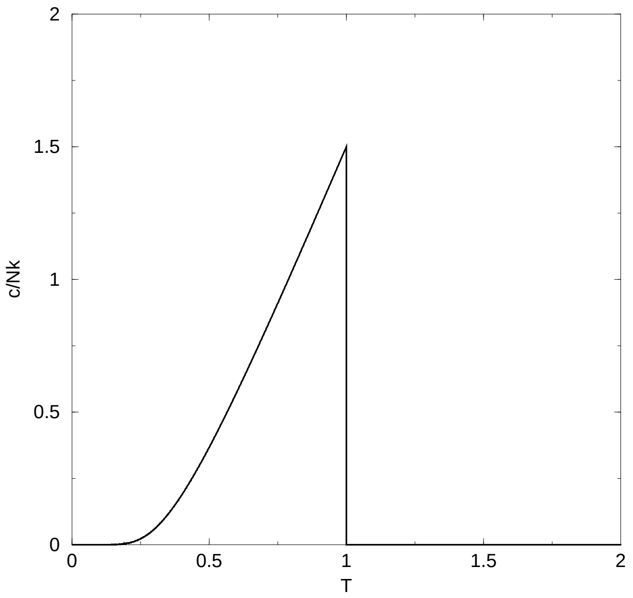



FIG. 2.6 – Capacité calorifique (en unités de $Nk$), en fonction de la température en unités où $T_c = 1$) : résultat du champ moyen, montrant la discontinuité à $T = T_c$.

• **Résumé des exposants critiques thermodynamiques dans l'approximation de champ moyen** :

$$\alpha = 0 \ , \ \beta = \frac{1}{2} \ , \ \gamma = 1 \ , \ \delta = 3 \tag{2.68}$$

Pour information, résultats connus pour Ising :

| | $\alpha$ | $\beta$ | $\gamma$ | $\delta$ |
|---|---|---|---|---|
| $d = 2$ | $ln\|T - T_c\|$ | $1/8$ | $7/4$ | $15$ |
| $d = 3$ | $0.01 \pm 0.01$ | $0.312 \pm 0.003$ | $1.250 \pm 0.002$ | $5.0 \pm 0.05$ |
| $d > 4$ $(c.m.\,exact)$ | $0$ | $1/2$ | $1$ | $3$ |

• **Energie libre de Gibbs en champ moyen**

Le calcul de l'énergie libre dans l'approximation du champ moyen s'effectue facilement, puisque le système est remplacé par un ensemble de spin indépendants. On peut par exemple calculer l'énergie libre du modèle d'Ising en présence d'un champ extérieur $h$ :

$$F[h] \ = \ -\frac{1}{\beta} \ln Z \tag{2.69}$$

puis considérer la transformée de Legendre par rapport à $h$ (cf. problème 7 en fin de volume) :

$$\Gamma[m] = F[h(m)] + mh(m) \tag{2.70}$$

où la relation $h(m)$ s'obtient en inversant la dépendance de l'aimantation en fonction du champ magnétique, donnée par : $m = -\partial F/\partial h$. On obtient ainsi l'expression importante suivante :

$$\frac{1}{N}\,\Gamma[m] = -\frac{Jz}{2}m^2 + kT\left[\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right] \tag{2.71}$$

On reconnait dans le premier terme l'énergie interne par site, et le second terme s'interprète comme l'entropie de $N$ spins indépendants : $-k(p_+ lnp_- + p_- lnp_-)$ avec $p_\pm = (1 \pm m)/2$.

• **Image intuitive de la brisure de symétrie.** Un développement au voisinage de $m = 0$ conduit à :

$$\frac{F}{NkT} = cste\, + \frac{\theta}{2}m^2 + \frac{g}{4}m^4 + ... \tag{2.72}$$

avec $\theta = \frac{T-T_c}{T_c}$ ($> 0$ si $T > T_c$, $< 0\, si\, T < T_c$), et $g = 1/3 > 0$.

L'énergie libre de champ moyen en fonction de l'aimantation est représentée sur la fig.2.7 pour $T > T_c$ et $T < T_c$. On voit que la température critique est associée à l'apparition de deux minima $\pm m_s \neq 0$, qui se déduisent l'un de l'autre par la symétrie de retournement des spins. La brisure de symétrie correspond au choix d'un de ces minima (dicté par les conditions aux limites, ou par un champ extérieur infinitésimal).

• **Autres interprétations de l'approximation de champ moyen ; limites où elle devient exacte**

a) Limite de grande connectivité (grande dimension)

Intuitivement, si chaque spin a beaucoup de voisins ($z \to \infty$) il est légitime de considérer que ceux-ci forment un "bain" extérieur. Précisément, il faut poser $J = J^*/z$ de manière à garder l'énergie par site ($\propto zJ$) finie, du même ordre que l'entropie. Alors, les fluctuations du champ local sont effectivement négligeables :

$$h_i \equiv J\sum_{j(i)} S_j = h^{moy} + J\sum_{j(i)}(S_j - m_j) = h^{moy} + \frac{J^*}{z}\times O(\sqrt{z}) = h^{moy} + J^* 0(\frac{1}{\sqrt{z}}) \tag{2.73}$$

Pour $z \to \infty$ on peut donc justifier l'approximation de champ moyen.

On pourra s'exercer à démontrer que l'équation suivante est exacte :

$$m_i =< th\beta h_i > \tag{2.74}$$

où $h_i$ est le champ local au site $i$, définit ci-dessus. En posant $h_i = h^{moyen} + \delta h$ et en développant :

$$th\beta(h^m + \delta h) = th\beta h^m + (1 - th^2\beta h^m)\beta\delta h + ... \tag{2.75}$$

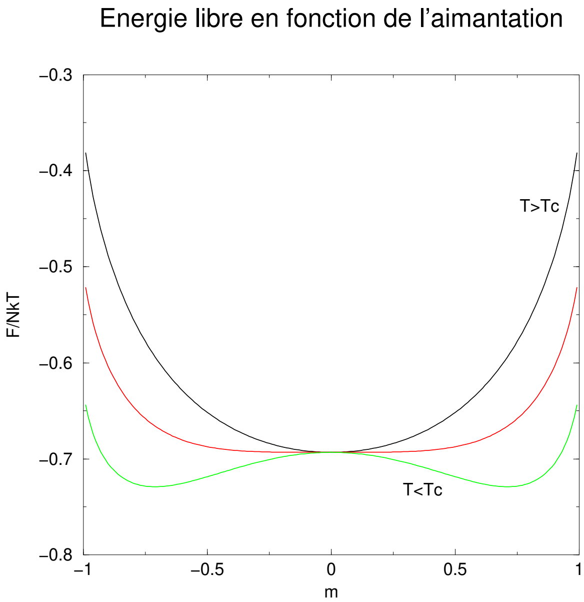



FIG. 2.7 – Energie libre (en unités de NkT) en fonction de l'aimantation. Résultat de champ moyen, tracé ici à trois températures différentes : de bas en haut, $T = .8T_c, T = T_c, T = 1.4T_c$. LA symétrie est brisée à $T < T_c$, ce qui se signale par le fait que la dérivée seconde à l'origine est négative. A la température critique, la dérivée seconde s'annule et on a pour $m$ petit : $F \sim cm^4$.

on pourrait engendrer un développement de $\beta_c$ en $\frac{1}{z}$.

En fait, on verra que les prédictions qualitatives de l'approximation de champ moyen (et les valeurs des exposants critiques) sont valables pour $d > 4$. Partant de $d = \infty$, l'effet des fluctuations lorsque la dimension diminue est de défavoriser la phase ordonnée (les fluctuations du paramètre d'ordre s'opposent à l'établissement de l'ordre).

b) Interprétation comme approximation variationnelle.

On montrera en petite classe que l'approximation de champ moyen peut être vue, en un sens précis, comme la meilleure approximation du problème en interaction par un hamiltonien de spin indépendants. Cette approche est souvent utile en pratique.

### 2.2.2 Fonctions de corrélation en champ moyen

On a vu au chapitre 4 le lien existant entre les fonctions de corrélation et la réponse à un champ local (dépendant du site), $H_i$. En présence d'un tel champ, les équations de champ moyen s'écrivent :

$$m_i = th\left[\beta(J\sum_k \Delta_{ik} m_k + H_i)\right] \tag{2.76}$$

avec $\Delta_{ik} = 1$ ssi $i, k$ sont plus proches voisins. On a vu que $\beta G_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial H_j}$, par conséquent on obtient en dérivant ces équations :

$$\beta G_{ij} = \beta(J\sum_k \Delta_{ik}\frac{\partial m_k}{\partial H_j} + \delta_{ij})(1 - m_i^2) \tag{2.77}$$

$$G_{ij} = (\beta J\sum_k \Delta_{ik} G_{kj} + \delta_{ij})(1 - m_i^2) \tag{2.78}$$

Faisons $H_i = 0$ et revenons à un système homogène. On obtient l'équation matricielle :

$$[1 - \beta J(1 - m^2)\Delta]G = (1 - m^2) \tag{2.79}$$

et donc finalement :

$$(G^{-1})_{ij} = \frac{1}{1 - m^2}\delta_{ij} - \beta J\Delta_{ij} \tag{2.80}$$

Notons au passage que la fonction de corrélation peut être développée en série sous la forme :

$$G_{ij} = (1 - m^2)\sum_{p=0}^{\infty}(\beta J(1 - m^2))^p \left(\Delta^p\right)_{ij} \ , \tag{2.81}$$

développement dont le terme d'ordre $p$ est proportionnel à $\left(\Delta^p\right)_{ij}$, le nombre de marches aléatoire de $p$ pas sur le réseau allant du site $i$ au site $j$. On voit donc apparaître dans ce cas simple un lien intime entre les phénomènes d'universalité dans les marches aléatoires et ceux des phénomènes critiques.

Léquation donnant la fonction de corrélation peut être simplifiée en transformée de Fourier, avec :

$$\Delta(\vec{k}) = 2\sum_{\mu=1}^{d} cosk_\mu = 2d\frac{1}{d}\sum_{\mu=1}^{d} cosk_\mu \equiv z\psi(\vec{k}) \tag{2.82}$$

où $\psi(\vec{k}) \equiv \frac{1}{d}\sum_\mu \cos k_\mu$ est la transformée de Fourier de la probabilité de saut, introduite dans l'étude des marches aléatoires.

$$G(\vec{k})^{-1} = \frac{1}{1-m^2} - \beta zJ\psi(\vec{k}) \equiv \frac{1}{1-m^2} - \frac{\beta}{\beta_c}\psi(\vec{k}) \tag{2.83}$$

$$G(\vec{k}) = (1-m^2)\left[1 - \frac{\beta}{\beta_c}(1-m^2)\psi(\vec{k})\right]^{-1} \tag{2.84}$$

Introduisons la fonction génératrice $\widetilde{P}(\vec{k},\lambda)$ associée à la probabilité de présence $P(\vec{x},t)$, telle qu'elle avait été définie en petite classe :

$$\widetilde{P}\left[\vec{k},\lambda\right] = \sum_{t=0}^{\infty}\sum_{\vec{x}} P(\vec{x},t)\lambda^t e^{i\vec{k}.\vec{x}} \tag{2.85}$$

On obtient alors :

$$G(\vec{k}) = (1-m^2)\widetilde{P}\left[\vec{k},\lambda = \frac{\beta}{\beta_c}(1-m^2)\right] \tag{2.86}$$

Notons que $\lambda \to 1^-$ pour $T \to T_c^\pm$ mais avec des pentes différentes :

$$1-\lambda = 1 - \frac{\beta}{\beta_c}(1-m^2) \sim 1 - \frac{\beta}{\beta_c} = \theta \ , \ T > T_c \tag{2.87}$$

$$1-\lambda \sim 1 - \frac{\beta}{\beta_c}\left[1 - 3\left(1 - \frac{\beta_c}{\beta}\right)\right] \sim -2\left(1 - \frac{\beta}{\beta_c}\right) \sim -2\theta \ , \ T < T_c \tag{2.88}$$

Ainsi :

$$T \to T_c^+ \ , \ G(\vec{k}) \simeq \frac{1}{\theta + \frac{1}{d}\sum_{\mu=1}^{d}(1 - cosk_\mu)} \tag{2.89}$$

$$T \to T_c^- \ , \ G(\vec{k}) \simeq \frac{1}{-2\theta + \frac{1}{d}\sum_{\mu=1}^{d}(1 - cosk_\mu)} \tag{2.90}$$

La limite critique $T \to T_c^\pm$ correspond donc à la limite de temps long $\lambda \to 1^-$ $(t \to \infty)$ des marches aléatoires.

N.B : Comme $\chi \propto G(\vec{k} = \vec{0})$ on retrouve $\chi \sim \chi_\pm(\pm\theta)^{-\gamma}$ avec $\frac{\chi_+}{\chi_-} = 2$ et $\gamma = 1$. Cette dernière propriété est directement reliée à la conservation de la probabilité, en effet :

$$\int d^d x P(\vec{x},t) = 1 \Longrightarrow \int d^d x \widetilde{P}(\vec{x},\lambda) \equiv \widetilde{P}(\vec{k} = 0,\lambda) = \frac{1}{1-\lambda} \tag{2.91}$$

• **Comportement à longue distance**.

Pour analyser le comportement à $\mid \vec{x} \mid \to \infty$, on doit développer $cos k_\mu \simeq 1 - k_\mu^2/2$ :

$$G(\vec{k}) \simeq \frac{1}{\vec{k}^2 + \xi^{-2}} \tag{2.92}$$

avec :

$$T \to T_c^+ \ : \ \xi^{-2} = \xi_+^{-2}\theta \ , \ T \to T_c^- \ : \ \xi^{-2} = \xi_-^{-2}|\theta| \ , \ \xi_+/\xi_- = \sqrt{2} \tag{2.93}$$

Pour $T = T_c$ ($\theta = 0$) c'est l'inverse du Laplacien, donc :

$$G(\vec{x}, T = T_c) \sim \frac{1}{\mid \vec{x} \mid^{d-2}} \tag{2.94}$$

L'exposant critique $\eta$ est donc nul en champ moyen.

Pour $T \neq T_c$ on trouve en dimension 3 (voir l'appendice 2 du Chapitre 3) :

$$G(\vec{x}) \sim \frac{1}{\mid x \mid^{d-2}} e^{-|\vec{x}|/\xi} \tag{2.95}$$

$\xi$ s'identifie donc à la longueur de corrélation, et l'exposant critique associé est $\nu = 1/2$ en champ moyen. Ce résultat, qui s'obtient simplement en comparant les variables $k \sim \xi^{-1} \sim \sqrt{\theta} \sim \sqrt{1-\lambda}$ est l'analogue directe du comportement Brownien des marches aléatoires $< \vec{x}^2 > \sim t^{2\nu}$ avec $\nu = 1/2$.

On a ainsi établi les analogies suivantes entre l'approximation de champ moyen pour les transitions de phase et les marches aléatoires Browniennes :

| $Champ\, moyen$ | $Marches\, aleatoires$ |
|---|---|
| $G(\vec{x}) =< S(\vec{0})S(\vec{x}) >$ | $\widetilde{P}(\vec{x}, \lambda)$ |
| $\|(T - T_c)/T_c\|$ | $1 - \lambda$ |
| $\chi \sim\mid T - T_c \mid^{-1} \ \ \gamma = 1$ | $\int d^d x P(\vec{x}, t) = 1$ |
| $\xi \sim\mid T - T_c \mid^{-1/2} , \nu = 1/2$ | $< \vec{x}^2 > \sim t$ |

On notera les valeurs exactes pour le modèle d'Ising en dimension $d = 2$ : $\nu = 1, \eta = 1/4$.

### 2.2.3 Généralisation au modèle 0(n). Modes de Goldstone.

On vérifie facilement que les prédictions de la théorie de champ moyen restent qualitativement inchangées pour tout $n$. Près de $T_c$, seul le développement à petit $\mid \vec{m} \mid$ est important, et il a la même forme que (2.72), avec :

$$g = \frac{n}{n+2} \tag{2.96}$$

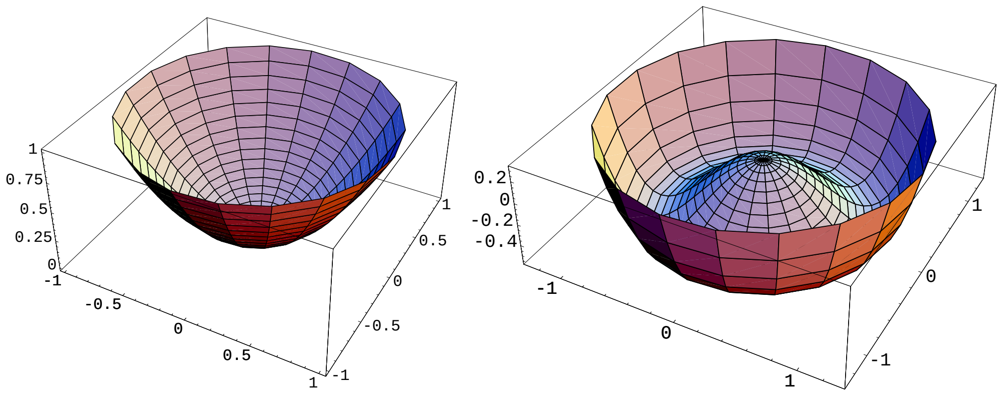



FIG. 2.8 – Brisure de symétrie dans le cas d'un modèle à symétrie $O(2)$ : Est représentée ici l'allure qualitative de l'énergie libre en fonction des deux composantes de l'aimantation, $m_x$ et $m_y$. Dans la phase haute température (figure de gauche), l'énergie libre possède un seul minimum, en $\vec{m} = \vec{0}$. Dans la phase basse température (figure de droite), le minimum est dégénéré : l'ensemble des points où l'énergie libre est minimale est un cercle $|\vec{m}| = constante$. Il y a donc des modes d'excitation d'énergie nulle.

($m^4$ désigne maintenant$(\vec{m}^2)^2$). Tous les exposants critiques sont inchangés.

Cependant la brisure de symétrie dans le cas d'un groupe continu $0(n) \to 0(n-1), n \geq 2$ a des conséquences physiques nouvelles qui n'étaient pas présentes pour n=1. Il existe en effet des excitations d'énergie nulle du système, correspondant aux modes connectant les différents minima dégénérés de l'énergie libre (fig.2.8) : ce sont les *modes de Goldstone*.

Nous allons voir leur effet sur la susceptibilité près de $T_c$ en utilisant le développement (2.72) de l'énergie libre. La réponse à une composante $H_\alpha$ du champ est :

$$H_\alpha = \frac{\partial}{\partial m_\alpha}\left[\theta\frac{\vec{m}^2}{2} + g\frac{(\vec{m}^2)^2}{4}\right] = \theta m_\alpha + g\vec{m}^2 m_\alpha \tag{2.97}$$

$$\frac{\partial H_\alpha}{\partial m_\beta} = \theta\delta_{\alpha\beta} + g\vec{m}^2\delta_{\alpha\beta} + 2g m_\alpha m_\beta \tag{2.98}$$

L'inverse de la matrice de susceptibilité est donc :

$$(\chi^{-1})_{\alpha\beta} = (\theta + 3g\vec{m}^2)\delta_{\alpha\beta} + 2g(m_\alpha m_\beta - \vec{m}^2\delta_{\alpha\beta}) \tag{2.99}$$

Pour $T > T_c$ $(\theta > 0)$, $(\chi^{-1})_{\alpha\beta} = \theta\delta_{\alpha\beta}$ comme ci-dessus.

Pour $T < T_c$ $(\theta < 0)$, l'aimantation spontanée est donnée par : $\theta + g m_s^2 = 0$, et on obtient :

$$(\chi^{-1})_{\alpha\beta} = -2\theta\delta_{\alpha\beta} - 2\theta\left(\frac{m_\alpha m_\beta}{\vec{m}^2} - \delta_{\alpha\beta}\right) = -2\theta\frac{m_\alpha m_\beta}{\vec{m}^2} \tag{2.100}$$

Introduisons les composantes transverses et longitudinales de la susceptibilité :

$$(\chi^{-1})_{\alpha\beta} \equiv \chi_T^{-1}\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{m_\alpha m_\beta}{\vec{m}^2}\right) + \chi_L^{-1}\left(\frac{m_\alpha m_\beta}{\vec{m}^2}\right) \tag{2.101}$$

On voit que $\chi_T^{-1} = 0$ pour $T < T_c$ : perpendiculairement à $\vec{m}_s, \chi^{-1} \equiv 0$. Il existe une susceptibilité infinie dans la phase ordonnée pour changer l'orientation du paramètre d'ordre au sein de la variété des états dégénérés. De même, on trouverait que les corrélations transverses restent de masse nulle (longueur de corrélation infinie) pour $T < T_c$ :

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k})^{-1} = \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{m_\alpha m_\beta}{\vec{m}^2}\right)\Gamma_T(\vec{k}) + \frac{m_\alpha m_\beta}{\vec{m}^2}\Gamma_L(\vec{k}) \tag{2.102}$$

avec $\Gamma_T(\vec{k}) \propto \vec{k}^2$ pour $T < T_c$.

Physiquement, on a la possibilité de créer dans le système des excitations de très basse énergie (ondes de spin), schématiquement représentées sur la fig.6. Ces excitations correspondent à une déformation de grande longueur d'onde du paramètre d'ordre qui effectue en fonction de la distance une rotation graduelle dans la variété des états dégénérés. Il s'agit clairement d'un mécanisme potentiellement destructeur de l'ordre à longue distance : ce sont ces modes qui sont responsables de la disparition de la phase ordonnée pour $d < 2$ (lorsque $n \geq 2$). Dans le cas d'une symétrie discrète (Ising $n = 1$), cette disparition n'a lieu que pour $d = 1$. En dimension supérieure à 2 le modèle possède une transition de phase. Chaque valeur du couple $n, d$ correspond à une classe d'universalité différente, avec de nouvelles valeurs des exposants critiques.

### 2.2.4 Validité du champ moyen en $d > 4$ : critère de Ginzburg.

On va donner ici un argument qualitatif permettant de conclure à la validité (ou tout au moins à la cohérence interne) de l'approximation de champ moyen lorsque la dimension spatiale $d$ est *supérieure à 4*, et à sa faillite pour $d < 4$.

Clairement, la limitation principale de cette approximation est qu'on fait l'hypothèse d'un paramètre d'ordre uniforme $\vec{m}$, identique en tout point. En réalité, il existe des *fluctuations spatiales* : ce sont elles qui peuvent devenir importantes et invalider l'approximation de champ moyen. On va donc chercher à estimer l'ordre de grandeur de ces fluctuations spatiales, dans un volume dont les dimensions sont celles de la portée des corrélations de spin, $\xi(T)$.

La valeur moyenne de l'aimantation dans le volume $\xi^d$ est, dans l'approximation de champ moyen et près de $T_c$, d'ordre :

$$< M > \simeq \xi^d \sqrt{T_c - T} \sim (T_c - T)^{\frac{1-d}{2}} \tag{2.103}$$

Les fluctuations de l'aimantation totale s'obtiennent en utilisant la relation de fluctuation-dissipation qui les relie à la susceptibilité, et donc à l'intégrale de la fonction de corrélation sur le volume $\xi^d$ :

$$\Delta M^2 \equiv < (M - < M >)^2 > = \sum_{ij} (S_i - < S_i >)(S_j - < S_j >) \tag{2.104}$$

$$= \int d^d x \int d^d y G(\vec{x} - \vec{y}) \simeq \xi^d \int d^d x G(\vec{x}) \tag{2.105}$$

Pour des distances inférieures à $\xi$, et près de $T_c$, la fonction de corrélation est bien approchée par sa forme au point critique et décroit donc en loi de puissance. Toujours dans le cadre du champ moyen, on obtient :

$$\Delta M^2 \simeq \xi^d \int_0^{\xi} r^{d-1} dr \frac{1}{r^{d-2}} \sim \xi^{d+2} \sim (T_c - T)^{-\frac{d+2}{2}} \tag{2.106}$$

Les fluctuations relatives de l'aimantation sont donc :

$$\frac{\Delta M^2}{M^2} \sim (T_c - T)^{\frac{d}{2} - 2} \tag{2.107}$$

On voit donc que la fluctuation relative dans un volume de corrélation s'annule pour $T \to T_c^-$ si $d > 4$. Il semble donc cohérent de négliger ces fluctuations spatiales en première approximation, comme on le fait au niveau du champ moyen. En revanche, pour $d < 4$, cette fluctuation *diverge* pour $T \to T_c^-$, et ceci constitue un indice de l'échec de cette approximation.

Il faut noter que, même pour $d < 4$, le critère $\Delta M^2 / M^2 << 1$ délimite une distance minimale à la température critique telle que, hors de ce domaine, les prédictions du champ moyen sont applicables. Il peut arriver que ce "domaine critique" soit si étroit que les écarts au champ moyen près de $T_c$ soient inobservables en pratique (cas de la transition supraconductrice lorsque la longueur de cohérence des paires est grande).

Deux remarques :

- La "validité" de l'approximation de champ moyen en $d > 4$ ne signifie pas que toutes ses conséquences *quantitatives* (par exemple la valeur de $T_c$) restent valides (ce n'est le cas que pour $d \to \infty$). Ce sont les propriétés universelles du système (comportements critiques près de $T_c$, etc...) qui restent inchangées tant que $d > 4$. La dimension $d_c = 4$ porte le nom de "dimension critique supérieure". D'autres modèles que le modèle $O(n)$ peuvent conduire à une valeur différente pour $d_c$.

- L'argument physique donné ci-dessus (du à V.Ginzburg) peut être justifié de manière bien plus précise dans le cadre de développements systématiques autour de l'approximation de champ moyen. Mais cet argument met en avant les idées physiques essentielles.

### 2.2.5 Relations entre exposants

Nous avons vu au chapitre précedent comment établir certaines relations entre exposants critiques. Un raisonnement similaire à celui que nous venons d'employer pour établir le critère de Ginzburg va nous conduire à une relations supplémentaire, en dimension $d < 4$.

• **Fluctuations d'aimantation et exposant** $\beta$

Nous avons vu au paragraphe précédent que les fluctuations $\Delta M$ de l'aimantation d'un domaine de taille $\xi$ étaient négligeables devant la valeur moyenne $< M >$ en $d > 4$. En revanche, ce critère suggérait une fluctuation relative divergente pour $d < 4$.

Si tel était réllement le cas cependant, on voit mal comment le système pourrait présenter une phase ordonnée : celle-ci devrait être détruite par les fluctuations spatiales. On est donc conduit à penser que pour $d < 4$, la fluctuation $\Delta M$ peut au plus être de l'ordre de la valeur moyenne $< M >$ elle-même. Notre estimation précédente utilisait les comportements de champ moyen, et donc $\eta = 0$. Comme on va le voir, le rôle de l'exposant $\eta$ est précisément de permettre que $\Delta M \sim < M >$, en ralentissant légèrement la décroissance des corrélations de spin par rapport à $1/r^{d-2}$.

Reprenons donc notre estimation de $< M >$ et $\Delta M$ (dans un volume de taille $\xi$), sans faire l'hypothèse de champ moyen :

$$< M > \simeq \xi^d (T_c - T)^\beta \sim (T_c - T)^{\beta - d\nu} \tag{2.108}$$

$$\Delta M^2 \sim \xi^d \int_{r<\xi} dr r^{d-1} \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \sim \xi^{d+2-\eta} \sim (T_c - T)^{-\nu(d+2-\eta)} \tag{2.109}$$

En imposant que $\Delta M \sim < M >$, on obtient la relation entre exposants, valable pour $d < 4$ :

$$\beta = \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta) \tag{2.110}$$

En dimension $d > 4$, $\Delta M \ll < M >$ et cette relation ne s'applique pas.

• **Fluctuations d'énergie libre et exposant** $\alpha$.

Le raisonnement qui va être suivi ici est assez analogue au paragraphe précédent. Nous nous placons à $T > T_c$ et envisageons une fluctuation correspondant à la création d'un domaine ordonné sur une échelle de taille $\xi$. Le coût en énergie libre d'une telle fluctuation est donné par :

$$\Delta F \simeq \xi^d \left| T - T_c \right|^{2-\alpha} \sim \left| T - T_c \right|^{2-\alpha-d\nu} \tag{2.111}$$

La probabilité qu'une telle fluctuation survienne par activation thermique est d'ordre $p_f \simeq e^{-\Delta F/kT}$. Il faut donc distinguer deux cas :

- soit $2 - \alpha - d\nu < 0$, auquel cas $\Delta F$ diverge pour $T \to T_c$, la probabilité $p_f$ tend vers 0, et les fluctuations critiques peuvent être ignorées. Comme en champ moyen $\nu = 1/2$ et $\alpha = 0$, c'est le cas tant que $d > 4$. On retrouve ainsi le critère de Ginzburg.

- soit $d < 4$, et les fluctuations ne sont plus négligeables. De manière analogue au paragraphe précédent, il parait naturel d'imposer que $p_f$ reste d'ordre un, autrement dit que $\Delta F \sim kT$, sans quoi l'ordre devrait être détruit par les fluctuations. Ceci conduit donc à la relation entre exposants, valable pour $d < 4$ :

$$\alpha = 2 - d\nu \tag{2.112}$$

• En résumé, les arguments ci-dessus, joints à ceux du chapitre précédent, suggèrent qu'en dimension inférieure à la dimension critique supérieure $d < d_c = 4$, tous les exposants critiques s'expriment en terme de $\eta$ et $\nu$ seulement, qui caractérisent la fonction de corrélation. En terme de ces exposants, les relations établies ci-dessus s'écrivent :

$$\alpha = 2 - \nu d \ , \ \beta = \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta) \ , \ \gamma = \nu(2 - \eta) \ , \ \delta = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} \tag{2.113}$$

### 2.2.6 Petite classe 6 : modèle XY et théorème de Mermin-Wagner

On considère un modèle XY bidimensionnel sur réseau carré de maille $a$ et de coté $L$. En chaque site $i$, le spin $\vec{S}_i$ est un vecteur bidimensionnel ($d = 2$) de norme unité, repéré par son angle $\theta_i$ avec l'axe horizontal. Le hamiltonien XY s'écrit

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \qquad . \tag{2.114}$$

**Absence de transition de phase.**

Le but de cette première question est de présenter un argument simple montrant l'absence d'aimantation spontanée pour le modèle XY (et plus généralement pour un modèle bidimensionnel avec une dimension du paramètre d'ordre $d \geq 2$). C'est le théorème de Mermin et Wagner (*Phys. Rev. Lett.* 17 (1966) 1133).

On suppose qu'à température très faible il y a un angle privilégié $\theta^*$. On pose $\theta_i = \theta^* + \varphi_i$ où $\varphi_i$ dénote une petite fluctuation. Quelle est l'énergie d'une configuration des $\varphi_i$ ? Calculer la fonction de corrélation $\langle \varphi(r)^2 \rangle$. On passera à une formulation continue tout en tenant compte des cut-off imposés par la structure du réseau. Conclure.

**Fonction de corrélation à basse température.**

Quels sont les états fondamentaux du système ? En développant l'action autour de ces états fondamentaux, montrer que la contribution dominante à la fonction de corrélation spin-spin est

$$\langle \vec{S}_0 . \vec{S}_r \rangle = \left( \frac{a}{r} \right)^{1/2\pi\beta J} \tag{2.115}$$

à la limite des faibles températures. Vérifier que l'aimantation spontanée est nulle.

**Fonction de corrélation à haute température.**

On se place maintenant à haute température. Montrer que, dans la limite $\beta \ll 1$, la fonction de corrélation décroît exponentiellement avec une longueur caractéristique

$$\xi = -\frac{a}{\ln(\beta J/2)} \quad . \tag{2.116}$$

Ce résultat est-il compatible avec celui de la question précédente ?

**Vortex et transition de Kosterlitz-Thouless.**

Pour comprendre la différence qualitative entre les résultats ci-dessus, il faut faire intervenir la notion de vortex. Considérons un site $O$ particulier du réseau. Un vortex correspond à une configuration des spins telle qu'en tout site $i$, $\theta_i = \frac{\pi}{2} + \phi$, où $\phi$ est l'angle entre une direction arbitraire fixe et la droite (O,i). Représenter graphiquement un vortex. Que vaut le gradient de $\theta$ en coordonnées polaires ? En déduire que l'énergie d'un vortex vaut

$$E = \pi J \, \ln\left( \frac{L}{a} \right) \quad . \tag{2.117}$$

Quelle est l'entropie associée à ce vortex ? Montrer que la température critique du système de vortex pur est

$$T_c = \frac{\pi J}{2} \quad . \tag{2.118}$$

NB : on rappelle l'expression du gradient en coordonnées polaires $(r, \phi)$ :
$\vec{\nabla} f(r,\phi) = (f_r(r,\phi), f_\phi(r,\phi)/r)$.

### 2.2.7 Exercices

1. Calculer la chaleur spécifique en fonction de la température dans l'approximation du champ moyen. Le résultat obtenu est il réaliste dans la phase haute-température ? Que se passe-t-il à $T = T_c$.

2. On considère un modèle d'Ising de N spins interagissant tous deux à deux, de sorte que le hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{J}{N}\sum_{i<j} S_i S_j \tag{2.119}$$

a) Justifier le choix du facteur de normalisation $1/N$ devant $H$.

b) Dénombrer les états d'aimantation $M$ fixée

c) Evaluer la fonction de partition pour $N$ grand, et en déduire l'expression de l'énergie libre. Montrer que l'approximation du champ moyen est exacte pour ce modèle.

d) Retrouver ces résultats par une intégration gaussienne et une méthode du col.

## 2.3 Polymères, marches auto-évitantes et modèle 0(n)

### 2.3.1 Chaînes polymériques auto-évitantes

Nous avons bbrièvement décrit au chapitre 2 comment les polymères peuvent simplement être modélisés comme des marches aléatoires lorsque l'on ne prend en compte que les interactions entre monomères voisins sur la chaîne. Revenons maintenant sur l'effet des interactions entre monomères éloignés le long de la chaîne. Si deux tels monomères se retrouvent au voisinage l'un de l'autre dans l'espace, ils interagissent. Un type d'interaction simple est le cas d'une répulsion qui interdit à deux monomères d'être au même point (ou à une distance inférieure à $a$ l'un de l'autre). On est alors en présence d'une marche aléatoire auto-évitante (en anglais : "self avoiding walk").

Bien que ce ne soit peut-être pas évident a priori, ce type d'interaction induit un changement de comportement bien plus drastique que toutes les interactions précédentes qui ne mettaient en jeu que des interactions entre monomères proches sur la chaîne. L'étude quantitative de ce nouveau comportement fera l'objet du chapitre 6. On peut comprendre qualitativement ce changement fondamental dans le langage des marches aléatoires : en présence d'auto-évitement, la marche aléatoire n'est plus un processus Markovien : la probabilité de saut ne dépend plus seulement des quelques sauts faits juste auparavant, mais elle dépend de toute l'histoire de la marche. Si le problème de la marche aléatoire est mathématiquement très simple, celui de la marche auto-évitante est beaucoup plus compliqué. On peut en étudier diverses versions, discrètes ou continues. Par exemple, pour procéder dans le même ordre qu'au premier chapitre, on pourra étudier sur un réseau cubique à d dimensions l'ensemble de tous les chemins auto évitants (voir fig.2.10 Un tel système discret se prête bien à des simulations numériques, qui sont en gros de deux types : soit des énumérations exactes pour N assez petit (inférieur à quelques

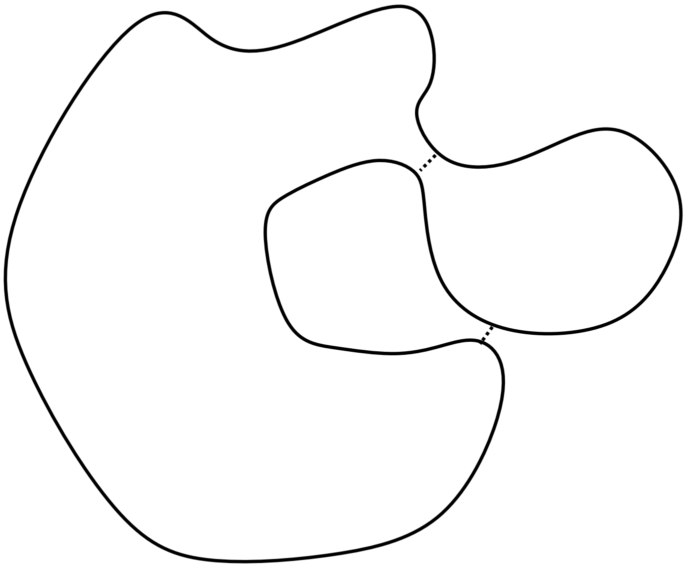


FIG. 2.9 – Une chaîne fermée de polymère dans laquelle des monomères éloignés le long de la chaîne se retrouvent à proximité l'un de l'autre, et donc en interaction. L'interaction est une répulsion à courte portée dans le cas de la chaîne auto-évitante.

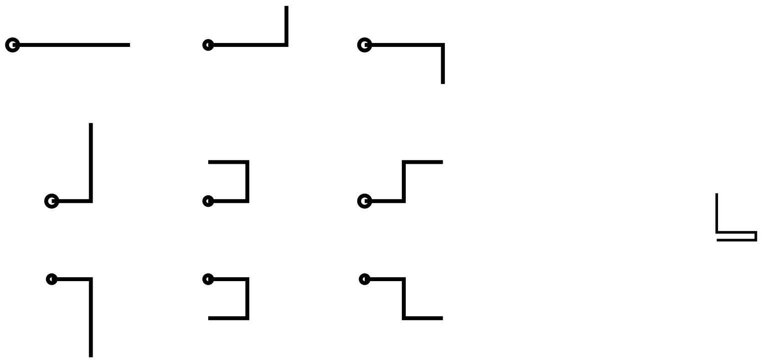


FIG. 2.10 – Marches auto-évitantes sur une réseau carré à deux dimensions : l'ensemble de toutes les marches de trois pas issues de l'origine (marquée par un cercle) s'obtient en faisant les rotations d'un multiple de $\pi/2$ de toutes les 9 marches montrées à gauche. Il y en a donc 36. L'ensemble de toutes les marches de trois pas, sans contraintes d'auto-évitement, est plus vaste : il contient par exemple le diagramme représenté à droite, et le nombre total de telles marches sans contraintes est $4^3 = 64$. Pour les marches de $N$ pas avec auto-évitement, le comportement asymptotique du nombre de marches est en $C\overline{z}^N N^{\gamma-1}$, où $\overline{z}$ est une constante non universelle (qui dépend par exemple du réseau), alors que l'exposant $\gamma$ caractérisant la correction en loi de puissance est universel.

dizaines), dont on tente d'extrapoler les résultats à N grand, soit pour N plus grand, des méthodes d'échantillonages dites de Monte Carlo. Dans ce genre de méthode on engendre un échantillon non biaisé de p marches auto-évitantes, où p est grand mais beaucoup plus petit que le nombre total de marches, et on calcule des valeurs moyennes à partir de cet échantillon. Nous n'irons pas plus loin ici dans la description de ces travaux numériques, pour nous concentrer plutôt sur quelques résultats.

Le nombre total de marches auto-évitantes $\mathcal{N}(N)$ sur un réseau cubique en dimension $d$ se comporte asymptotiquement pour $N$ grand comme :

$$\mathcal{N}(N) \simeq_{N\to\infty} \; C\,\overline{z}^N N^{\gamma-1} \tag{2.120}$$

Ceci est à comparer aux marches aléatoires sans contrainte pour lesquelles $\mathcal{N}(N) = z^N$, $z$ étant le nombre de voisins de chaque sîte. Par exemple pour un réseau cubique à d = 3, on a $z = 6$, alors que les simulations de marches auto-évitantes donnent $\overline{z} \simeq 4,68$ et $\gamma \simeq 1,16$ (bien entendu il y a moins de marches lorsqu'elles sont auto-évitantes !). La distance moyenne $R(N)$ entre les extrémités de la marche se comporte comme

$$R(N) \simeq_{N\to\infty} C\,N^{\nu} \tag{2.121}$$

(plus précisément, on peut définir cette quantité comme $\sqrt{<(\vec{x}_N - \vec{x}_1)^2>} \equiv R(N)$). L'exposant $\nu$ est différent de l'exposant des marches aléatoires ($\nu = \frac{1}{2}$)lorsque la dimension $d$ est inférieure à quatre. C'est évident en dimension 1, où $\nu_1 = 1$ ; en dimension 2 on a $\nu_2 = \frac{3}{4}$, en dimension 3 $\nu_3 = .588 \simeq \frac{3}{5}$, et en dimension supérieure ou égale à quatre on retrouve l'exposant $\nu = \frac{1}{2}$ des marches aléatoires. Ces résultats ont de plus un aspect universel, qui leur confère un intérêt général. Par exemple l'exposant $\nu$ qui caractérise la taille du polymère est universel : il ne dépend que de la dimension d, et du fait qu'il y a une répulsion entre les monomères. Mais on trouvera le même exposant $\nu_3 \simeq \frac{3}{5}$ pour une marche aléatoire auto-évitante sur un réseau cubique, ou sur un réseau hexagonal, ou sans réseau sous jacent, ou bien encore pour un polymère qui n'est pas strictement autoévitant mais possède une énergie d'interaction répulsive entre tous les monomères (quelle que soit la forme de cette interaction). En bref, tous ces systèmes forment ce qu'on appelle une classe d'universalité, au même titre que toutes les marches aléatoires Markoviennes appartiennent à la même classe d'universalité, caractérisée par $\nu = \frac{1}{2}$ et par une loi de probabilité à grande échelle gaussienne. L'exposant $\gamma$ qui permet de compter les marches auto-évitantes (2.120) est aussi un exposant universel, alors que le "nombre effectif de voisins" $\overline{z}$ dans (2.120), lui, dépend du réseau considéré.

L'existence de tels comportements universels traduit le fait que le comportement à longue distance "oublie" les détails microcospiques du modèle. Elle est souvent un ingrédient fondamental qui permet des modélisations d'un problème physique complexe par un modèle beaucoup plus simple mais appartenant à la même classe d'universalité, et elle permet de relier parfois des systèmes physiques très différents. Nous en verrons un exemple plus loin dans ce cours avec le comportement d'un système ferromagnétique au point de Curie, qui appartient à la même classe d'universalité que le système liquide-gaz au point critique !

La compréhension profonde et l'analyse quantitative de ces comportements universels nécessite la mise en place d'un formalisme élaboré, la théorie des champs et le groupe de renormalisation, formalisme qui sous tend une grande partie des développements modernes de la physique statistique et de la physique des particules. Dans ce cours nous nous contenterons d'illustrer la physique de ces comportements universels sur des exemples assez simples. Une esquisse du formalisme, qui passe par la théorie des pertubations et la renormalisation, sera fournie dans la deuxième partie du cours à propos des systèmes magnétiques.

Revenons donc aux marches ou polymères auto-évitants, pour en décrire un peu plus précisément le comportement universel. Un polymère constitué de N monomères a une taille typique :

$$R(N) = \sqrt{< (\vec{x}_N - \vec{x}_1) >^2} = c\ N^\nu \tag{2.122}$$

De même que pour le polymère idéal, le comportement universel sera obtenu à grande échelle. Soit $\vec{r} = (\vec{x}_N - \vec{x}_1)$, et $P(\vec{r})$ la distribution de probabilité de $\vec{r}$. Si on mesure $\vec{r}$ en unités de l'échelle naturelle $R(N)$, on obtient le comportement universel :

$$P(r) \sim \frac{1}{R(N)^d} \mathcal{F}\left(\frac{\mid \vec{r} \mid}{R(N)}\right) \tag{2.123}$$

où le préfacteur $\frac{1}{R(N)^d}$ assure la normalisation

$$\int P(r) d^d\vec{r} = \int \mathcal{F}(x) d^d x \ = \ 1 \tag{2.124}$$

Cette formule est l'exacte analogue de la distribution limite gaussienne pour la marche aléatoire, et serait décrite d'une facon plus mathématique par une formule analogue à (1.29). La fonction limite $\mathcal{F}$ est universelle, sa forme est donnée en fig.(2.11).

Cette forme n'a pu être vérifiée encore expérimentalement ; en revanche l'exposant $\nu$ peut être mesuré sur des polymères en solution diluée. Des mesures peuvent être faites par exemple par diffraction de lumières (rayons X) ou de neutrons. L'amplitude diffusée par des atomes aux points $\vec{r}_j$ est proportionnelle à

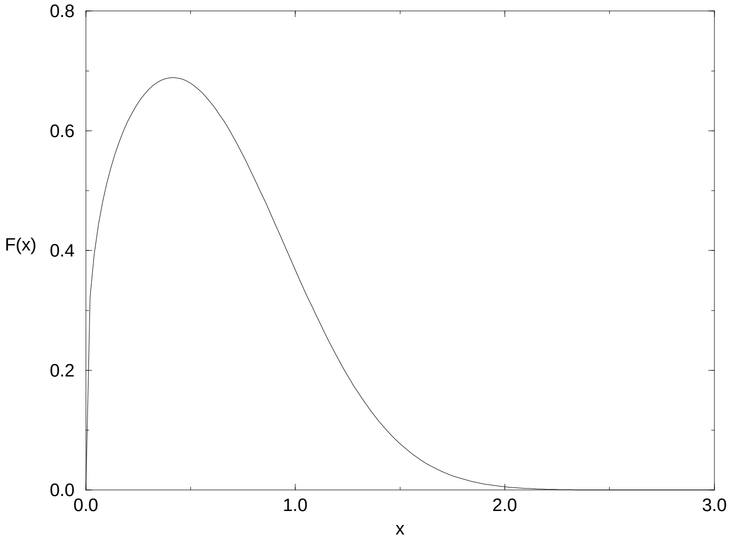



FIG. 2.11 – Allure qualitative de la distribution de probabilité universelle, $\mathcal{F}$, pour la distance entre les deux bouts d'une chaîne auto-évitante, telle qu'elle est définie en (2.123). A l'origine le comportement est $\mathcal{F} \sim x^{(\gamma-1)/\nu}$, et à l'infini c'est $\mathcal{F} \sim \exp\left(-x^{1/(1-\nu)}\right)$. Voir aussi le chapitre 6, et le livre de de Gennes pour une discussion plus développée.

$$A = \sum_j \epsilon^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f)\vec{r}_j} \tag{2.125}$$

où $\vec{k}_i$ est le vecteur d'onde de l'onde incidente et $\vec{k}_f$ celui de l'onde diffractée. Posant $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$, l'intensité diffractée est proportionnelle à

$$I(q) = \sum_{j,k} \epsilon^{+i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_k)} \tag{2.126}$$

L'intensité moyenne diffractée est donc $< I(q) >= \sum_{j,k} < \epsilon^{i\vec{q}.(\vec{r}_j - \vec{r}_k)} >$. Si j et k sont séparés par s monomères, nous savons que pour j et k éloignés ($\mid j - k \mid = s \gg 1$)

$$P(\vec{r}_j - \vec{r}_k) = \frac{1}{s^{\nu d}} \mathcal{G}\left(\frac{\mid \vec{r}_j - \vec{r}_k \mid}{s^{\nu}}\right) \tag{2.127}$$

(Notons que le comportement universel est ici étendu à des points qui ne sont pas les extrémités de la chaîne. On retrouve pour ces points le même exposant $\nu$, mais une fonction d'échelle $\mathcal{G}$ éventuellement différente). L'intensité moyenne diffractée pour $\frac{1}{R} \ll q \ll \frac{1}{a}$ se comporte en

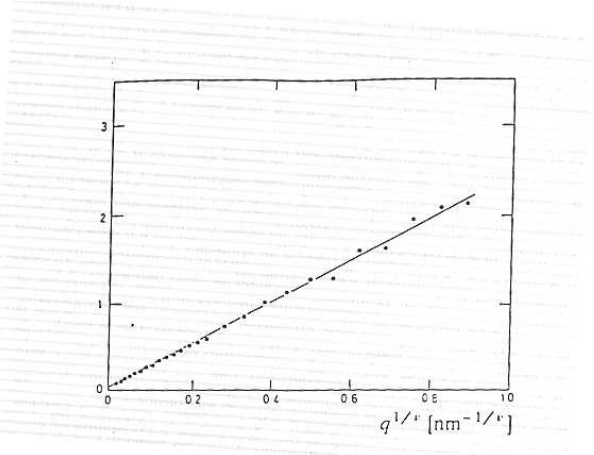



FIG. 2.12 – Expérience de diffraction de neutrons sur une solution de polymères : L'intensité $I(q)$ diffractée à moment transféré $q$ est proportionnelle au module de la transformée de Fourier de la distribution de positions à moment $q$. On s'attend donc à une dépendance $I(q) \propto |q|^{-1/\nu}$. On a tracé ici $1/I(q)$ en fonction de $|q|^{1.67}$, et la linéarité du résultat montre que l'exposant $\nu$ est proche de $\nu \simeq .6$ (étude détaillée dans le livre de des Cloizeaux - Janninck).

$$< I(q) > \sim \sum_s \int d^d\vec{r} \frac{1}{s^{\nu d}} \mathcal{G}\left(\frac{|\ \vec{r}\ |}{s^\nu}\right) e^{i\vec{q}.\vec{r}} \tag{2.128}$$

qui est en $|\ \vec{q}\ |^{-1/\nu}$. Donc on peut mesurer $\nu$ en traçant I(q) en fonction de q dans le régime où $\frac{1}{R} \ll q \ll \frac{1}{a}$. Comme on le voit sur la fig.2.12 les mesures sont en accord avec un exposant $\nu_3 \simeq .6$. (Cet exposant n'est pas connu exactement. La meilleure valeur actuelle obtenue par le groupe de renormalisation est $\nu = 0.588 \pm .001$).

Il est intéressant d'étudier la dépendance de $\nu$ dans la dimensionnalité d du système. Comme nous l'avons déjà mentionné, $\nu$ est une fonction décroissante de d, qui est bien approchée par la formule (cf. problème 3 en fin de volume) :

$$\nu_d \simeq \frac{3}{2+d}, \quad d < 4 \tag{2.129}$$

Cette formule, proposée il y a déjà longtemps par Flory, est exacte en d =1, 2, 4, et très proche de la bonne valeur en d = 3. Pour des dimensions supérieures à 4, l'exposant $\nu$ est égal à celui des marches aléatoires ($\nu = \frac{1}{2}$) : les polymères auto-évitants sont alors dans la même classe d'universalité que les marches aléatoires ou les polymères idéaux. On peut comprendre ce rôle crucial de la dimension 4 à partir d'un argument simple qui indique que, en dimension supérieure à 4, la contrainte d'auto-évitement est sans importance à longue distance. Cet argument se fonde sur la dimension fractale $D_F$ d'une marche aléatoire. Comme nous l'avons vu en petite classe, cette dimension, qui caractérise le nombre de points du polymère $\mathcal{N}(\ell)$ dans une boîte de côté $\ell$ (Rappelons que $\mathcal{N}(\ell) \simeq C\,\ell^{D_F}$), vaut $D_F = 2$ pour les marches aléatoires. Du point de vue du remplissage de l'espace, une marche aléatoire dans un espace à $d(\geq 2)$ dimensions est un objet bidimensionnel. Si on considère deux marches aléatoires plongées dans un espace de dimension $d \geq 4 = 2+2$, la probabilité qu'elles se croisent est nulle, et ce quelle que soit la longueur des marches. Ce raisonnement s'applique aussi à deux portions éloignées de la même marche, et indique qu'on peut négliger les répulsions entre atomes éloignés le long de la chaîne, en $d \geq 4$. Ce même argument fournit une borne sur $\nu$. En effet, en général, pour une chaîne décrite par un exposant $\nu$, la dimension fractale est $D_F = 1/\nu$, et les effets de répulsion sont négligeables pour $d > 2D_F = 2/\nu$. Donc, si $\nu \neq \frac{1}{2}$, il faut $\frac{1}{2} \leq \nu_d \leq \frac{2}{d}$, ce qui est bien le cas en dimension $d \leq 4$.

### 2.3.2 Relation avec le modèle $O(n \to 0)$

On a vu ci-dessus qu'une modélisation très simple d'une chaîne polymère en bon solvant est une marche aléatoire Brownienne avec des interactions défavorisant les recoupements. Ici nous considérons le modèle sur réseau des chemins où les auto-intersections sont interdites et montrons sa relation avec le modèle 0(n) dans la limite $n \to 0$ (il s'agit bien sûr d'une limite formelle, qui doit être prise après continuation analytique à $n$ réel). Cette équivalence est due à P.G de Gennes (1972). Dans toute la suite nous posons J=1 de sorte que l'hamiltonien du modèle 0(n) s'écrit :

$$H = -\sum_{<ij>} \vec{S}_i \vec{S}_j \tag{2.130}$$

où les spins $\vec{S}_i$ ont n composantes $S_i^\alpha$, $\alpha = 1...n$ avec la contrainte normalisée selon :

$$\vec{S}_i^2 = \sum_{\alpha=1}^{n} (S_i^\alpha)^2 = n \tag{2.131}$$

• **Fonction génératrice sur un site**.

Considérons un site donné. On va montrer que les moments :

$$\overline{S^\alpha}\,,\ \overline{S^\alpha S^\beta}\,,\ \overline{S^\alpha S^\beta S^\gamma}... \tag{2.132}$$

sont *tous nuls* pour $n \to 0$, excepté :

$$\overline{S^\alpha S^\beta} = \delta_{\alpha\beta} \tag{2.133}$$

Dans ces expressions, $\overline{\cdots}$ désigne [1] : $\frac{\int \delta(\vec{S}^2-n)(...)d\vec{S}}{\int \delta(\vec{S}^2-n)d\vec{S}}$. Pour celà, considérons la fonction génératrice :

$$f(\vec{h}) \equiv \overline{e^{i\vec{h}.\vec{S}}} \tag{2.134}$$

On peut l'exprimer en terme de fonctions de Bessel, mais il est plus simple d'observer qu'elle satisfait l'équation différentielle suivante :

$$\Delta_h f(\vec{h}) = -\overline{\vec{S}^2 e^{i\vec{h}.\vec{S}}} = -nf(\vec{h}) \tag{2.135}$$

$$(\Delta_h + n)f(\vec{h}) = 0 \tag{2.136}$$

La symétrie radiale 0(n) impose $f(\vec{h}) = f(h)$ avec $h \equiv || \vec{h} ||$ et donc :

$$\left(\frac{d^2}{dh^2} + \frac{n-1}{h}\frac{d}{dh} + n\right) f(h) = 0 \tag{2.137}$$

avec $f(h=0) = 1, f'(h=0) = 0$.
Prenons $n = 0$ : $f" - \frac{1}{h}f' = 0$
Donc $f(h) = a + bh^2$
Mais $f(0) = a = 1$ et $b = \frac{-1}{2}$ car $\overline{S^\alpha S^\beta} = \delta^{\alpha\beta}$.
Finalement, on obtient donc pour $n \to 0$ :

$$f(\vec{h}) = 1 - \frac{1}{2}\vec{h}^2 \tag{2.138}$$

ce qui prouve les égalités ci-dessus sur les moments.

N.B : La fonction $f(\vec{h})$ pour $n \to 0$ n'est plus la fonction caractéristique d'une mesure définie positive ; en ce sens la limite est formelle.

• **Développement haute-température**.

Considérons le développement haute température ($\beta \ll 1$) de la fonction de partition :

$$Z = Tr\, e^{\beta \sum_{<ij>} \vec{S}_i.\vec{S}_j} = Tr \prod_{<ij>} \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\beta^k}{k!}(\vec{S}_i.\vec{S}_j)^k\right] \tag{2.139}$$

En développant $\prod_{<ij>}\sum_k$, on engendre des termes de la forme :

$$\overline{S_{i_1}^{\alpha_1} S_{j_1}^{\alpha_1} ... S_{i_N}^{\alpha_N} S_{j_N}^{\alpha_N}} \tag{2.140}$$

qui est nul pour $n \to 0$ sauf si chaque $S_{i_p}^{\alpha_p}$ est répété exactement 0 fois ou 2 fois. Ainsi les configurations $i_1 j_1 ... i_N j_N$ de liens qui donnent une contribution non-nulle à $Z$ correspondent à des ensembles de polygônes sans intersection sur le réseau (cf. fig.2.13). Le fait

[1] Ne pas confondre cette moyenne avec la moyenne thermodynamique prise avec la mesure de Gibbs, que nous désignons partout par $< \cdots >$

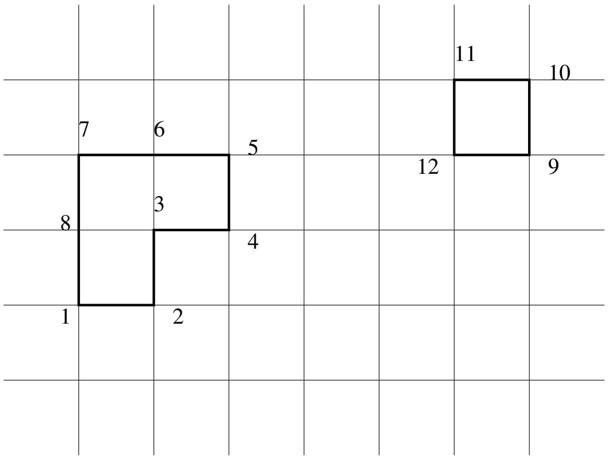



FIG. 2.13 – Un diagramme engendré dans le développement haute température : chaque spin apparait exactement deux fois : un seul indice vectoriel apparaît dans chacune des deux boucles. Le diagramme vaut donc $\overline{S_1^\alpha S_2^\alpha S_2^\alpha S_3^\alpha S_3^\alpha S_4^\alpha ... S_8^\alpha S_1^\alpha}\ \overline{S_9^\beta S_{10}^\beta ... S_{12}^\beta S_9^\beta}$. Après sommation sur $\alpha$ et $\beta$, on trouve une contribution en $n^2$ qui s'annulle à $n \to 0$.

que $\overline{S^\alpha S^\beta} = \delta^{\alpha\beta}$ impose que l'indice $\alpha$ est conservé dans chaque polygône. De sorte que toutes ces configurations donnent une contribution nulle à $Z$ pour $n \to 0$, sauf la configuration vide (correspondant à choisir toujours 1 dans le produit sur les liens ci-dessus). Donc : $Z = 1$ pour $n \to 0$ !

Considérons maintenant la fonction de corrélation pour une composante : $< S_i^1 S_j^1 >$ pour $n \to 0$. Développons de même en puissance de $\beta$. On a maintenant 2 types de contributions (fig.2.14) :

- les polygônes fermés, donnant une contribution nulle pour $n \to 0$

- les chaines sans intersection reliant $i$ à $j$, de longueur quelconque $N$

Ces dernières donnent une contribution $\beta^N$. Donc :

$$\lim_{n\to 0} < S_i^1 S_j^1 >= \sum_N \beta^N \mathcal{N}_N(i-j) \tag{2.141}$$

où $\mathcal{N}_N$ est le nombre de chemins auto-évitants reliant $i$ à $j$ en N pas.

Le modèle $O(n)$ dans la limite $n \to 0$ possède un point critique pour $\beta = \beta_c$. Les différentes séries définies à partir de G(R) ont des singularités à $\beta = \beta_c$ qui est leur rayon de convergence. Ces singularités contrôlent le comportement des marches auto-évitantes dans la limite $N \to \infty$. La relation ci-dessus est à rapprocher de la relation $G(R) \propto \widetilde{P}(\lambda = \frac{\beta}{\beta_c}, R)$ établie pour le modèle Gaussien.

• **Nombre de chemins de N maillons**.

La fonction génératrice du nombre $\mathcal{N}_N$ de chemins de N pas (dont une extrémité est

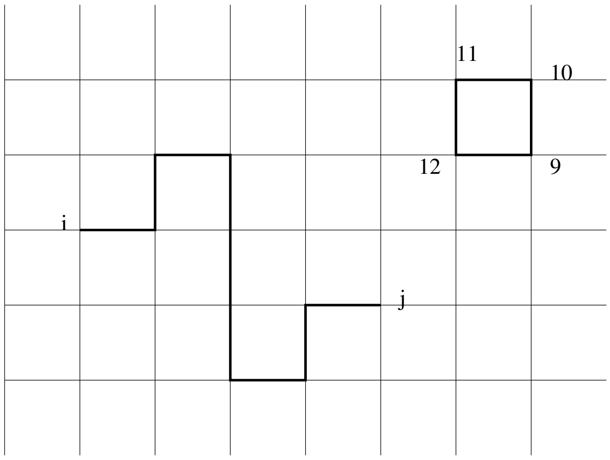



FIG. 2.14 – Un diagramme engendré dans le développement haute température de la fonction de corrélation $< S_i^1 S_j^1 >$ : la boucle fermée donne une contribution d'ordre $n$, alors que le chemin reliant $i$ à $j$ garde une contribution finie lorsque $n \to 0$. Seuls ces chemins reliant $i$ à $j$ contribuent donc à la limite $n \to 0$.

fixée) est obtenue en sommant (2.141) sur i (ou j). On obtient ainsi la susceptibilité du modèle de spins qui, pour $\beta \to \beta_c$, diverge en :

$$\chi \sim (\beta_c - \beta)^{-\gamma} \tag{2.142}$$

D'après la propriété des séries $\sum_N A_N \lambda^N$ utilisées au chapitre 1, on en déduit :

$$\mathcal{N}_N \sim \overline{z}^N \, N^{\gamma-1} \tag{2.143}$$

avec $\overline{z} = \beta_c^{-1}$. On aurait, pour une marche Brownienne, $\mathcal{N}_N \sim z^N$ où $z$ est la connectivité du réseau ($z = 2d$ pour un réseau hypercubique).

Remarques :

- A la différence du modèle gaussien, le rayon de convergence $\beta_c$ et l'exposant $\gamma$ ne sont pas contraints à prendre la valeur 1. En effet, c'est la fonction génératrice du nombre de marches $\mathcal{N}_N$ (et non de la probabilité) qui intervient ici, et il n'y a pas de contrainte de normalisation.

- $\overline{z}$ dépend du réseau : pour un réseau cubique $\overline{z} \simeq 4.68 < z = 6$.

- $\gamma$ est universel (il ne dépend que de la dimension $d$) (cf. tableau ci-dessous).

• **Nombre de polygones**.

Un raisonnement simple (fig.2.15) montre que le nombre de polygones de (N+1) maillons issus de l'origine est $\frac{1}{2} Z \mathcal{N}_N(a)$ (avec $a$ la maille du réseau), et est donc proportionnel à la fonction de corrélation $< S_i S_j >$ entre sites plus proches voisins. Celle-ci

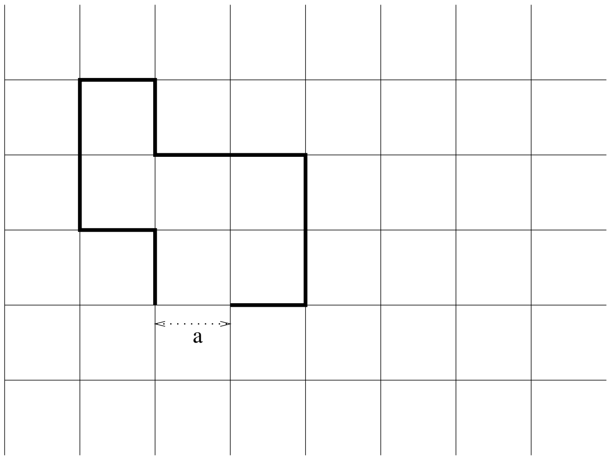



FIG. 2.15 – Le nombre de polygones fermés de $N+1$ maillons est directement relié au nombre de chemins entre deux points distants de $a$, un pas du réseau.

est liée à l'énergie interne par la relation :

$$E = < H > = -\frac{1}{2} N z < S_i S_j > \sim (\beta_c - \beta)^{1-\alpha} \tag{2.144}$$

On a donc, compte tenu de la relation entre exposants $\alpha = 2 - \nu d$ :

$$\mathcal{N}_N(a) \sim \frac{\overline{z}^N}{N^{\nu d}} \tag{2.145}$$

On remarquera l'absence du facteur $N^{\gamma-1}$ présent dans le nombre total $\mathcal{N}_N$.

• **Extension typique. Formes d'échelles de $\mathcal{N}_N(R)$ et $P_N(R)$.**

Pour $\beta \to \beta_c$, la fonction de corrélation des spin prend la forme d'échelle :

$$\frac{1}{R^{d-2+\eta}} g\left(\frac{R}{\xi}\right) \tag{2.146}$$

avec $\xi \sim (\beta_c - \beta)^{-\nu}$. Utilisant la relation entre exposants : $\gamma = \nu(2-\eta)$, et redéfinissant la fonction d'échelle, cette forme peut aussi s'écrire : $(\beta_c - \beta)^{\nu d - \gamma} f[R(\beta_c - \beta)^\nu]$. On peut en déduire la forme d'échelle de $\mathcal{N}_N(R)$ à partir de (2.141). Plus précisément, au voisinage de $\beta = \beta_c$, on posera $\left(\frac{\beta}{\beta_c}\right)^N = e^{-NE}, E \sim \frac{\beta_c - \beta}{\beta_c}$ et, par transformée de Laplace inverse sur $E$ (paramètre conjugué à $N$), on obtient la forme d'échelle de $\mathcal{N}_N(R)$ pour $N$ et $R$ grand :

$$\mathcal{N}_N(R) \sim \overline{z}^N N^{\gamma-1-\nu d} \varphi\left(\frac{R}{N^\nu}\right) \tag{2.147}$$

Ou encore, pour la loi de distribution de la distance entre extrémités de la chaîne, d'après (2.143) :

$$P_N(R) \equiv \frac{\mathcal{N}_N(R)}{\mathcal{N}_N} \to \frac{1}{N^{\nu d}} \varphi\left(\frac{R}{N^\nu}\right) \tag{2.148}$$

Cette expression établit un théorème central limite pour $P_N(R)$ ; on observera que celui-ci n'a pas la forme gaussienne habituelle. La raison est évidemment l'existence de corrélations à longue portée entre déplacements élémentaires, induites par la contrainte d'auto-évitement.

La distance typique entre extrémités est d'ordre $N^\nu$, où $\nu$ est l'exposant de la longueur de corrélation du modèle 0(n) pour $n \to 0$. On a donc établi une relation remarquable entre les propriétés géométriques de la chaine et les propriétés critiques d'un modèle magnétique. On en déduit immédiatement que $\nu$ reste égal à sa valeur Brownienne $\frac{1}{2}$ en dimension $d > 4$, mais en diffère pour $d < 4$ (cf tableau ci-dessous). Nous avions prévu ce résultat par des arguments qualitatifs au chapitre 2. En $d = 4$, la loi Brownienne est modifiée par un facteur logarithmique :

$$< R^2 >\sim N(\ln N)^{\frac{1}{8}}(d=4) \tag{2.149}$$

La fonction d'échelle $\varphi$ n'est pas gaussienne en $d < 4$ :

- Pour $u \gg 1$, la fonction d'échelle $g(u)$ associée à la fonction de corrélation se comporte comme $e^{-u}$, et donc $< S(0)S(R) >$ comme $e^{-R/(\beta_c-\beta)^{-\nu}}$. On en déduit par transformée de Laplace inverse :

$$\varphi(x \gg 1) \sim e^{-x^{1/(1-\nu)}} \tag{2.150}$$

(M.E. Fisher 1966), avec d'éventuels préfacteurs algébriques. La forme de $\varphi$ dans cette région $x \gg 1$ est en fait directement liée à la réponse d'une chaîne à un étirement (i.e un biais moyen de la marche). Supposons en effet qu'on tire sur le polymère avec une force $F$. En première approximation, $P_N(R)$ est modifiée par un facteur de Boltzmann multiplicatif $e^{-F.R/kT}$. L'élongation moyenne est obtenue en minimisant l'argument de l'exponentielle, et l'exposant $1/(1-\nu)$ est justement tel qu'un étirement linéaire dans le nombre de monomères $N$ en résulte : $< R >\sim F^{(1-\nu)/\nu}N$. On notera la dépendance non-linéaire dans la force $F$.

- Pour $x \ll 1$, les comportements de $\mathcal{N}_N(a)$ et de $\mathcal{N}_N$ obtenus plus haut imposent :

$$\varphi(x \ll 1) \sim x^{\theta_0} \quad , \quad \theta_0 = \frac{\gamma - 1}{\nu} \tag{2.151}$$

(des Cloizeaux 1974). Ce comportement à l'origine reflète la difficulté pour un chemin auto-évitant de revenir sur lui-même.

- La fonction $\varphi$ est universelle, mais seuls les comportements asymptotiques ci-dessus sont connus.

• **Valeurs des exposants** $\nu, \gamma, .....$

La table ci-dessous rassemble les valeurs des exposants caractéristiques des polymères (chaines auto-évitantes). Ceux-ci sont connus :

- exactement en d=1 et $d \geq 4$, et, grâce aux développements récents de l'invariance conforme, également en d = 2
- par les développements en $\epsilon = 4 - d$ autour de la dimension critique supérieure
- par simulation numérique.

| | $\nu$ | $\gamma$ | $\theta_0 = \frac{\gamma-1}{\nu}$ | $\theta_1$ | $\theta_2$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $d = 1$ | 1 | 1 | $-$ | $-$ | $-$ |
| $d = 2$ | 3/4 | $43/32 \simeq 1.34$ | $11/24 \simeq 0.46$ | 5/6 | 19/12 |
| $d = 3$ | 0.588 | 1.17 | 0.27 | 0.46 | 0.71 |
| $d = 4 - \epsilon$ | $1/2 + \epsilon/16$ | $1 + \epsilon/8$ | $\epsilon/4$ | | |
| $d > 4$ | 1/2 | 1 | 0 | 0 | 0 |

Les exposants $\theta_1$ et $\theta_2$ correspondent à des informations encore plus "fines" sur la conformation de la chaine : ils mesurent la probabilité que deux points de la chaine (pas nécessairement les extrémités) séparés par n monomères, soient distants de $r \ll n^\nu$ :

- extrémité-extrémité

$$P_n(r) \sim \frac{1}{n^{\nu d}} \left(\frac{r}{n^\nu}\right)^{\theta_0} \ , \ \theta_0 = \frac{\gamma - 1}{\nu} \tag{2.152}$$

- extrémité/point interne

$$P_n(r) \sim \frac{1}{n^{\nu d}} \left(\frac{r}{n^\nu}\right)^{\theta_1} \tag{2.153}$$

- point interne/point interne

$$P_n(r) \sim \frac{1}{n^{\nu d}} \left(\frac{r}{n^\nu}\right)^{\theta_2} \tag{2.154}$$

Ces exposants peuvent aussi être calculés dans le cadre du modèle $0(n)$.

# Chapitre 3

# Le groupe de renormalisation

Ce chapitre constitue une introduction aussi élémentaire que possible aux *idées essentielles* de la méthode du groupe de renormalisation. Il n'est pas possible dans le cadre de ce cours de consacrer de longs développements techniques aux applications de cette méthode. En particulier, le développement des exposants critiques au voisinage de la dimension critique supérieure (i.e en $\epsilon = 4 - d$) ne sera pas abordé. Quelques illustrations pratiques simples utilisant des schema de renormalisation approchés seront présentés en petite classe. Un calcul plus sophistiqué, correspondant au modèle $O(n)$ dans la limite des grands $n$, sera également exposé. Il permet d'illustrer les notions abstraites introduites dans les sections précédentes.

## 3.1 Introduction

Le groupe de renormalisation est un cadre conceptuel général permettant de comprendre le comportement à grande échelle (c'est à dire aux grandes distances) des systèmes physiques possédant un grand nombre de degrés de liberté en interaction. Cette méthode trouve un terrain d'application naturel dans l'étude des phénomènes critiques. La raison en est la suivante : dans un système ayant une longueur de corrélation $\xi$, le nombre effectif de degrés de liberté interagissant fortement entre eux est d'ordre $\xi^d$, puisque deux spins ayant une séparation supérieure à $\xi$ peuvent être considérés comme indépendants. Près d'un point critique, $\xi$ diverge et on doit réllement traiter un problème à une infinité de degrés de liberté. L'étude des phénomènes critiques n'est pas cependant le seul champ d'application du groupe de renormalisation.

L'idée essentielle de la renormalisation est de chercher à réduire récursivement le nombre de degrés de liberté à traiter. Plus précisément, on va chercher à intégrer sur les degrés de liberté *de courte distance*, et à exprimer le résultat comme un hamiltonien effectif pour les degrés de liberté restant. Ainsi, partant d'un réseau de maille $a$, on cherche à intégrer sur les fluctuations de longueur d'onde $a < \lambda < sa$, où $s > 1$ est un facteur de dilatation. Cette procédure permet en principe de construire un hamiltonien effectif pour les fluctuations de longueur d'onde $\lambda > sa$, défini sur un réseau de maille élémentaire $sa$. Le nombre de degrés de liberté aura ainsi été réduit de $N/a^d$ à $N/(sa)^d$. Cette transformation entre hamiltoniens peut de manière équivalente être formulée comme une transformation des constantes de couplages qui le caractérisent. L'étude du flot de renormalisation ainsi défini dans l'espace des constantes de couplage, et plus précisément de son comportement à $s$ grand (points fixes et leur voisinage) permet d'accéder aux propriétés critiques du modèle.

L'idée physique sous-jacente, qui trouve une justification précise dans le cadre de cette méthode, est que la physique à grande échelle ne dépend pas de tous les détails du système à courte distance. Deux hamiltoniens microscopiques ne présentant que des différences à petite échelle auront le même comportement critique. Celà se traduira par le fait que ces deux hamiltoniens appartiendront au bassin d'attraction d'un même point fixe du flot de renormalisation. Les propriétés d'universalité du comportement critique se trouvent ainsi expliquées.

Cette idée physique est, on le voit, très générale et ne se limite pas aux phénomènes critiques. L'universalité est en fait une propriété d'origine statistique, liée au fait qu'on effectue la somme d'un très grand nombre de variables aléatoires. Lorsque ces variables ont des corrélations de portée finie, leur somme obéit à un théorème central limite gaussien. C'est le cas lorsque la longueur de corrélation $\xi$ est finie dans un système de spin. Si en revanche $\xi$ diverge, les corrélations entre spin sont à longue portée, et le théorème central limite prend une forme non-standard. En ce sens, le groupe de renormalisation peut être considéré comme un outil statistique pour l'étude des sommes de variables aléatoires présentant des corrélations à longue portée.

### 3.1.1 Un premier exemple (simpliste)

Nous allons donner une première illustration de certaines des idées du groupe de renormalisation sur un exemple particulièrement simple qui souligne cette interprétation statistique. Considérons la somme de $N$ variables aléatoires $\epsilon_i$ (supposées par simplicité distribuées selon une loi paire) :

$$S_N = \sum_{i=1}^{N} \epsilon_i \tag{3.1}$$

et supposons dans un premier temps ces variables indépendantes. Bien entendu, nous savons caractériser directement la loi de distribution de cette somme (chapitre 1). Mais nous allons procéder ici en réduisant progressivement le nombre de variables. Pour celà, regroupons ces variables en $N/s$ groupes de $s$ variables chacun, et définissons pour chacun de ces groupes $\alpha = 1, ..., N/s$ la somme partielle de $s$ variables :

$$\epsilon'_\alpha = \frac{\lambda(s)}{s} \sum_{i \in \alpha} \epsilon_i \tag{3.2}$$

où $\lambda(s)$ est un facteur de normalisation dont le rôle apparaitra plus bas. La loi de distribution de ces nouvelles variables peut être caractérisée par ses moments $m_2(s), m_4(s), ...$ qui s'expriment facilement en terme des moments de la distribution des $\epsilon_i$ (à l'étape précédente) :

$$m_2(s) \equiv < (\epsilon')^2 >= \frac{\lambda^2}{s^2} \sum_{i,j \in \alpha} < \epsilon_i \epsilon_j >= \frac{\lambda^2}{s^2} s < \epsilon^2 >= \frac{\lambda^2}{s} m_2 \tag{3.3}$$

$$m_4(s) \equiv < (\epsilon')^4 > -3 < (\epsilon')^2 >^2 = \frac{\lambda^4}{s^3} m_4 \tag{3.4}$$

$$m_{2n}(s) = \frac{\lambda^{2n}}{s^{2n-1}} m_{2n} ... \tag{3.5}$$

Le problème de départ s'exprime en terme des $\epsilon'_\alpha$ de manière identique à son expression en termes des $\epsilon_i$ : il s'agit de caractériser la distribution de leur somme. Les moments caractérisant la distribution de ces variables ont cependant été modifiés. On cherche maintenant à poursuivre cette élimination de manière récursive, ce qui revient à suivre le flot des moments défini par les équations ci-dessus pour $s \to \infty$. On voit qu'il existe un choix unique pour $\lambda(s)$ qui conduise à un point fixe non-trivial de ce flot (si on excepte les situations où un des moments divergerait). Il s'agit du choix :

$$\lambda(s) = \sqrt{s} \tag{3.6}$$

Alors $m_2$ reste inchangé par le flot, et tous les moments d'ordre supérieur tendent vers 0 au point fixe. Ainsi la distribution obtenue a tous ses moments connexes (cumulants) nuls, sauf le second : il s'agit donc d'une gaussienne de variance $m_2$. Ce choix correspond évidemment au comportement typique en $\sqrt{N}$ de la somme $S_N$. On a donc retrouvé le théorème central limite habituel comme étant associé à un point fixe du "flot de renormalisation" établi pour les moments de la distribution.

Généralisons cette approche au cas où les variables $\epsilon_i$ de départ sont corrélées entre elles, leur fonction de corrélation $< \epsilon_i \epsilon_j >= G(i-j)$ ne dépendant que de la distance

$i-j$, et ayant une portée finie caractérisée par une longueur de corrélation $\xi$. Calculons la nouvelle fonction de corrélation entre les variables $\epsilon_\alpha$ :

$$< \epsilon'_\alpha \epsilon'_\beta >= \frac{\lambda(s)^2}{s^2} \sum_{i\in\alpha} \sum_{j\in\beta} < \epsilon_i \epsilon_j > \simeq \lambda(s)^2 G(i_\alpha - j_\beta) \tag{3.7}$$

On a supposé pour établir cette équation que $s$ restait petit devant la longueur de corrélation $\xi$, de sorte que la fonction de corrélation $G(i-j)$ varie peu lorsque $i$ parcourt l'intérieur du bloc $\alpha$. $i_\alpha$ et $j_\beta$ sont deux points représentatifs dans les blocs $\alpha$ et $\beta$, respectivement. Si $R \equiv i_\alpha - j_\beta$, la distance entre ces blocs dans le nouveau système est d'ordre $R/s$, de sorte qu'on a établi l'équation :

$$G\left(\frac{R}{s}, \{m'_{2n}(s)\}\right) \simeq \lambda(s)^2 G\left(R, \{m_{2n}\}\right) \tag{3.8}$$

Cette équation traduit la manière dont la fonction de corrélation se transforme lorsqu'on élimine les degrés de liberté. Il résulte de cette équation que la nouvelle longueur de corrélation associée aux variables $\epsilon'_\alpha$ est :

$$\xi' = \frac{\xi}{s} \tag{3.9}$$

On en déduit que, lorsqu'on itère le flot pour $s \to \infty$, la longueur de corrélation $\xi$ *tend vers* 0. Ainsi, le point fixe est associé à des variables entièrement décorrélées. C'est bien ce à quoi l'on s'attend lorsque la procédure d'élimination a été conduite jusqu'à des échelles $s$ supérieures à la longueur de corrélation initiale $\xi$. On vérifiera plus précisément que, puisque $\lambda(s) = \sqrt{s}$, l'équation ci-dessus admet la solution suivante au point fixe :

$$G(R) = m_2 \delta(R) \tag{3.10}$$

car $\delta(R/s) = s\delta(R)$. Il s'agit bien de la fonction de corrélation de variables indépendantes.

### 3.1.2 Petite classe 7 : décimation du modèle d'Ising 1D

On considère le modèle d'Ising à une dimension

$$H[\{S_i\}] = -J \sum_{i=1}^{N} S_i \, S_{i+1}$$

1. Calculer la fonction de partition de ce modèle et la longueur de corrélation. En déduire le diagramme de phase. Comment feriez-vous pour refaire ces calculs en présence d'un champ magnétique ?

2. On suppose que le nombre de spins, $N$, est pair. Calculer la fonction de partition lorsque tous les spins d'indices impairs sont fixés ; on la notera $Z[\{S_{2n+1}\}]$. En déduire que, après cette opération de décimation des spins d'indices pairs, on retrouve un modèle d'Ising undimensionnel pour les spins restants. Exprimer la nouvelle constante de couplages $J'$ en fonction de $J$.

3. Que se passe-t-il lorsque l'on itère l'opération de décimation ci-dessus ?

## 3.2 La stratégie du groupe de renormalisation

Nous allons maintenant décrire la méthode générale du groupe de renormalisation pour un modèle de spins, en procédant dans l'espace réel, de manière tout à fait analogue à l'exemple précédent. Dans toute la suite nous considérons (pour fixer les idées) un modèle d'Ising sur un réseau régulier de maille $a$ (carré, par exemple) et nous notons :

$$-\mathcal{H} \equiv -\beta\, H = K \sum_{<ij>} S_i S_j \tag{3.11}$$

• **Variables collectives**.

Imaginons que l'on cherche, comme ci-dessus, à grouper les spins par "blocs" contenant $s^d$ spins, de manière à former un nouveau réseau de maille $sa$. Pour chacun de ces blocs $\alpha$, on définit une nouvelle variable collective $S_\alpha$ dont la valeur est une fonction de la configuration des spins constituant le bloc :

$$S'_\alpha = T\left(\{S_i\}, i \in \alpha\right) \tag{3.12}$$

Il existe de nombreuses manières de choisir ces blocs de spin et de définir la variable collective spécifiée par $T$. On peut distinguer deux classes de méthodes :

- i) on souhaite conserver à chaque étape des variables d'Ising prenant les seules valeurs $\pm 1$. On sera alors amené à choisir une règle attribuant par exemple la valeur $S_\alpha = +1$ si les spins du bloc valent majoritairement $+1$, $S_\alpha = -1$ dans le cas contraire (avec éventuellement une spécification particulière pour traiter les cas où le spin de bloc est nul). La fonction $T$ est alors une fonction non-linéaire des spins. Nous traiterons un exemple de ce type en petite classe pour le modèle d'Ising sur le réseau triangulaire.

- ii) ou bien on suit plus étroitement l'exemple développé ci-dessus, et on définit :

$$S'_\alpha = \frac{\lambda(s)}{s^d} \sum_{i \in \alpha} S_i \tag{3.13}$$

où $\lambda(s)$ est de nouveau un changement d'échelle sur l'aimantation du bloc. La transformation $T$ est linéaire dans ce cas, mais les variables de bloc ne restent pas des variables d'Ising. Après quelques itérations de la procédure, ces variables prennent des valeurs pratiquement continues $\phi(\vec{x})$ dont l'interprétation physique est l'aimantation locale.

De manière générale, la transformation $T$ est largement arbitraire. On imposera seulement qu'elle soit "suffisamment régulière", qu'elle respecte les symétries du problème (par exemple $T(-S_i) = T(S_i)$ dans le cas d'Ising), et que, la configuration $\{S_i\}, i \in \alpha$ étant fixée, $S'_\alpha$ soit déterminée de manière unique, de sorte que :

$$\sum_{S'} \delta(S' - T(\{S\}) = 1 \tag{3.14}$$

• **Hamiltonien effectif et flot des constantes de couplage**.

Les nouvelles variables collectives étant choisies, on considère la distribution de probabilité $P'(\{S'_\alpha\})$. Celle ci est obtenue comme la "loi marginale" résultant de la mesure de Boltzmann sur les variables $\{S_i\}$. La distribution $P'$ définit l'hamiltonien effectif $\mathcal{H}'$ régissant les interactions entre les nouvelles variables $S'_\alpha$. On définit ainsi :

$$e^{-\mathcal{H}'[\{S'_\alpha\}]} = \sum_{\{S_i\}} \prod_\alpha \delta[S'_\alpha - T(\{S_i, i \in \alpha\})] \, e^{-\mathcal{H}[\{S_i\}]} \tag{3.15}$$

On notera que la fonction de partition associée aux deux hamiltoniens $\mathcal{H}$ et $\mathcal{H}'$ est identique, en vertu de l'identité (3.14) :

$$Z \equiv \sum_{\{S_i\}} e^{-\mathcal{H}} = \sum_{\{S_\alpha\}} e^{-\mathcal{H}'} \equiv Z' \tag{3.16}$$

On a ainsi définit une transformation $P \to P'$ dans l'espace des lois de probabilité, ou encore $\mathcal{H} \to \mathcal{H}'$ dans l'espace des hamiltoniens. Ce flot reste assez abstrait, et il est commode de lui associer un *flot dans l'espace des constantes de couplage*, c'est à dire de l'ensemble des paramètres (que nous désignerons collectivement par $\mu$) permettant de spécifier la forme de $\mathcal{H}'$, à chaque étape. De manière plus spécifique :

- pour une transformation de bloc non-linéaire de type i), le hamiltonien $\mathcal{H}'$ fait intervenir des constantes de couplages entre spins de blocs qui sont a priori de plus en plus nombreuses au fur et à mesure qu'on itère la transformation. En plus du couplage d'Ising de départ entre plus proches voisins, $K$, on aura des couplages entres second, troisième voisins, ..., des couplages à quatre spin $S_iS_jS_kS_l$, etc... Nous désignons collectivement par $\mu \equiv \{K_1, K_2, K_3, ...\}$ l'ensemble des constantes de couplages nécessaires pour spécifier la forme de $\mathcal{H}$ (ce qui ne veut pas dire *qu'en pratique*, on soit capable de manipuler cet ensemble infini de constantes de couplages !).

- dans le cas de la transformation ii), le hamiltonien peut être décomposé en série de Taylor en termes du champ continu $\phi(\vec{x})$ et de son gradient $\vec{\nabla}\phi$, de sorte que l'espace des paramètres $\mu$ sera constitué des coefficients des termes $(\vec{\nabla}\phi)^2$, $\phi^2$, $\phi^4$, $\phi^2(\vec{\nabla}\phi)^2$, ....

Ainsi, l'élimination des degrés de liberté conduit à définir un flot dans l'espace des constantes de couplages, appelé *flot de renormalisation*, et noté :

$$\mu' \; = \; R_s \, \mu \tag{3.17}$$

**Remarque :** Cette transformation a été obtenue en comparant les deux hamiltoniens $\mathcal{H}$ et $\mathcal{H}'$. Ces deux hamiltoniens se réfèrent à des systèmes ayant deux mailles du réseau différentes, $a$ et $sa$, respectivement. Pour pouvoir comparer les paramètres de ces deux hamiltoniens, il importe de redéfinir les distances relatives au hamiltonien $\mathcal{H}'$ en les dilatant d'un facteur $s$, c'est à dire en posant :

$$\vec{x}' = \frac{\vec{x}}{s} \tag{3.18}$$

Autrement dit, les distances pour chaque hamiltonien sont exprimées en unité de la maille du réseau qui leur est associé (et on pourra considérer que celle-ci reste fixée, égale à l'unité). Cette remarque est importante lorsqu'on établit l'expression de $R_s$ pour la transformation linéaire ii) directement dans le continu : on est amené à définir le champ $\phi'$ dans le nouveau système par $\phi'(\vec{x}') = \lambda(s)\phi(\vec{x})$, avec $\vec{x}' = \vec{x}/s$.

La stratégie du groupe de renormalisation consiste à itérer la procédure d'élimination des degrés de liberté un grand nombre de fois, et à étudier le comportement résultant du flot $R_s$. On est en droit de se demander pourquoi en fait on n'intègre pas directement sur les degrés de liberté correspondant à un nombre donné d'itérations, plutôt que de procéder pas à pas. La réponse est que lorsque l'on sait procéder ainsi, on peut directement résoudre le modèle, sans utiliser le groupe de renormalisation. C'est le cas de l'exemple simpliste de la section précédente. En général cependant, on ne sait pas intégrer directement sur tous les degrés de liberté de longueur d'onde comprise entre $a$ et $sa$ avec $s$ grand. Il se peut cependant que l'on sache contrôler la procédure d'élimination d'un petit nombre d'entre eux, c'est à dire contrôler les approximations faites pour obtenir $R_s$ lorsque $s$ reste proche de $s = 1$. C'est dans de tels cas que le groupe de renormalisation constitue une méthode utile.

La transformation exacte $R_s$ doit cependant être telle que l'élimination successive des degrés de liberté $a < \lambda < s_1 a$, puis $a' < \lambda < s_2 a'$ (avec $a' = s_1 a$) doit être équivalente à l'élimination directe $a < \lambda < s_1 s_2 a$. On doit donc avoir la propriété de multiplication :

$$R_{s_1} R_{s_2} = R_{s_1 s_2} \tag{3.19}$$

On notera cependant que le terme de "groupe" n'est pas justifié : la transformation $R_s$ ne possède pas d'inverse (puisque de l'information est perdue en allant des petites vers les grandes échelles).

• **Transformation de la fonction de corrélation**.

Le même raisonnement que celui qui nous avait conduit à l'équation (3.8) permet d'établir ici la relation entre la fonction de corrélation avant et après élimination des degrés de liberté :

$$G\left(\frac{r}{s}, R_s\mu\right) \simeq \lambda(s)^2\, G\left(r, \mu\right) \tag{3.20}$$

On notera que les deux distances apparaissant dans les deux membres de cette équation désignent en fait la séparation de deux mêmes points du système, mesurées dans les unités $a$ et $sa$ respectivement.

Soit $\xi$ la longueur de corrélation du système initial. La longueur de corrélation du nouveau système est spécifiée par (3.20) :

$$\xi' = \frac{\xi}{s} \tag{3.21}$$

qui exprime simplement l'invariance de la portée physique des corrélations dans une dilatation de la maille du réseau par un facteur $s$. On voit que la longueur de corrélation n'a que deux comportements possibles lors de l'itération du flot de renormalisation $R_s$ :

- soit le système initial n'était pas critique, $\xi$ étant initialement finie, et la longueur de corrélation doit *tendre vers* 0 par itération. On a ainsi des spin entièrement décorrélés à grande échelle, ce qui correspond à la physique d'une phase de température nulle (ordre parfait) ou infinie (désordre complet).

- soit le système initial est critique, et $\xi$ reste infinie par itération, de sorte que le système doit rester au sein de la variété de l'espace des constantes de couplages correspondant à un état critique $\xi = \infty$, appelée *variété critique*. Cette variété contient en particulier le point critique $K = K_c$ (toutes les autres constantes de couplage étant nulles par ailleurs) du modèle d'Ising de départ.

• **Points fixes et surface critique**.

Le comportement du flot $R_s$ pour $s$ grand peut être a priori très complexe, mais le comportement le plus simple (et celui rencontré dans la plupart des problèmes d'intérêt physique) est la convergence vers un point fixe. D'après les remarques ci-dessus, le flot doit tendre vers des points fixes différents selon que les paramètres initiaux se situent dans la phase haute température (désordonnée), basse température (ordonnée) ou sur la surface critique. Dans le cas le plus simple (fig.1), l'espace des paramètres $\mu$ se partage en deux bassins d'attraction : celui du point fixe basse température et celui du point fixe haute température. La séparatrice est la variété critique, qui constitue le bassin d'attraction du point fixe critique. Comme on va le voir, le comportement à longue distance est le même au sein du bassin d'attraction d'un point fixe donné.

Considérons un point fixe donné $\mu^*$. La propriété de semi- groupe impose pour le facteur de changement d'échelle du champ $\lambda(s;\mu)$ la relation :

$$\lambda(s_1,\mu^*)\,\lambda(s_2,\mu^*) = \lambda(s_1 s_2,\mu^*) \tag{3.22}$$

pour tout $s_1, s_2$. Il en résulte que $\lambda(s;\mu^*)$ doit prendre la forme suivante :

$$\lambda(s;\mu^*) = s^{d_\phi} \tag{3.23}$$

où $d_\phi$ est un exposant caractéristique du point fixe considéré, et appelé "dimension anormale" du champ $\phi$.

Utilisons cette relation dans la loi de transformation de la fonction de corrélation au point fixe. On obtient :

$$G(r,\mu^*) = s^{-2d_\phi} G(\frac{r}{s},\mu^*) \tag{3.24}$$

Choisissant un changement d'échelle particulier $s = r/a$, où $a$ est la maille du réseau, on a finalement :

$$G(r,\mu^*) = \left(\frac{a}{r}\right)^{2d_\phi} G(a,\mu^*) \tag{3.25}$$

Au point fixe critique $\mu_c^*$, on obtient donc une décroissance en loi de puissance des corrélations, et la dimension $d_\phi(\mu_c^*)$ doit être reliée à l'exposant critique $\eta$ par :

$$d_\phi(\mu_c^*) = \frac{d-2+\eta}{2} \tag{3.26}$$

On voit que le choix d'un facteur de normalisation bien spécifique $\lambda(s)$ est crucial pour identifier le point fixe critique.

• **Linéarisation au voisinage d'un point fixe.**

On va maintenant se placer en un point $\mu$ de l'espace des paramètres très proche du point fixe critique $\mu^*$ (nous omettrons l'indice $\mu_c^*$ dans la suite). On peut ainsi écrire les constantes de couplage $K_\alpha = K_\alpha^* + \delta K_\alpha$, avec $\delta K_\alpha$ petit, et linéariser la transformation $R_s$ :

$$\delta K'_\alpha = \sum_\beta R^L_{\alpha\beta}(s)\delta K_\beta \;\;,\;\; R^L_{\alpha\beta}(s) \equiv \frac{\partial K'_\alpha}{\partial K_\beta}|_{\mu^*} \tag{3.27}$$

La matrice $R^L$ de la transformation linéarisée peut être diagonalisée : soient $\nu^{(i)}(s)$ ses valeurs propres et $e^{(i)}(s)$ ses vecteurs propres. La propriété de semi-groupe (3.19) impose :

$$\nu^{(i)}(s) = s^{y_i} \tag{3.28}$$

et la perturbation $\delta K_\alpha$ peut être décomposée sur la base des vecteurs propres : $\delta K_\alpha = \sum_i t_i e_\alpha^{(i)}$, de sorte que sa transformée est, à l'approximation linéaire :

$$\delta K'_\alpha = \sum_i t_i s^{y_i} e_\alpha^{(i)} \tag{3.29}$$

Le vecteur propre $e^{(i)}$ est appelé *variable (ou champ) d'échelle.* On voit qu'on est amené à distinguer trois catégories de variables d'échelle :

- si $y_i > 0$, la perturbation correspondante croit quand on itère $R_s$ et la composante associée à cette direction éloigne $\mu$ du point fixe. Une telle variable est appelée *essentielle*, ou par anglicisme "relevante" (c'est la terminologie que nous emploierons).

-si $y_i = 0$, la variable d'échelle reste constante à l'approximation linéaire : la variable est dite "marginale". Un calcul à l'ordre supérieur doit être effectué pour décider si ce comportement persiste.

- si $y_i < 0$, la perturbation correspondante décroit lorsqu'on itère $R_s$ : une telle variable est dite *inessentielle*, ou "irrelevante".

La situation la plus simple est celle où il existe *une seule variable relevante* et pas de variable marginale. Dans ce cas, il suffit de fixer un seul paramètre extérieur (la température) pour placer le système sur la surface critique. C'est la situation générique pour les phénomènes critiques du second ordre. D'autres cas plus complexes sont bien sûr possibles (point tricritique associé à deux variables relevantes). On supposera dans la suite :

$$y_1 > 0 \ , \ \ 0 > y_2 > y_3 > .... \tag{3.30}$$

On supposera de plus que, pour un point $\mu$ proche de la surface critique, la composante $t_1$ associée au champ d'échelle relevant est (sauf accident particulier) linéaire en $T - T_c$ :

$$t_1 \sim \frac{T - T_c}{T_c} \tag{3.31}$$

• **Comportement des corrélations**.

Reprenons l'analyse de la fonction de corrélation débutée ci-dessus. On a :

$$G(r; t_1, t_2, ...) = s^{-(d-2+\eta)} G(r/s; t'_1, t'_2, ...) \tag{3.32}$$

Placons nous sur la surface critique $t_1 = t'_1 = 0$ et choisissons $s = r$. On obtient :

$$G(r; 0, t_2, ...) = r^{-(d-2+\eta)} G(1; 0, r^{y_2} t_2, ...) \tag{3.33}$$

On peut ainsi préciser le domaine de validité du comportement critique en loi de puissance, ou "domaine critique". Celui-ci est déterminé par : $t_2(r/a)^{y_2} \ll 1$, et est donc déterminé par le premier champ irrelevant.

Placons nous maintenant près de la surface critique ($t_1 \neq 0$), et supposons que l'on ait itéré $R_s$ de manière que la fonction de corrélation dans le membre de droite de (3.32) soit évaluée loin de la région critique. Choisissons pour celà : $s^{y_1} t_1 \sim \pm 1$. On obtient ainsi :

$$G(r) = \xi^{-(d-2+\eta)}\, G(r/\xi; \pm 1, \xi^{y_2} t_2, ...) \tag{3.34}$$

où l'on a désigné par $\xi$ la quantité :

$$\xi \sim |t_1|^{-1/y_1} \sim |1 - T/T_c|^{-1/y_1} \tag{3.35}$$

Loin de la variété critique, la fonction de corrélation décroit exponentiellement avec une longueur de corrélation petite. On a donc relié l'exposant critique associé à la longueur de corrélation à la dimension $y_1$ de la variable relevante :

$$\nu = \frac{1}{y_1} \tag{3.36}$$

On a de plus justifié le comportement d'échelle de la fonction de corrélation introduit au chapitre 5.

• **Exposants critiques** $\beta$ **et** $\delta$.

Introduisons un champ extérieur uniforme $H$, c'est à dire un terme dans le hamiltonien :

$$H \sum_i S_i = H \frac{s^d}{\lambda(s)} \sum_\alpha S'_\alpha = H s^{d-d_\phi} \sum_\alpha S'_\alpha \tag{3.37}$$

où le comportement près du point fixe critique a été utilisé. On voit donc que le champ magnétique se transforme par :

$$H' = s^{y_H} H \ \ , \ \ y_H = d - d_\phi = \frac{1}{2}(d + 2 - \eta) \tag{3.38}$$

On voit que $H$ correspond en général à une perturbation relevante qui croit sous $R_s$. Cette perturbation n'existe cependant que lorsque la symétrie est explicitement brisée par un champ extérieur.

La fonction de corrélation satisfait alors :

$$G(r; t, H) = s^{-(d-2+\eta)} G(r/s, s^{y_1} t, s^{y_H} H) \tag{3.39}$$

et l'aimantation :

$$m(t, H) = s^{-(d-2+\eta)/2} m(s^{y_1} t, s^{y_H} H) \tag{3.40}$$

Pour $T = T_c$ et $H \neq 0$, on choisit $s.H^{1/y_H} \sim 1$ de manière à s'éloigner de la surface critique, et on en déduit : $m(0, H) \sim H^{(d-2+\eta)/2y_H}$. L'exposant $\delta$ caractérisant la réponse non-linéaire au champ $H$ est donc :

$$\delta = \frac{2y_H}{d - 2 + \eta} = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} \tag{3.41}$$

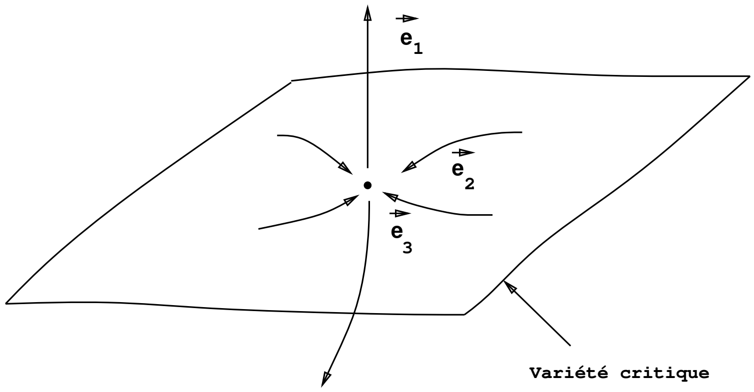



FIG. 3.1 – Allure typique du flot du groupe de renormalisation au voisinage du point critique. $\vec{e}_1$ est la direction relevante, $\vec{e}_2$ et $\vec{e}_3$ sont les directions irrelevantes

qui est la relation que nous avions établie par des arguments physiques au chapitre 5. De même, pour $T < T_c$ et $H = 0$, on peut choisir $s = \xi$ pour obtenir $m(t, 0) \sim \xi^{-d_\phi} m(-1, 0)$ et en déduire :

$$\beta = \nu d_\phi = \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta) \tag{3.42}$$

Un raisonnement similaire utilisant l'invariance de la fonction de partition sous $R_s$ permet d'établir la relation $\alpha = 2 - d\nu$ pour l'exposant critique associé à l'énergie libre.

• **Exemple(s) explicite(s)**

Il est très instructif de reprendre à la lumière du formalisme ci-dessus l'exemple de la transformation de "décimation" pour Ising unidimensionnel, traité en petite classe. Cette procédure constitue un exemple de transformation de renormalisation *exacte*. On cherchera par exemple à retrouver le comportement de la longueur de corrélation pour $T \to 0$ en étudiant le voisinage du point fixe instable.

Un exemple de transformation de renormalisation approchée dans l'espace réel pour Ising bidimensionnel sera traité en petite classe.

### 3.2.1 Petite classe 8 : renormalisation dans l'espace direct ; modèle d'Ising sur réseau triangulaire

On considère le hamiltonien du modèle d'Ising à deux dimensions

$$\beta H(\{S_i\}) = -N\ J_0 - J_1 \sum_{<i,j>}^{N} S_i S_j - J_2 \sum_{i=1}^{N} S_i, \tag{3.43}$$

où les $< i, j >$ représentent les paires de voisins sur le réseau triangulaire, cf. Figure 3.2. La maille du réseau est de longueur $a$.

Dans cet exercice, on considère une transformation du groupe de renormalisation dans l'espace direct consistant à créer des blocs de spins $\sigma_\alpha$ où $\alpha$ est l'indice du bloc. Tous les spins $S_1$, $S_2$, $S_3$ aux trois sommets d'un triangle noir sur la Figure 3.2 forment un bloc de spins selon la règle

$$\sigma_\alpha = \text{signe}(S_1 + S_2 + S_3). \tag{3.44}$$

On se convaincra que chaque spin $S$ fait partie d'un et d'un seul bloc $\alpha$.

1. Quelle est la longueur de la maille du nouveau réseau triangulaire formé par les blocs $\alpha$ ? A chaque configuration $\{\sigma_\alpha\}$, on associe toutes les configurations $C(\{\sigma_\alpha\})$ des spins $\{S_i\}$ vérifiant la définition (3.44). Quel est le cardinal de $C$ ?

2. On définit un hamiltonien $\mathcal{H}$ des blocs de spins $\{\sigma_\alpha\}$ en décimant les spins $\{S_i\}$ appartenant à $C(\{\sigma_\alpha\})$ :

$$\mathcal{H}(\{\sigma_\alpha\}) = -\frac{1}{\beta}\,\log\left[\sum_{\{S_i\}\in C(\{\sigma_\alpha\})} \exp\left(-\beta\, H(\{S_i\})\right)\right]. \tag{3.45}$$

Calculer le hamiltonien $\mathcal{H}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ pour le réseau des $N = 9$ spins $S_i$, $i = 1, \ldots, 9$ de la Figure 3.2 (on pourra utiliser un logiciel de calcul symbolique, par exemple Mathematica). Que constatez-vous ?

3. On définit le hamiltonien

$$\beta H_0(\{S_i\}) = -N\,J_0 - J_1 \sum_{\alpha=1}^{N/3} \sum_{<i,j>\in\alpha} S_i S_j, \tag{3.46}$$

où la seconde somme porte sur les paires de sites voisins appartenant au même bloc $\alpha$. On note également $\langle A\rangle_{\tilde{0}}$ la valeur moyenne de l'observable $A$ avec le hamiltonien $H_0$ pour une configuration $\{\sigma_\alpha\}$ fixée

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle_{\tilde{0}} &= \frac{1}{Z_{\tilde{0}}} \sum_{\{S_i\}\in C(\{\sigma_\alpha\})} A(\{S_i\})\ \exp\left(-\beta H_0(\{S_i\})\right) \\
Z_{\tilde{0}} &= \sum_{\{S_i\}\in C(\{\sigma_\alpha\})} \exp\left(-\beta H_0(\{S_i\})\right).
\end{aligned} \tag{3.47}$$

Montrer que

$$\exp\left(-\beta\mathcal{H}(\{\sigma_\alpha\})\right) = Z_{\tilde{0}}\ \langle \exp\left(-\beta(H - H_0)\right)\rangle_{\tilde{0}}. \tag{3.48}$$

En déduire l'inégalité suivante

$$\beta\mathcal{H}(\{\sigma_\alpha\}) \le -\log Z_{\tilde{0}} + \beta\langle H - H_0\rangle_{\tilde{0}}. \tag{3.49}$$

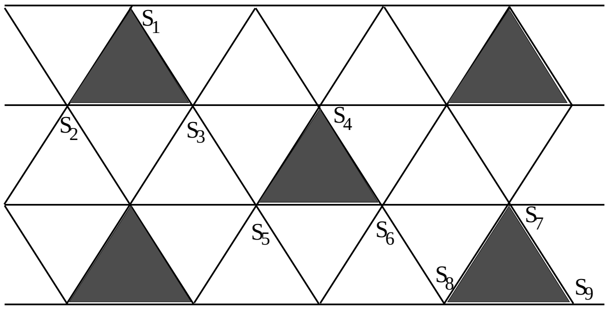



FIG. 3.2 – Blocs de spins sur le réseau triangulaire.

4. Calculer $Z_{\tilde{0}}$. Montrer que

$$\langle S_i \rangle_{\tilde{0}} = \frac{e^{3J_1} + e^{-J_1}}{e^{3J_1} + 3\, e^{-J_1}}\, \sigma_\alpha, \tag{3.50}$$

où $\alpha$ est le bloc auquel appartient le site $i$. En déduire la valeur de $\langle H - H_0 \rangle_{\tilde{0}}$.

5. Etablir les transformations du groupe de renormalisation

$$\begin{aligned}
J_1' &= 2\, J_1 \left( \frac{e^{3J_1} + e^{-J_1}}{e^{3J_1} + 3\, e^{-J_1}} \right)^2 \\
J_2' &= 3\, J_2 \left( \frac{e^{3J_1} + e^{-J_1}}{e^{3J_1} + 3\, e^{-J_1}} \right) \\
J_0' &= 3\, J_0 + \log(e^{3J_1} + 3\, e^{-J_1}),
\end{aligned} \tag{3.51}$$

obtenues en approximant $\mathcal{H}$ par la borne supérieure (3.49). Quels sont les points fixes $(J_1^*, J_2^*)$ du flot des deux constantes de couplages ? Etudier leur stabilité.

6. Calculer les exposants critiques correspondant au point fixe non trivial déterminé lors de la question précédente.

## 3.3 Mise en pratique : renormalisation du modèle $O(n \to \infty)$

### 3.3.1 Principe de la procédure de renormalisation à la Wilson

Comment mettre en oeuvre de manière concrète les concepts de renormalisation que nous avons exposés dans les sections précédentes ? En petite classe nous avons vu deux exemples : le modèle d'Ising à une dimension, pour lequel la procédure de décimation est exacte, et à deux dimensions où la même procédure ne produit qu'une approximation. La méthode que nous allons maintenant introduire est due à K. Wilson. Elle est générale et permet de contrôler avec précision l'évolution des couplages avec le flot de renormalisation. Appelons $\Lambda$ le nombre d'onde maximal correspondant à l'inverse de la plus petite distance microscopique, par exemple la longueur de la maille du réseau dans un cristal. Notre procédure consiste en trois étapes :

– décimation (intégration) des degrés de liberté du champ correspondant aux petites longueurs, c'est-à-dire aux modes de Fourier associés aux grands nombres d'ondes. Plus précisément, soit $s$ un paramètre adimensionné d'échelle ($s > 1$). Nous allons intégrer les modes de Fourier de la théorie correspondant aux nombres d'ondes

$$\frac{\Lambda}{s} \leq k \leq \Lambda \; . \tag{3.52}$$

– dilatation de l'échelle de longueur :

$$x \to x' = \frac{x}{s} \; . \tag{3.53}$$

Cette étape permet à la maille du réseau de retrouver sa valeur avant décimation. En d'autres mots, le nombre d'onde maximal, qui était devenu égal à $\Lambda/s$ après la décimation revient à la valeur $\Lambda$, ce qui nous permettra de comparer les théories après et avant la décimation.

– renormalisation du champ :

$$\phi(x) \to \phi'(x') = s^{d_\phi} \; \phi(x) \; . \tag{3.54}$$

Nous avons vu dans les sections 4.1.1 et 4.2 les raisons poussant à effectuer cette opération.

La petite classe suivante permet d'illustrer, dans le cas très simple de la théorie libre, cette procédure de renormalisation.

### 3.3.2 Petite classe 9 : renormalisation du champ libre

On considère une théorie libre

$$E[\{\phi(x)\}] = \int d^dx \; \left[\frac{c}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{r}{2}\phi^2\right] \tag{3.55}$$

que l'on cherche à renormaliser suivant la procédure suivante :

– Intégration sur les modes de Fourier du champ avec

$$\frac{\Lambda}{s} \leq k \leq \Lambda \; . \tag{3.56}$$

– Dilatation de l'unité de longueur :

$$x \to x' = \frac{x}{s} \ . \tag{3.57}$$

– Renormalisation du champ :

$$\phi(x) \to \phi'(x') = s^{d_\phi}\ \phi(x) \ . \tag{3.58}$$

1. Ecrire le hamiltonien $E$ en fonction des composantes de Fourier $\tilde{\varphi}(k)$ du champ. Montrer que, pour ces composantes de Fourier, la procédure ci-dessus conduit à

$$\begin{aligned} k \quad &\to \quad k' = s\ k\ , \\ \tilde{\phi}(k) \quad &\to \quad \tilde{\phi}'(k') = s^{d_\phi - 2d}\ \tilde{\phi}(k) \ . \end{aligned} \tag{3.59}$$

2. En déduire le flot de renormalisation des constantes de couplage

$$\begin{aligned} c \quad &\to \quad c' = s^{d-2-2d_\phi}\ c\ , \\ r \quad &\to \quad r' = s^{d-2d_\phi}\ r \ . \end{aligned} \tag{3.60}$$

Quels sont les points fixes ? Quelles sont les valeurs des exposants $\eta$ et $\nu$ associés au point fixe non trivial ?

3. On suppose maintenant que l'on ajoute au hamiltonien $E$ un terme

$$w \int_{k<\Lambda} d^dk\ k^4\ \tilde{\phi}(k)\, \tilde{\phi}(-k) \ . \tag{3.61}$$

Quel est le flot de la constante de couplage $w$ ? Quelle est sa valeur au point fixe ? Quel sens physique pouvez-vous donner à ce résultat ?

### 3.3.3 Application au modèle $O(n \to \infty)$

Nous allons maintenant appliquer ces idées au modèle $O(n)$, une généralisation du modèle d'Ising dans laquelle les spins sont des vecteurs à $n$ dimensions et que nous avons introduit dans la section 3.1.5. Ici, nous n'imposons pas la valeur de la norme du vecteur de spin local de manière rigide mais la contraignons à travers un potentiel $V$. L'énergie associée à une configuration $\{\vec{\phi}(\vec{x}) = (\phi^1(\vec{x}), \phi^2(\vec{x}), \ldots, \phi^n(\vec{x}))\}$ du champ est

$$H[\phi(x)] = \int d^dx \left[ \frac{c}{2} \sum_{\mu=1}^{d} \sum_{a=1}^{n} \left( \frac{\partial \phi^a}{\partial x_\mu} \right)^2 + n\ V\left( \frac{1}{n} \sum_{a=1}^{n} \phi^a(\vec{x})^2 \right) \right] \tag{3.62}$$

où

$$V(z) = u_1\, z + \frac{u_2}{2}\, z^2 \ , \tag{3.63}$$

et $u_1, u_2$ sont des constantes (avec $u_2 > 0$). Nous savons déjà, depuis la petite classe 5 (Section 3.1.6) que certains des exposants critiques de ce modèle sont différents de ceux du champ moyen en dimension $2 < d < 4$. Il s'agit ici de voir comment ces résultats peuvent être retrouvés à l'aide des concepts du groupe de renormalisation.

Remarquons que l'ensemble des constantes de couplages, $\mu$, se résume initialement à une triplet de variables, $(c, u_2, u_4)$. Au fûr et à mesure que nous allons intégrer les modes de Fourier correspondant aux petites échelles spatiales de nouvelles constantes de couplages vont apparaître. Plus précisément le potentiel $V$ ne sera plus une fonction quadratique de $z^2$ mais des puissances plus élevées vont faire leur apparition. Comme ajouter une constante globale au potentiel ne change pas les propriétés de la théorie (3.62), on peut tout aussi bien suivre le flot de la dérivée du potentiel

$$U(z) = \frac{dV}{dz}(z) \quad . \tag{3.64}$$

Dans la suite on considérera donc que le vecteur $\mu$ des constantes de couplages contient la valeur de $c$ et aussi la fonction $U(z)$, c'est-à-dire l'ensemble des coefficients de son développement en série.

Soit $\phi^a(\vec{x}), a = 1, .., n$ une configuration du champ dans l'espace et

$$\tilde{\phi}^a(\vec{k}) = \int d^dx\, e^{-i\vec{k}.\vec{x}}\, \phi^a(\vec{x}) \tag{3.65}$$

sa transformée de Fourier. Les nombres d'ondes $\vec{k}$ appartiennent à la première zone de Brillouin $[-\Lambda, \Lambda]^d$ où $\Lambda = \pi/a$ et $a$ est l'échelle de longueur microscopique (maille du réseau). Par la suite nous utiliserons les symboles $\int_-$ et $\int_+$ pour désigner les intégrales sur les impulsions $\vec{k}$ de module, respectivement, inférieur et supérieur à $\Lambda/s$ (et bien sûr dans la première zone de Brillouin). Nous appelerons

$$\phi^a_\pm(\vec{x}) = \int_\pm \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\, e^{i\vec{k}.\vec{x}}\, \tilde{\phi}^a(\vec{k}) \ , \tag{3.66}$$

les transformées de Fourier inverse sur chacun des domaines d'impulsions définis précédemment.

Commençons par traiter le terme élastique du hamiltonien $H$. On peut écrire

$$\begin{aligned}
\int d^dx\, (\vec{\nabla}\phi^a(\vec{x}))^2 &= \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\, k^2\, \tilde{\phi}^a(\vec{k})\, \tilde{\phi}^a(-\vec{k}) \\
&= \int_+ \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\, k^2\, \tilde{\phi}^a(\vec{k})\, \tilde{\phi}^a(-\vec{k}) + \int_- \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\, k^2\, \tilde{\phi}^a(\vec{k})\, \tilde{\phi}^a(-\vec{k}) \\
&= \int_+ \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\, k^2\, \tilde{\phi}^a(\vec{k})\, \tilde{\phi}^a(-\vec{k}) + \int d^dx\, (\vec{\nabla}\phi^a_-(\vec{x}))^2 \ .
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Cette manipulation permet de séparer les degrés de liberté du champ correspondants aux petites échelles de longueur que nous allons intégrer des autres degrés de libertés et que nous laissons inchangés dans la transformation de renormalisation.

Passons maintenant au terme correspondant au potentiel $V$. Comme le potentiel est a priori non quadratique il n'est pas possible de répéter l'opération de séparation ci-dessus. Nous allons suivre une autre voie. Définissons la transformée de Fourier de ce terme

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-n\,V(z)+i\,n\,y\,z} \equiv e^{n\,W(i\,y)} \ . \tag{3.68}$$

Pour le potentiel $V$ initial (3.63) la fonction $W(y)$ est simplement

$$W(y) = \frac{1}{2u_2}(y+u_1)^2 + \frac{1}{2n}\log\left(\frac{n\,u_2}{2\pi}\right) \ . \tag{3.69}$$

En général, lorsque $V$ n'est plus un polynôme de degré deux en $z$, la fonction $W(y)$ (qui dépend implicitement de $n$) devient plus compliquée. Dans la limite des grands $n$ on peut la calculer à l'aide de la méthode du col (voir Appendice 3.3.5). L'intégrale sur $z$, le long d'un contour approprié dans le plan complexe, est dominée par le voisinage de $z^*$, solution de $U(z^*) = i\,y$, voir la définition (3.64) de $U$. On obtient simplement, en posant $t = i\,y$,

$$W(t) = t\,z^* - V(z^*) \quad \text{avec} \quad U(z^*) = t \ . \tag{3.70}$$

Ainsi $W$ n'est autre que la transformée de Legendre de $V$. En particulier, si l'on connaît $t$, on peut déterminer $z^*$ en dérivant (3.70) par rapport à $t$,

$$\frac{dW}{dt}(t) = z^* \ . \tag{3.71}$$

En fait nous n'avons pas besoin de connaître son expression explicitement comme nous le verrons par la suite. En utilisant la transformée de Fourier inverse, écrivons

$$\exp\left(-n\,V\left(\frac{1}{n}\vec{\phi}(\vec{x})^2\right)\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy}{2\pi}\ \exp\left(n\,W(i\,y) - i\,y\sum_{a=1}^{n}\phi^a(\vec{x})^2\right) \ . \tag{3.72}$$

Remarquons que pour utiliser cette identité en différents points $\vec{x}$, il est nécesssaire de faire apparaître la dépendance explicite de $y$ avec $\vec{x}$. En d'autre mots il faut introduire autant d'intégrales sur $y$ qu'il y a de points $\vec{x}$ dans l'espace. Ainsi on peut écrire, pour une configuration donnée du champ,

$$\exp\left(-n\int d^dx\,V\left(\frac{1}{n}\vec{\phi}(\vec{x})^2\right)\right) = \int d[y]\ \exp\left(\int d^dx\,[n\,W(i\,y(\vec{x})) - i\,y(\vec{x})\sum_{a=1}^{n}\phi^a(\vec{x})^2]\right) \ , \tag{3.73}$$

où l'intégrale est maintenant une intégrale de chemin sur tous les champs auxiliaires $y(\vec{x})$ défini dans l'espace.

Qu'avons nous gagné à introduire cette intégrale de chemin supplémentaire ? La réponse tient dans le fait que la dépendance de l'exposant de l'intégrand dans le champ physique $\vec{\phi}$ est maintenant plus simple : elle est quadratique. Nous allons pouvoir donc effectuer explicitement les intégrales de chemin sur le champ. Le gain est considérable car, au prix d'un seule intégrale de chemin (sur la variable scalaire $y$) nous pouvons effectuer $n$ intégrales de chemin (sur chacune des composantes du champ $\phi^a$). Dans la limite des grands $n$, nous verrons même qu'il n'y a pas besoin d'effectuer l'intégrale de chemin sur les configurations de la variable $y$ ...

Considérons pour commencer le cas d'une configuration uniforme $y(\vec{x}) = y_0$ sur tout l'espace. Nous écrivons alors

$$\begin{aligned} \int d^d x\, y(x) \sum_{a=1}^{n} (\phi^a(\vec{x}))^2 &= y_0 \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\, \tilde{\phi}^a(\vec{k})\, \tilde{\phi}^a(-\vec{k}) \\ &= y_0 \int_+ \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\, \tilde{\phi}^a(\vec{k})\, \tilde{\phi}^a(-\vec{k}) + y_0 \int d^d x\, (\phi^a_-(\vec{x}))^2 \ . \end{aligned} \qquad (3.74)$$

Nous pouvons alors écrire la fonction de partition à champ $\vec{\phi}_-(\vec{x})$ fixé :

$$\begin{aligned} Z[\{y(\vec{x}) = y_0, \vec{\phi}_-(\vec{x})\}] &= \exp\left[\int d^d x \left(n\, W(i\, y_0) - i\, y_0\, \vec{\phi}_-(\vec{x})^2 - \frac{c}{2}(\vec{\nabla}\phi_-(\vec{x}))^2\right)\right] \\ &\times \int d[\vec{\phi}_+]\, \exp\left(-\int d^d x\, (\frac{c}{2}(\vec{\nabla}\phi_+(\vec{x}))^2 + i\, y_0\, \vec{\phi}_+(\vec{x})^2)\right) \end{aligned} \qquad (3.75)$$

L'intégrale de chemin sur le champ $\vec{\phi}_+$ étant gaussienne, on peut la calculer immédiatement. Finalement on trouve

$$Z[\{y(\vec{x}) = y_0, \vec{\phi}_-(\vec{x})\}] = \exp\left(-H'[\{y_0, \vec{\phi}_-(\vec{x})\}]\right) \qquad (3.76)$$

avec

$$\begin{aligned} H'[\{y_0, \vec{\phi}_-(\vec{x})\}] &= \int d^d x \left(-n\, W(i\, y_0) + i\, y_0\, \vec{\phi}_-(\vec{x})^2 + \frac{c}{2}(\vec{\nabla}\phi_-(\vec{x}))^2\right) \\ &+ \frac{n\, L^d}{2} \int_+ \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\, \log\left(c\, k^2 + 2\, i\, y_0\right) \end{aligned} \qquad (3.77)$$

où $L^d$ représente le volume du système.

Pour une configuration du champ auxiliaire $y(\vec{x})$ non uniforme le calcul ci-dessus est plus compliqué. Mais une propriété fondamentale du hamiltonien effectif $H'$, que l'on peut vérifier sur l'équation (3.77), reste vraie : il est proportionnel à $n$, le nombre de composantes du champ physique $\vec{\phi}$. Nous pouvons donc écrire $H' = n\,h'$ où $h'$ est un hamiltonien effectif intensif et la fonction de partition à champ $\vec{\phi}_-(\vec{x})$ fixé vaut :

$$Z[\{\vec{\phi}_-(\vec{x})\}] = \int d[y] \exp\left[-n\, h'[\{y(\vec{x}), \vec{\phi}_-(\vec{x})\}\right] \tag{3.78}$$

Cette intégrale de chemin est facile à évaluer dans la limite $n \to \infty$ par la méthode du col : il suffit de chercher la configuration du champ auxiliaire $y(\vec{x})$ qui minimise $h'$. Par invariance par translation on trouve que le champ optimal est uniforme sur l'espace, $y(\vec{x}) = y_0$.

Reste ensuite à déterminer la valeur de $y_0$ qui minimise le hamiltonien effectif $H'$ (qui n'est autre que l'énergie libre à champ $\vec{\phi}_-$ fixé). Pour cela nous posons $t = i\,y_0$ et dérivons par rapport à $t$. L'équation sur $t$ est :

$$\frac{dW}{dt}(t) = \frac{\vec{\phi}_-^2}{n} + \int_+ \frac{d^dk}{(2\pi)^d} \frac{1}{c\,k^2 + 2\,t} \ . \tag{3.79}$$

Dans l'équation ci-dessus, la dépendance en $\vec{x}$ de $\vec{\phi}_-^2$ a été omise. Une conséquence de la limite $n \to \infty$ est en effet que la norme de $\vec{\phi}$ fluctue relativement peu : $\vec{\phi}^2/n$ est uniforme sur tout l'espace à des fluctuations d'ordre $1/\sqrt{n}$ près. Utilisons maintenant les relations de Legendre (3.70,3.71) reliant les arguments de $W$ et $V$ et les dérivées de ces fonctions. Nous écrivons donc $t = U(z)$ où $z = dW(t)/dt$ et en déduisons

$$W(t) = t\,z - V(z) \tag{3.80}$$

où $z$ est solution de l'équation implicite

$$z = \frac{\vec{\phi}_-^2}{n} + \int_+ \frac{d^dk}{(2\pi)^d} \frac{1}{c\,k^2 + 2\,U(z)} \ . \tag{3.81}$$

Nous pouvons maintenant conclure que, après minimisation par rapport à $y_0$, le hamiltonien effectif vaut :

$$\begin{aligned} H'[\{\vec{\phi}_-(\vec{x})\}] &= \int d^dx \left(\frac{c}{2}(\vec{\nabla}\phi_-(\vec{x}))^2 + U(z)\,\vec{\phi}_-(\vec{x})^2\right) + L^d\,(V(z) - z\,U(z)) \\ &- \frac{L^d}{2} \int_+ \frac{d^dk}{(2\pi)^d} \log\left(c\,k^2 + 2\,U(z)\right) \end{aligned} \tag{3.82}$$

où $z$ dépend du champ à travers la relation (3.81).

Ces deux dernières équations vont nous permettre définissent le flot de renormalisation du hamiltonien lorsque l'on intègre sur les degrés de liberté microscopiques. Elles sont correctes dans la limite $n \to \infty$ seulement.

### 3.3.4 Flot et point fixe du groupe de renormalisation

Commençons par regarder le changement de la constante de couplage $c$ associée au terme élastique. En dilatant l'échelle de longueur et en effectuant une multiplication du champ suivant les prescriptions (3.53) et (3.54) respectivement, on trouve

$$c \int d^d x \, (\vec{\nabla}\phi_-(x))^2 = c \, s^d \int d^d x' \, (\vec{\nabla}'\phi'(x') \times s^{-d_\phi - 1})^2 \tag{3.83}$$

ou encore

$$c' = s^{d-2d_\phi-2} \, c \; . \tag{3.84}$$

Les points fixes de cette équation de flot sont au nombre de trois : $c = 0$ qui correspond à un point fixe de température infinie car il n'y a plus de couplages entre les valeurs du champ en différents points de l'espace, $c = \infty$ qui correspond au contraire à la température nulle car le champ doit être uniforme, et $c$ fini. Ce dernier point fixe, non trivial, impose que $d - 2d_\phi - 2 = 0$ ou encore, en utilisant (3.26), que

$$\eta = 0 \; . \tag{3.85}$$

Ainsi il n'y a pas de correction à la valeur de champ moyen de l'exposant $\eta$ dans la limite $n \to \infty$ comme nous l'avions vu dans la petite classe 5[1]. Dans la suite nous supposerons que $c = 1$, ce que l'on peut toujours obtenir en divisant le champ $\phi$ par $\sqrt{c}$.

Le nouveau potentiel $V$ après renormalisation se lit à partir de l'expression du hamiltonien (3.82) une fois retirée la contribution venant du terme élastique. Cette expression est compliquée et peu pratique à manipuler. Il est beaucoup plus commode de considérer la dérivée de ce potentiel, $U$. La nouvelle dérivée après renormalisation, $U'$, s'obtient en dérivant $H'$ par rapport à $\vec{\phi}_-(\vec{x})^2/n = \vec{\phi}'(\vec{x}')^2/n \times s^{-2d_\phi}$ et en multipliant par $s^d$ pour tenir compte de la contraction des longueurs. Deux contributions apparaissent dans la dérivée : la dérivée directe, qui est simplement $U(z)$, et la dérivée implicite à travers $z$. Mais la valeur de $z$ a été justement choisie pour minimiser $H'$ donc cette contribution indirecte est nulle comme on peut le vérifier explicitement à partir de (3.81) et (3.82). Au final nous obtenons

$$U'\left(\frac{\vec{\phi}'^2}{n}\right) = s^{d-2d_\phi} \, U(z) \tag{3.86}$$

c'est-à-dire, en utilisant $d_\phi = (d-2)/2$, et en posant $y = \vec{\phi}'^2/n$,

$$U'(y) = s^2 \, U\left(s^{2-d} y + \int_{\Lambda/s<k<\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 + 2\,U'(y)/s^2}\right) \; . \tag{3.87}$$

[1]Des calculs plus poussés, prenant en compte les premières corrections à la limite de $n$ infini, montrent que $\eta$ est d'ordre $1/n$.

Cette équation fonctionnelle donne les nouvelles constantes de couplages (qui sont les coefficient du développement de $U'$ en puissances de $y$) en fonction des anciennes de manière implicite. Elle correspond précisément à l'équation abstraite $\mu' = R_s \mu$ pour le modèle $O(n \to \infty)$.

Si $U$ est sur la surface critique, $U'$ va converger vers le "point" fixe $U^*$ lorsque $s \to \infty$. L'intégrale sur les moments $k$ dans l'argument de $U$ dans l'expression (3.87) devient donc

$$y^* \equiv \int_{k<\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2} = S_d \, \frac{\Lambda^{d-2}}{d-2} \tag{3.88}$$

où $S_d$ est la surface de la sphère de rayon unité en dimension $d$, divisée par $(2\pi)^d$. Remarquons que $y^*$ est bien défini en dimension $d > 2$ seulement. Nous devons de toute façon satisfaire cette condition pour observer une transition de phase car il n'y a pas de transition en dimension $\leq 2$ dans modèle $O(n)$ pour $n \geq 2$, voir le théorème de Mermin-Wagner exposé dans la petite classe 6.

Si $U(y^*) \neq 0$ le membre de droite de (3.87) se comporte comme $s^2 \, U(y^*)$ quand $s \to \infty$, ce qui contredit le fait que le point fixe $U^*$ est fini. Nous en déduisons que

$$U(y^*) = 0 \tag{3.89}$$

est une condition nécessaire pour que $U$ soit sur la surface critique. En d'autres termes, le potentiel $V$ doit être extrémal (en fait minimal comme nous le verrons par la suite) en $y^*$.

Pour $s$ grand mais fini, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}
\int_{\Lambda/s<k<\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 + 2\,U'/s^2} &= \int_{\Lambda/s<k<\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left( \frac{1}{k^2 + 2\,U'/s^2} - \frac{1}{k^2} \right) \\
&- \int_{k<\Lambda/s} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2} + y^* \\
&= y^* \times \left( 1 + s^{2-d}\, \zeta \right)
\end{aligned} \tag{3.90}$$

où

$$\zeta = -1 + (d-2) \int_1^s dw \; w^{d-1} \; \left( \frac{1}{w^2 + 2U'/\Lambda^2} - \frac{1}{w^2} \right) \;, \tag{3.91}$$

après avoir fait le changement de variable $k \to w = k\,\Lambda/s$. Insérons cette expression dans (3.87) en utilisant la condition (3.89) :

$$U'(y) = s^{4-d} \; (y + y^* \, \zeta) \; \frac{dU}{dy}(y^*) + o(s^{4-d}) \;. \tag{3.92}$$

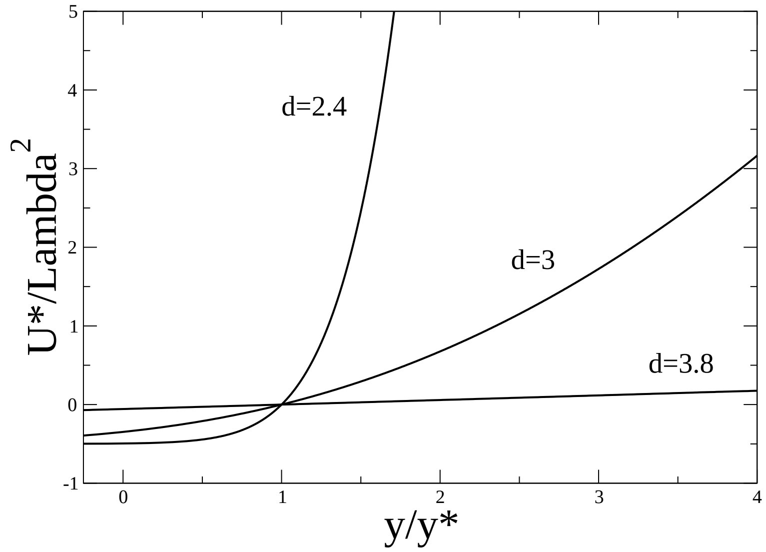



FIG. 3.3 – Graphe de $U^*$, dérivée du potentiel $V^*$, correspondant au point fixe du groupe de renormalisation pour différentes dimensions $d$ de l'espace. L'argument $y$ est la norme carrée du vecteur du champ divisée par le nombre $n$ de composantes. $\Lambda$ est le moment maximal et $y^*$ est défini en (3.88).

Dans la suite nous supposerons que la dérivée de $U$ en $y^*$ est strictement positive ou, de manière équivalente, que la courbure du potentiel $V$ en $y^*$ est positive[2].

Considérons le comportement du membre de droite de (3.92) lorsque $s$ tend vers l'infini. En dimension $d < 4$, $s^{4-d}$ diverge alors que $\zeta$ ne diverge pas car l'intégrale dans (3.91) est convergente. Comme le membre de gauche de (3.92) tend vers une limite finie, $U^*(y)$, nous pouvons conclure que la limite de $\zeta$ est égale à $-y/y^*$, c'est-à-dire que

$$\frac{y}{y^*} = 1 - (d-2) \int_1^\infty dw \; w^{d-1} \left( \frac{1}{w^2 + 2U^*/\Lambda^2} - \frac{1}{w^2} \right) \qquad (2 < d < 4) \qquad (3.93)$$

Cette relation donne la valeur de $y$ à partir de celle de $U^*$. En variant $y$ nous pouvons donc décrire de manière paramétrique la fonction $U^*$ correpondant au point fixe de $R_s$. Le graphe de $U^*$ comme fonction de $y$ est représenté sur la figure 3.3. En intégrant par rapport à $y$ on trouve le potentiel $V^*$ au point fixe représenté sur la figure 3.4 (en choisissant la constante additive pour que $V^*(0) = 0$).

Lorsque la dimension est $d \geq 4$ l'intégrale définissant $\zeta$ (3.91) est divergente lorsque

[2]Il semble que l'on doive supposer ici uniquement que cette courbure est non nulle. La positivité assure la convergence de $U'$ vers le point fixe $U^*$ (nous ne détaillerons pas cette affirmation).

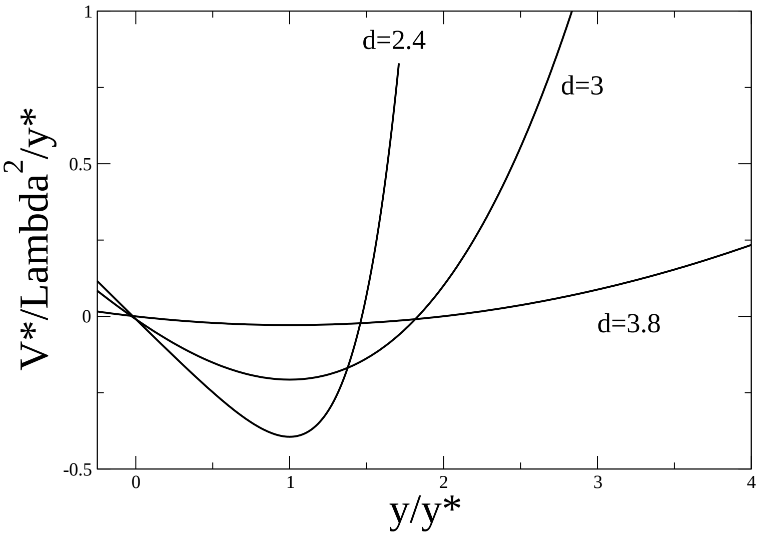



FIG. 3.4 – Graphe du potentiel $V^*$ correspondant au point fixe du groupe de renormalisation pour différentes dimensions $d$ de l'espace.

$s \to \infty$. Plus précisément, nous avons

$$\zeta \simeq \frac{d-2}{d-4} s^{d-4} \times \frac{2\,U'(y)}{\Lambda^2} \ . \tag{3.94}$$

Nous insérons ce résultat dans l'argument de (3.87) en utilisant (3.90) pour trouver

$$U'(y) = s^2\, U(y^* + y\ s^{2-d} + O(s^{-2})) = O(s^{4-d}) \tag{3.95}$$

ce qui permet d'affirmer que[3]

$$U^*(y) = 0 \qquad\qquad (d \geq 4) \ . \tag{3.96}$$

Ainsi en dimension supérieure ou égale à 4, le potentiel associé au point fixe est nul. La mesure associée au point fixe est donc donnée par le terme élastique uniquement : c'est le point fixe gaussien, associé aux exposants de champ moyen.

Comme $U^*$ est une fonction continue de la dimension, si nous nous plaçons en dimension $d = 4 - \epsilon$ avec $\epsilon$ petit, les coefficients du potentiel sont eux-mêmes petits. Ecrivons

$$U^*(y) = \sum_{m \geq 0} u^*_{2(m+1)}\ y^m \ . \tag{3.97}$$

[3]A strictement parler notre argument est valide en dimension $d > 4$ seulement. Un calcul plus précis en $d = 4$ montre que $O(s^{4-d})$ doit être remplacé par $O(1/\log s)$ dans (3.95), ce qui implique que le potentiel au point fixe est nul en $d = 4$ également.

Nous trouvons à partir des résultats précédents que :

$$\begin{aligned} u_2^* &= -\frac{\epsilon\,\Lambda^2}{2} + O(\epsilon^2) \\ u_4^* &= 16\,\pi^2\,\epsilon\,\Lambda^\epsilon + O(\epsilon^2) \\ u_{2(m+1)}^* &= \frac{(-1)^{m-1}}{m-1}\,u_2^*\,\left(\frac{u_4^*}{\Lambda^2}\right)^m + O(\epsilon^{m+2}) \end{aligned} \tag{3.98}$$

pour $m \geq 2$. La notation $\Lambda^\epsilon$ indique que le développement en puissance de $\epsilon$ fera apparaître des termes en $\log \Lambda$, même s'ils ne figurent pas à l'ordre le plus bas en $\epsilon$.

La remarque suivante est importante : lorsque $\Lambda$ est grand, la seule constante de couplage qui ne tend pas à zéro est $u_4^*$ (la constante $u_2^*$ régit le terme quadratique dans $V^*$ et ne traduit donc pas la présence d'interactions). Cette propriété, que nous avons établie pour $n \to \infty$, reste vraie quel que soit le nombre de composantes $n$ du champ. Elle est d'une importance considérable pour calculer les développements des exposants critiques en puissance de $\epsilon$. Malheureusement ce calcul fait appel à des techniques qui dépassent le cadre de ce cours. C'est donc sans aucune justification que nous reproduisons la valeur de l'exposant $\eta$ que donne ce calcul,

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\epsilon^2\,(n+2)}{2(n+8)^2}\left(1 + \frac{-n^2+56n+272}{4(n+8)^2}\,\epsilon + \frac{1}{16(n+8)^4}[(-5n^4 - 230n^3\right. \\ &+ \left. 1124n^2 + 17920n + 46144 - 384(5n+22)(n+8)\zeta(3)]\,\epsilon^2\right) + O(\epsilon^5) \end{aligned} \tag{3.99}$$

valable pour tout $n$ ! Ici $\zeta(3) \simeq 1.202057$ est la somme des inverses des cubes des entiers. Des expressions similaires existent pour les exposants critiques, en particulier $\nu$. C'est à partir de ces expressions que l'on peut notamment trouver les exposants correspondant aux marches aléatoires auto-évitantes (en mettant $n$ à zéro).

**Exercice :**

Nous avons vu que, pour $n \to \infty$, l'exposant $\eta$ est nul quelle que soit la dimension $d$ (supérieure à 2). Calculer les autres exposants lorsque $2 < d < 4$ en suivant la stratégie exposée en Section 3.2. Montrer en particulier que $y_1 = d - 2$, $y_2 = d - 4$.

### 3.3.5 Appendice 1 : les méthodes de Laplace et du col

Considérons l'intégrale

$$I(n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\; e^{-n\,f(x)} \tag{3.100}$$

où $f(x)$ est une fonction schématisée sur la figure 3.5 ; en particulier $f(x) \to +\infty$ lorsque $x \to \pm\infty$ et $f$ a un minimum global en $x^*$. En $x^*$ la dérivée première de $f$ est nulle et la dérivée seconde est positive. Nous voulons trouver une approximation de $I(n)$ lorsque $n$ est grand. Intuitivement la contribution la plus importante à l'intégrale provient du voisinage de $x^*$. Pour $x = x^* + \epsilon$, nous écrivons

$$f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2} f''(x^*)\,\epsilon^2 + O(\epsilon^3) \tag{3.101}$$

et obtenons

$$\begin{aligned} I(n) &\simeq e^{-n\,f(x^*)} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \;\exp\left(-n \frac{f''(x^*)}{2}\,\epsilon^2\right) \\ &= e^{-n\,f(x^*)} \sqrt{\frac{2\pi}{n\,f''(x^*)}} \\ &= e^{-n\,f(x^*)+O(\log n)} \end{aligned} \tag{3.102}$$

Ainsi, pour trouver le logarithme de $I(n)$ lorsque $n$ est grand, il suffit de chercher le minimum de la fonction $f$. On trouve alors $\log I(n) = -n\,f(x^*)$ à des termes d'ordre $\log n$ près.

Cette méthode d'évaluation des intégrales, dite de Laplace, peut s'étendre au cas de fonctions $f(x)$ à valeur complexes. Considérons par exemple l'intégrale suivante :

$$I(n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\; e^{-n\,x^2/2}\;\cos(n\,\lambda\,x)\ , \tag{3.103}$$

où $\lambda$ est un paramètre réel positif. En écrivant le cosinus comme une moyenne de deux exponentielles complexes conjuguées on voit que $I(n)$ est la moyenne de deux intégrales gaussiennes, ce qui permet d'obtenir

$$I(n) = \sqrt{\frac{2\pi}{n}}\;\exp\left(-\frac{n\,\lambda^2}{2}\right)\ . \tag{3.104}$$

La fonction $f(x)$ correspondante est

$$f(x) = \frac{x^2}{2} - i\,\lambda\,x \tag{3.105}$$

et est à valeurs complexes lorsque $x$ est réel. La fonction $f$ n'a plus de maximum global mais en $x^* = i\,\lambda$ tel que $f'(x^*) = 0$, sa partie réelle est minimale et sa partie imaginaire est maximale. Un tel point est appelé col (par analogie avec un col séparant deux vallées en montagne). On peut, en utilisant les méthodes d'analyse complexe, déformer le domaine d'intégration (qui est initialement l'axe réel) pour le faire passer par ce col. Comme la fonction $f$ est analytique, cette déformation ne change pas la valeur de $I(n)$. Dans la limite des grands $n$ la contribution dominante à l'intégrale vient du voisinage du col : la

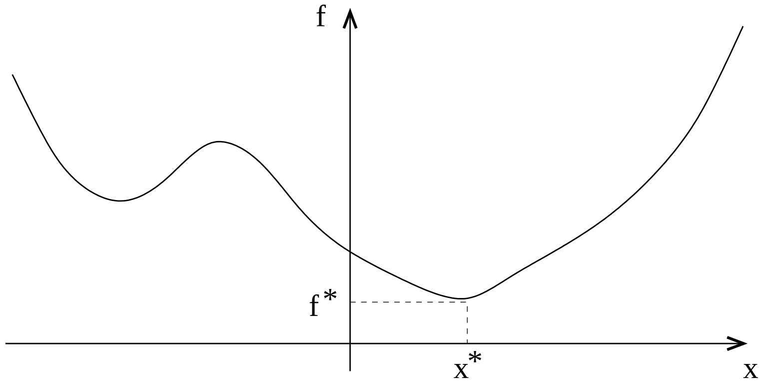



FIG. 3.5 – Fonction $f(x)$ définie pour $x$ réel et telle que l'intégrale $I(n)$ (3.100) est bien définie. On appelle $x^*$ la valeur de l'argument minimisant $f$. Dans la limite des grands $n$ le logarithme de $I(n)$ est, à l'ordre dominant, égal à $-n\, f^*$.

partie réelle de l'intégrand y est maximale et la partie imaginaire n'y oscille pas comme dans les autres points du plan complexe. Le résultat (3.102) est donc toujours valable. Dans notre cas particulier nous obtenons

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log I(n) = -f(x^*) = -\frac{\lambda^2}{2} \tag{3.106}$$

ce qui est le résultat attendu.

# Chapitre 4

# Problèmes

## 4.1 Problème 1 : Marches auto-évitantes

### 4.1.1 Enoncé

Examen du vendredi 24 février 1995, durée : 3 heures. Les deux exercices sont indépendants.

**Exercice 1 :** Marche auto-évitante sur un réseau fractal
L'objet de cet exercice est de caractériser les propriétés des marches auto-évitantes sur un réseau fractal particulier (la "courbe de Koch") en utilisant une méthode de renormalisation dans l'espace réel.
**1/.** On considère la structure fractale obtenue en poursuivant récursivement la construction décrite par la figure 4.1 ("courbe de Koch").

- Quelle est la dimension fractale de cette structure ?

**2/.** On désigne par $G_n(\beta)$ la fonction génératrice des chemins auto-évitant joignant les extrémités $AB$ de la structure, à l'étape $n$ de la construction récursive. Cette fonction génératrice est définie par :

$$G_n(\beta) = \sum_N \beta^N \mathcal{N}_N^{(n)} \tag{4.1}$$

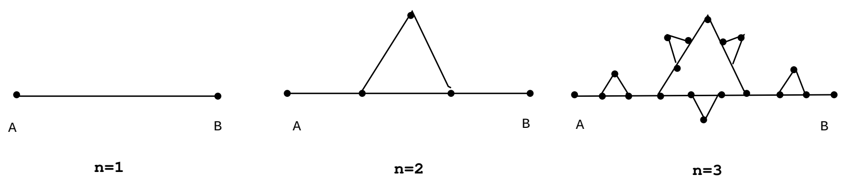



FIG. 4.1 – Construction récursive de la courbe de Koch

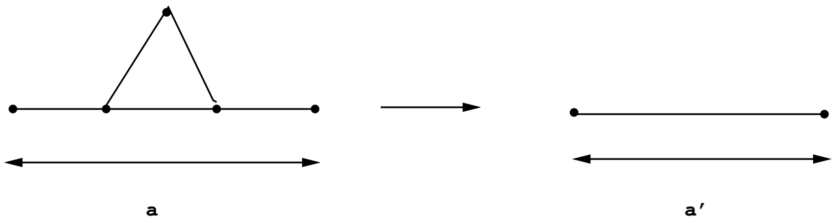



FIG. 4.2 – Procédure de renormalisation

où $\mathcal{N}_N^{(n)}$ est le nombre de chemins auto-évitant allant de $A$ à $B$ en $N$ pas sur la structure obtenue à l'étape $n$.

- Calculer par énumération $G_1(\beta)$, $G_2(\beta)$ et $G_3(\beta)$.
- Etablir la relation suivante, pour tout $n$ :

$$G_{n+1}(\beta) = G_n(\beta') \;\; avec: \;\; \beta' = \beta^3 + \beta^4 \tag{4.2}$$

**3/.** On considère la transformation de renormalisation dans l'espace réel qui consiste, partant d'un système de maille élémentaire $a$, à assimiler à un lien unique (de longueur $a' = 3a$) le motif de base de la figure 4.2.

Cette procédure revient à "remonter" la construction récursive ci-dessus, de sorte que la relation $\beta' = R(\beta) \equiv \beta^3 + \beta^4$ établie à la question précédente constitue la transformation de renormalisation exacte du paramètre $\beta$.

- Caractériser et interpréter les points fixes de cette transformation, et leur stabilité.

On rappelle que, si $r$ est la distance entre extrémités (en unité de la maille élémentaire), la fonction génératrice des chemins auto-évitants $G(r, \beta)$ se comporte en $e^{-r/\xi}$, avec $\xi \sim (\beta_c - \beta)^{-\nu}$. $\nu$ est l'exposant caractéristique de la longueur des marches, $r \sim N^\nu$, qui s'identifie donc à celui de la longueur de corrélation au point critique.

- Calculer l'exposant $\nu$.

**Exercice 2** : Nombre de chemins Hamiltoniens sur un réseau

En utilisant l'analogie avec les systèmes magnétiques à "zéro composantes", on cherche à estimer le nombre de chemins Hamiltoniens d'un réseau. Ce sont les chemins fermés qui visitent une fois et une seule *tous* les sîtes du réseau.

Le réseau est constitué de N points, indexés par un indice $r$. Les chemins sont des séquences de sîtes visités, avec la contrainte que deux sites successifs doivent être voisins sur le réseau. On appellera $\Delta$ la matrice carrée $N$ par $N$ qui caractérise les sîtes voisins :

$$\Delta_{rr'} = 1 \qquad \text{si r et r' sont voisins sur le réseau}$$

$$\Delta_{rr'} = 0 \qquad \text{sinon} \tag{1}$$

Sur chaque point $r$ du réseau on place un spin $\vec{S}_r$, qui est un spin classique à $n$ composantes, normalisé selon $\vec{S}_r^2 = n$. Les spins voisins interagissent, et l'énergie de ce système de $N$ spins est :

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{r,r'} \Delta_{rr'} \vec{S}_r.\vec{S}_{r'} \ . \tag{2}$$

Soit $Z$ la fonction de partition de ce système de spins, à la température $T = 1/\beta$ :

$$Z = \int \prod_r d\mu(\vec{S}_r) e^{-\beta H} \tag{3}$$

où $d\mu(\vec{S}_r)$ est la mesure d'intégration uniforme sur la sphère de rayon $\sqrt{n}$ à $n$ dimensions.

1- Montrer que $z(\beta) = \lim_{n\to 0}(Z-1)/n$ existe. Comment cette fonction est elle reliée aux chemins sur le réseau ?

2- Comment peut on déduire de $z(\beta)$ le nombre de chemins Hamiltoniens ?

On cherche à calculer $Z$ par une technique de champ moyen. Dans un premier temps on introduit sur chaque sîte un champ auxiliaire $\vec{\phi}_r$, qui est un champ réel à $n$ composantes à l'aide duquel on écrit la fonction de partition comme :

$$Z = C \int \prod_r d\vec{\phi}_r \prod_r d\mu(\vec{S}_r) \ \exp\left(-\frac{1}{2\beta}\sum_{r,r'}(\Delta^{-1})_{rr'}\vec{\phi}_r.\vec{\phi}_{r'} + \sum_r \vec{\phi}_r.\vec{S}_r\right) \tag{4}$$

(Dans tout ce problème, on utilisera formellemnt cette identité en supposant que $\Delta$ est inversible. Bien que cette condition ne soit pas remplie en pratique dans les cas que nous regarderons, l'identité (4) reste justifiée en déformant de manière appropriée les contours d'intégration sur les variables $\vec{\phi}$ dans le plan complexe... Nous éviterons ici simplement ces complications techniques en travaillant directement sur l'identité formelle (4)).

3- Que vaut la constante $C$ à la limite où $n \to 0$ ?

4- Dans l'expression (4) de la fonction de partition on intègre sur les spins $\vec{S}_r$. Montrer que l'on obtient alors la fonction de partition sous la forme :

$$Z = C \int \prod_r d\vec{\phi}_r \ e^{-H'[\phi]} \tag{5}$$

Quelle est l'expression du Hamiltonien effectif $H'[\phi]$ à la limite où $n \to 0$ ?

5- On considère le cas d'un réseau hypercubique en dimension $d$, avec des conditions aux limites périodiques. Montrer que, pour tout $r$ :

$$\sum_{r'} \Delta_{rr'} = 2d$$

$$\sum_{r'}(\Delta^{-1})_{rr'} = \frac{1}{2d} \tag{6}$$

6- Sur ce réseau hypercubique, on évalue la fonction de partition $Z$ dans (5) par une méthode du col. On cherche un col uniforme : $\vec{\phi}_r = \vec{\psi}$, qui minimise le Hamiltonien effectif :

$$\frac{\partial H'}{\partial \phi_r^\mu}[\vec{\phi}_r = \vec{\psi}] = 0 \tag{7}$$

Montrer qu'il existe une famille de tels cols qui ont tous la même valeur de $H'$, et qui sont caractérisés par $\vec{\psi}^2 = A$. Quelle est la valeur de A ? Quelle est la valeur de l'énergie au col, $H'[\vec{\psi}]$ ?

7- A l'ordre dominant, on approxime $Z$ par la somme des contributions de tous ces cols dégénérés, de sorte que :

$$Z \simeq 1 + C\ S_n\ |\vec{\psi}|^n\ e^{-H'[\vec{\psi}]} \tag{8}$$

où $S_n$ est la surface de la sphère unité en dimension $n$, donnée par $S_n = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}$. En utilisant le développement de la fonction $\Gamma$ à petit argument, $\Gamma(x) \sim 1/x$, calculer le comportement de Z lorsque le nombre de composantes des spins, $n$, tend vers 0. Quel est le nombre de chemins Hamiltoniens $\mathcal{N}_H$ sur un réseau hypercubique de $N$ sites avec conditions aux limites périodiques obtenu par cette approximation ?

Des simulations numériques sur un réseau carré à $d = 2$ fournissent l'estimation :

$$\lim_{N\to\infty} \frac{Log(\mathcal{N}_H)}{N} = 1.472 \pm .001$$

Comment ce résultat se compare-t-il à l'approximation de champ moyen ?

8- Reprendre l'approximation de champ moyen développée dans les questions 6 et 7 dans le cas d'un réseau hexagonal à $d = 2$ (pour lequel chaque site possède trois voisins) ? L'estimation numérique donne dans ce cas :

$$\lim_{N\to\infty} \frac{Log(\mathcal{N}_H)}{N} = 1.14 \pm .01$$

Comment ces chiffres se comparent-ils ?

9- (Question plus difficile) Comment pourrait on améliorer cette approximation de champ moyen ?

### 4.1.2 Corrigé

**Exercice 1**

1/ Lorsqu'on passe de l'étape $n$ à l'étape $n+1$, la maille du réseau est divisée par 3, et la "masse" (nombre de maillons) est multiplié par 5. Par conséquent la dimension fractale (définie par $M \sim (L/a)^{d_F}$) est $d_F = ln5/ln3$.

2/ • On obtient, par énumération directe des chemins auto-évitants : $G_1(\beta) = \beta$, $G_2(\beta) = \beta^4 + \beta^3$, $G_3(\beta) = \beta^{16} + 4\beta^{15} + 6\beta^{14} + 4\beta^{13} + 2\beta^{12} + 3\beta^{11} + 3\beta^{10} + \beta^9$. On pourra vérifier que $G_3(\beta) = G_2(\beta^4 + \beta^3)$ (cf. question suivante).

• Considérons un chemin de $N$ pas contribuant à $G_n$. Chacun de ces chemins donne lieu, à l'étape $n+1$, à :

- 1 chemin de $3N$ pas
- $C_N^1$ chemins de $3N+1$ pas
- $C_N^2$ chemins de $3N+2$ pas, etc... ($C_N^k$ chemins de $3N+k$ pas pour $k = 0, ..., N$).

Par conséquent :

$$G_{n+1}(\beta) = \sum_N \mathcal{N}_N^{(n)} \sum_{k=0}^{N} C_N^k \beta^{3N+k} \tag{4.3}$$

$$= \sum_N \mathcal{N}_N^{(n)} \beta^{3N} (1+\beta)^N \tag{4.4}$$

$$= G_{n+1}(\beta^3 + \beta^4) \tag{4.5}$$

3/ • La transformation $\beta' = \beta^3 + \beta^4$ possède 3 points fixes. Les deux premiers $\beta = 0$ et $\beta = \infty$ correspondent aux points fixes de haute température et de temepérature nulle du modèle $O(n)$ pour $n \to 0$ défini sur la courbe de Koch. Ces deux points fixes sont stables. Le point fixe "non-trivial", $\beta_c \simeq 0.756$ correspond au point critique et contrôle le comportement à longue distance des marches auto-évitantes. Il est instable ($\beta$ est une direction relevante au voisinage de ce point fixe).

• Linéarisons la transformation au voisinage de $\beta_c$ : on a $\frac{\partial \beta'}{\partial \beta} = 3\beta^2 + 4\beta^3$. La valeur propre associée à l'unique direction relevante s'écrit donc $s^{y_1} = 3\beta_c^2 + 4\beta_c^3$, où $s = 3$ est le facteur de dilatation de la maille du réseau à chaque étape. L'exposant de la longueur de corrélation est donné par (cf. cours) : $\nu = 1/y_1$, et par conséquent :

$$\nu = \frac{ln3}{ln(3\beta_c^2 + 4\beta_c^3)} \simeq 0.89 \tag{4.6}$$

**Exercice 2**

1- La fonction de partition est :

$$Z = \int \prod_r d\mu(\vec{S}_r) \exp\left(\frac{\beta}{2} \sum_{r,r'} \Delta_{rr'} \vec{S}_r . \vec{S}_{r'}\right) = \int \prod_r d\mu(\vec{S}_r) \exp\left(\beta \sum_{\text{liens}} \vec{S}.\vec{S}'\right)$$

On a démontré en cours que, pour $n \to 0$, le développement de cette fonction de partition en puissances de $\beta$ donne :

$$Z = 1 + n \sum_c \beta^{L_c} + O(n^2)$$

où $\sum_c$ est la somme sur tous les chemins autoévitants sur le réeseau, et $L_c$ est la longueur du chemin $c$.

2- Les chemins hamiltoniens sont ceux qui visitent tous les sites. Leur longueur est donc égale à $N$. Donc le nombre de chemins hamiltoniens $\mathcal{N}_{\mathcal{H}}$ se déduit de $z = \lim_{n\to 0}(Z-1)/n$ par :

$$\mathcal{N}_H = \lim_{\beta\to\infty} \frac{z}{\beta^N}$$

3- L'identité gaussienne habituelle s'écrit comme dans la formule (4) de l'énoncé, avec $C = \left((2\pi\beta)^N det(\Delta)\right)^{(-n/2)}$, qui tend donc vers 1 lorsque $n$ tend vers 0.

4- On a établi en cours que pour $n \to 0$ :

$$\int d\mu(\vec{S}_r) e^{\vec{\Phi}.\vec{S}} = 1 + \frac{\vec{\Phi}^2}{2} \ .$$

Appliquant cette identité à chaque spin $\vec{S}_r$ on trouve :

$$H'[\phi] = \frac{1}{2\beta} \sum_{r,r'} (\Delta^{-1})_{rr'} \vec{\Phi}_r.\vec{\Phi}_{r'} - \sum_r Log\left(1 + \frac{\vec{\Phi}_r^2}{2}\right) \ .$$

5- $\sum_{r'} \Delta_{rr'}$ est le nombre de voisins d'un site, qui vaut dans ce cas $2d$. Pour calculer $\sum_{r'}(\Delta^{-1})_{rr'}$, on peut par exemple remarquer que le vecteur de composantes égales à 1 sur chaque site est vecteur propre de $\Delta$ avec la valeur propre $2d$. Il en résulte aussitôt : $\sum_{r'}(\Delta^{-1})_{rr'} = \frac{1}{2d}$ ; (on pourrait aussi diagonaliser $\Delta$ par transformation de Fourier).

6- La condition de stationnarité s'écrit :

$$0 = \frac{\partial H'}{\partial \phi_r^\mu} = \frac{1}{\beta} \sum_{r'} (\Delta^{-1})_{rr'} \Phi_{r'}^\mu - \frac{\Phi_r^\mu}{1 + \vec{\Phi}_r^2/2}$$

Un col uniforme $\vec{\Phi}_r = \vec{\psi}$ est solution de cette équation, à condition d'avoir pour chaque composante $\mu$ :

$$0 = \psi^\mu \left(\frac{1}{2\beta d} - \frac{1}{1 + \vec{\psi}^2/2}\right) \ .$$

Il existe toujours un col symétrique $\vec{\psi} = \vec{0}$; Si la température est assez basse il existe de plus une famille de cols brisant la symétrie de rotation, avec :

$$\vec{\psi}^2 = 2(2\beta d - 1) \equiv A \ .$$

La valeur du Hamiltonien effectif sur chacun de ces cols est :

$$H'[\psi] = N\left(\frac{A}{4\beta d} - Log(1 + A/2)\right)$$

7- La fonction de partition reçoit des contributions du col $\vec{\Phi} = \vec{0}$, qui donne un terme évidemment égal à 1, et de tous les cols avec $\vec{\psi}^2 = A$. La somme de tous ces termes donne :

$$Z \simeq 1 + C\ S_n\ |\vec{\psi}|^n\ e^{-H'[\vec{\psi}]}\ .$$

On en déduit immédiatement que $z = (Z-1)/n$ se comporte comme :

$$z \simeq \exp\left(-N\left(\frac{A}{4\beta d} - Log(1 + A/2)\right)\right)\ .$$

Pour compter les chemins Hamiltoniens nous nous intéressons à la limite $\beta$ grand, pour laquelle $A \simeq 4\beta d$, ce qui donne :

$$z \simeq \left(\frac{2\beta d}{e}\right)^N$$

d'où l'on déduit :

$$\lim_{N\to\infty} \frac{Log(\mathcal{N}_H)}{N} = \frac{2d}{e}\ .$$

En deux dimensions cette approximation de champ moyen conduit donc à l'estimation :

$$\lim_{N\to\infty} \frac{Log(\mathcal{N}_H)}{N} = \frac{4}{e} \simeq 1.4715..\ ,$$

qui est en bon accord avec les résultats des simulations numériques.

8- Si l'on considère un réseau hexagonal, les calculs précédents sont fondamentalement inchangés. La seule modification est dans le comptage du nombre de voisins d'un site : le facteur $2d$ dans lec calculs précédents est remplacé par le nouveau nombre de voisins, à savoir 3. On trouve ainsi :

$$\lim_{N\to\infty} \frac{Log(\mathcal{N}_H)}{N} = \frac{3}{e} \simeq 1.1036..\ ,$$

qui est de nouveau une bonne approximation de la vraie valeur.

9- Cette approche peut être améliorée systématiquement en calculant les fluctuations autour du col. Il faut donc reprendre l'expression de la fonction de partition :

$$Z = C \int \prod_r d\vec{\phi}_r\ e^{-H'[\phi]}$$

et écrire le champ $\vec{\Phi}$ comme $\vec{\Phi} = \vec{\psi} + \delta\vec{\Phi}$, où $\psi$ est l'un des cols précédents. On développe alors $H'[\phi]$ en puissances de $\delta\vec{\Phi}$. Le terme d'ordre zéro est la contribution au col que nous avons calculée ci-dessus. Le terme d'ordre un s'annule à cause de la condition de stationnarité. Le terme d'ordre deux fournit un Hamiltonien quadratique en $\delta\vec{\Phi}$, et l'intégrale sur ce champ donne donc un déterminant, qui va induire une première correction à notre calcul en puissance de $1/d$. Ce calcul est rendu un peu plus compliqué par l'existence de modes de Goldstone. Lorsqu'on les traite proprement, on trouve que la correction dûe à ce déterminant s'annule, ce qui montre que les corrections n'apparaîtront qu'à l'ordre suivant ($\delta\vec{\Phi}^4$) (cf l'article de Orland, Itzykson, De Dominicis, J. Physique Lett. 46(1985)L353). Donc notre résultat est exact à la limite $d \to \infty$, et les premières corrections au champ moyen n'apparaissent qu'à l'ordre $1/d^2$, ce qui est probablement à l'origine de la bonne précision du résultat obtenu.

## 4.2 Problème 2 : Particule dans un potentiel aléatoire

### 4.2.1 Enoncé

Examen du 1er avril 1996, durée : 3 heures.

**Equation de Schrödinger dans un potentiel aléatoire unidimensionnel**

L'objet de ce problème est d'étudier certaines propriétés statistiques du spectre d'un hamiltonien de Schrödinger unidimensionnel (dans des unités où $\hbar^2/m = 1$) :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + v(x) \tag{4.7}$$

dans lequel $x$ varie dans un intervalle de taille $L$ ($x \in [-L/2, L/2]$) et les valeurs du potentiel $v(x)$ sont des variables aléatoires tirées indépendamment en chaque point $x$ avec la même distribution qui sera précisée plus loin. Désignant par $E_n$ les niveaux d'énergie de $\hat{H}$ pour une configuration donnée du potentiel, on s'intéresse en particulier à la *densité d'états moyenne* (par unité de longueur) :

$$\rho(E) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L}\overline{\sum_n \delta(E - E_n)} \tag{4.8}$$

où $\overline{(...)}$ désigne (dans toute la suite) une moyenne sur les configurations du potentiel $v(x)$.

**1/.** On définit la fonction (pour une configuration $v(x)$ donnée) :

$$\mathcal{G}(x, y; \omega) =< x|(\omega - \hat{H})^{-1}|y > \tag{4.9}$$

où $\omega$ désigne un nombre *complexe* quelconque et $(\omega - \hat{H})^{-1}$ désigne l'inverse de l'opérateur $\omega - \hat{H}$.

a) La fonction $\mathcal{G}(x, y; \omega)$ dépend-elle de $x$ et $y$ séparément, ou seulement de la différence $x - y$ ? Et $\overline{\mathcal{G}(x, y; \omega)}$ ?

b) Exprimer $\mathcal{G}(x, y; \omega)$ en termes des énergies propres $E_n$ et des fonctions propres $\phi_n(x)$ de $\hat{H}$.

c) On définit :

$$G(\omega) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} \overline{\mathcal{G}(x, x; \omega)} dx \tag{4.10}$$

Etablir, pour $E$ réel, la relation :

$$\lim_{\epsilon\to 0^+} Im\left(G(E + i\epsilon)\right) = -\pi\rho(E) \tag{4.11}$$

**2.** On étudie tout d'abord le cas où il n'y a pas de potentiel aléatoire : $v(x) = 0$. Quels sont les vecteurs propres et les valeurs propres de $\hat{H}$ ? (On prendra par exemple des conditions aux limites périodiques). Donner l'expression de $\mathcal{G}(x, y, \omega)$ sous forme de série de Fourier. Calculer la densité d'états, $\rho_0(E)$, à la limite d'un grand système ($L \to \infty$).

**3.** On introduit un champ scalaire réel $\phi(x)$, et on définit la fonction de partition :

$$Z = \int [d\phi] \exp\left(i \int dx \{-\frac{1}{2}(\frac{\partial\phi}{\partial x})^2 + \omega\phi(x)^2 - v(x)\phi(x)^2\}\right) \tag{4.12}$$

Montrer que :

$$G(\omega) = -\lim_{L\to\infty} \frac{2}{L}\frac{\partial}{\partial\omega}\overline{\ln Z} \tag{4.13}$$

On admettra que les formules d'intégration gaussienne données dans le cours s'étendent sans difficultés au cas d'une matrice complexe, et on ne discutera pas les problèmes éventuels de convergence de l'intégrale fonctionnelle.

**4.** Le calcul de l'expression précédente est difficile, car on doit moyenner sur les configurations de $v(x)$ le *logarithme* de la fonction de partition $Z$. On va donc faire usage de la formule suivante :

$$\ln Z = \lim_{n\to 0} \frac{Z^n - 1}{n} \tag{4.14}$$

On considère d'abord le cas où $n$ est un entier positif (ou nul). Exprimer $Z^n$ comme la fonction de partition d'un champ gaussien *à n composantes* : $\vec{\phi} = (\phi_1(x), ..., \phi_n(x))$.

**5.** On considère dans cette question le cas où le potentiel $v(x)$ est tiré en chaque site selon une distribution Lorentzienne de largeur $\Gamma$, $L_\Gamma(v) = \frac{\Gamma}{\pi(\Gamma^2+v^2)}$. On admettra qu'alors la distribution $P[\{v(x)\}]$ qui en résulte à la limite continue est telle que, pour toute fonction $f(x)$ :

$$\overline{\exp\left(i \int f(x)v(x)dx\right)} = \exp\left(-\Gamma \int |f(x)|dx\right) \tag{4.15}$$

a) Pour $n$ entier, montrer que $\overline{Z^n}$ s'écrit comme une fonction de partition pour le champ $\vec{\phi}$ :

$$\overline{Z^n} = \int [d\vec{\phi}] \exp\left(-S_{eff}(\vec{\phi})\right) \tag{4.16}$$

et donner l'expression de l'action effective $S_{eff}$. Calculer $\overline{Z^n}$, et montrer que l'expression obtenue a un prolongement naturel à $n$ réel quelconque.

b) Etablir finalement l'expression de la densité d'états en montrant que :

$$\rho(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0(E') \frac{\Gamma}{\pi((E-E')^2+\Gamma^2)} dE' \tag{4.17}$$

où $\rho_0(E)$ est la densité d'états en l'absence de potentiel. (On pourra soit utiliser (4.13), soit remarquer que $G(\omega)$ est reliée à $\lim_{n\to 0} < \vec{\phi(x)}^2 > /n$, où la moyenne est calculée avec l'action effective $S_{eff}$).

c) Montrer que ce résultat reste vrai si on substitue dans le Hamiltonien $-d^2/dx^2$ par un Hamiltonien $\hat{H}_0$ quelconque.

d) On cherche à retrouver le résultat (4.17) dans le cas où $\Gamma$ est petit, par un calcul perturbatif direct. Soit $|\psi>$ un état propre d'énergie $E_0$, supposé non dégénéré, du Hamiltonien $H_0$. On rappelle qu'au premier ordre de la théorie des perturbations en $v$ cette énergie est changée en $E = E_0 + \delta E$, où $\delta E =< \psi|v|\psi >$. Montrer que, si $v_1$ et $v_2$ sont deux variables alátoires Lorentziennes indépendantes, de distributions respectives $L_{\Gamma_1}(v_1)$ et $L_{\Gamma_2}(v_2)$, alors $a_1v_1+a_2v_2$ est une variable Lorentzienne de largeur $|a_1|\Gamma_1+|a_2|\Gamma_2$. En déduire que la variation d'énergie $\delta E$ est une variable aléatoire Lorentzienne. Quelle est sa largeur ? Que trouve-t-on pour la densité d'états dans le cadre de ce calcul perturbatif ?

**6.** On considère maintenant le cas plus réaliste d'un potentiel tiré en chaque site selon une loi Gaussienne, de sorte qu'à la limite continue :

$$P[\{v(x)\}] = \alpha\, e^{-\frac{1}{2g^2}\int v(x)^2 dx} \tag{4.18}$$

où $\alpha$ est une constante de normalisation telle que $\int [dv] P[v(x)] = 1$.

a) Calculer la variance $\overline{v(x)v(y)}$, et établir, pour une fonction $f(x)$ arbitraire, l'expression de :

$$\overline{\exp\left(i\int f(x)v(x)dx\right)} \tag{4.19}$$

b) Montrer que $\overline{Z^n}$ est donné, pour $n$ entier, par l'intégrale fonctionnelle suivante sur le champ $\vec{\phi}$ à $n$ composantes :

$$\overline{Z^n} \equiv Z_{eff}(n,\omega,w) = \int [d\vec{\phi}] \exp\left(-\int dx \left\{\frac{A}{2}(\frac{\partial\vec{\phi}}{\partial x})^2 + \frac{B}{2}\vec{\phi}(x)^2 + \frac{C}{4}(\vec{\phi}(x)^2)^2\right\}\right) \tag{4.20}$$

où $A, B, C$ sont des coefficients dont on établira l'expression en fonction des paramètres du problème : $\omega$ et $g$.

c) On considére tout d'abord la fonction de partition $Z_{eff}$ définie ci-dessus dans le cas (qui ne correspond pas nécessairement au résultat trouvé au b)), où les coefficients

$A, B, C$ sont tous réels, avec $A > 0$ et $C > 0$. Montrer qu'alors on a affaire à un problème de marche alátoire dans un potentiel extérieur qu'on précisera, dans un espace de dimension $n$. Etablir que $Z_{eff}$ se comporte, pour un système de taille $L$ tendant vers l'infini, comme :

$$Z_{eff} = C_n e^{-L\mathcal{E}_0^{(n)}(A,B,C)} \tag{4.21}$$

où $\mathcal{E}_0^{(n)}$ est l'état fondamental (supposé non-dégénéré) d'un opérateur de Schrödinger $\mathcal{H}_{eff}^{(n)}$ dont on donnera l'expression en terme des constantes $A, B, C$, et $C_n$ est indépendante de $L$.

d) On admettra dans la suite que la fonction de partition $Z_{eff}$ pour notre problème est toujours donnée par la formule 4.21, où l'énergie $\mathcal{E}_0^{(n)}(A, B, C)$ est prolongée aux valeurs de $A, B, C$ trouvées à la question 6/b), et à des valeurs de $n$ non entières. Lors de ce prolongement, $\mathcal{E}_0^{(n)}$ devient donc complexe. A la limite qui nous intéresse, $n \to 0$, $\mathcal{E}_0^{(n)}(A, B, C)$ admet un développement pour $n \to 0$ de la forme :

$$\mathcal{E}_0^{(n)}(A, B, C) = n\ e_0(A, B, C) + n^2\ e_1(A, B, C) + ... \tag{4.22}$$

Etablir la relation donnant la densité d'états intégrée, $N(E) \equiv \int_{-\infty}^{E} \rho(E')dE'$ :

$$N(E) = -\frac{2}{\pi} Im\, e_0(A, B, C) \tag{4.23}$$

où $A, B, C$ sont les coefficients calculés en b), estimés en $\omega = E + i0^+$.

e) Pour valider cette approche, on considère tout d'abord le cas sans potentiel (g=0). Calculer l'énergie de l'état fondamental $\mathcal{E}_0^{(n)}$ dans le cas où $A$ et $B$ sont des réels positifs, et $C = 0$. Quelle densité d'états intégrée, $N(E)$, déduit-on de (4.23) ? (On choisira le prolongement tel que $N(E) \geq 0$).

On retourne maintenant au problème avec $g \neq 0$, et on cherche tout d'abord à calculer le terme dominant à petit $n$ de l'énergie de l'état fondamental $\mathcal{E}_0^{(n)}$ pour $A, B, C$ réels, $A$ et $C$ positifs. On considère la fonction d'onde $\Psi_0^{(n)}(\vec{\phi})$ de l'état fondamental. On admettra que celle-ci ne dépend que de la norme $\phi$ de $\vec{\phi}$, et que son prolongement à des valeurs de $n$ réelles admet un développement pour $n \to 0$ de la forme :

$$\Psi_0^{(n)}(\vec{\phi}) = \psi_0(q) + n\psi_1(q) + ... \tag{4.24}$$

où on utilise la variable $q = \phi^2/2$.

f) En considérant le développement à petit $n$ de l'équation de Schrödinger, écrire les équations satisfaites par $\psi_0$ et $\psi_1$. (On rappelle l'expression de la partie radiale du Laplacien à n dimensions : $\Delta_\phi = \frac{d^2}{d\phi^2} + \frac{n-1}{\phi}\frac{d}{d\phi}$.) Déduire de l'équation pour $\psi_1$ une relation entre $e_0$ et la dérivée logarithmique de $\psi_0$ à l'origine.

g) Montrer qu'un changement de variable linéaire approprié, $z = u + vq$, où $u$ et $v$ sont deux constantes dont on donnera l'expression en termes de $A, B, C$, ramène l'équation pour $\psi_0$ à l'équation d'Airy :

$$\frac{d^2\psi_0}{dz^2} - z\psi_0 = 0 \; . \tag{4.25}$$

h) Pourquoi doit on considérer la solution de l'équation d'Airy (4.25) qui décroît à l'infini ? On note $Ai(z)$ cette fonction (que l'on ne cherchera pas à exprimer). Quelle est l'expression de $e_0(A, B, C)$ en termes de $Ai$ et sa dérivée ?

i) Le résultat du prolongement analytique de ce résultat aux valeurs complexes de $A, B, C$ trouvées en 6b), que vous ne chercherez pas à faire, conduit à la densité d'états :

$$\frac{1}{N(E)} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} g^{-2/3} \int_0^{+\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} e^{-u^3/24 - \frac{E}{g^{4/3}} u} \tag{4.26}$$

Etudier le comportement de $N(E)$ pour $E \to -\infty$ et $E \to +\infty$. Tracer qualitativement l'allure de $N(E)$ et de la densité d'états libres intégrée, $N_0(E) = \int_{-\infty}^{E} \rho_0(E')dE'$, et commenter. (On donne l'intégrale $\int_0^\infty dx \;\exp(-x)/\sqrt{x} = \sqrt{\pi}$.)

### 4.2.2 Corrigé

**1.** a) Pour une configuration $v(x)$ donnée, le hamiltonien $\hat{H}$ n'est pas invariant par translation, et $\mathcal{G}(x, y; \omega)$ dépend donc de $x$ et $y$ séparément. La moyenne sur $v$ rétablit l'invariance par translation (pour une distribution $P[v]$ respectant cette invariance), de sorte que $\overline{\mathcal{G}(x, y; \omega)}$ ne dépend que de la différence $x - y$.

b) En insérant l'ensemble complet des états propres de $\hat{H}$, on obtient :

$$\mathcal{G}(x, y; \omega) = \sum_n \frac{\phi_n(x)\phi_n(y)^*}{\omega - E_n} \tag{4.27}$$

c) La normalisation des fonctions d'onde conduit à :

$$G(\omega) = \lim_{L\to\infty} \overline{\sum_n \frac{1}{\omega - E_n}} \tag{4.28}$$

En utilisant la relation, valable au sens des distributions :

$$\mathrm{I}m \lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} = -\pi\delta(E - E_n) \tag{4.29}$$

et la définition de la densité d'états, on obtient la relation demandée.

**2.** Les valeurs propres sont de la forme $E_k = k^2/2$, et les fonctions propres associées sont des ondes planes : $\phi_k(x) = e^{ikx}/\sqrt{L}$, où le vecteur d'onde $k$ doit satisfaire : $e^{ikL} = 1$

(pour des conditions aux limites périodiques $\phi_k(x) = \phi_k(x+L)$), de sorte que $k = 2n\pi/L$, avec $n$ entier de signe quelconque. Ainsi, à la limite $L$ grand, la sommation $\frac{1}{L}\sum_k f(k)$ devient-elle $\int_{-\infty}^{+\infty} f(k)\frac{dk}{2\pi}$. On en déduit :

$$\mathcal{G}(x,y;\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ik(x-y)}}{\omega - k^2/2} \tag{4.30}$$

La densité d'états est donc :

$$\rho_0(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\delta(E - \frac{k^2}{2}) = 2.\frac{1}{2\pi\sqrt{2E}}\theta(E) = \frac{1}{\pi\sqrt{2E}}\theta(E) \tag{4.31}$$

avec $\theta(E) = 1$ si $E > 0$, $= 0$ si $E < 0$). (Le facteur 2 provient des deux racines $k(E) = \pm\sqrt{E}$).

**3.** Désignant par $S = \int dx\{-\frac{1}{2}(\frac{\partial\phi}{\partial x})^2 + \omega\phi(x)^2 - v(x)\phi(x)^2\}$ l'action du champ scalaire $\phi$, on observe en intégrant par parties que $S = \int dx\phi(x)[\omega - \hat{H}]\phi(x)$. Les règles d'intégration gaussienne du cours établissent que :

$$< x|(\omega - \hat{H})^{-1}|y >= -2i\frac{\int d[\phi]\phi(x)\phi(y)e^{iS}}{\int d[\phi]e^{iS}} \equiv -2i < \phi(x)\phi(y) >_S \tag{4.32}$$

De plus :

$$\frac{\partial}{\partial\omega}\ln Z = i\int dx < \phi(x)\phi(x) >_S \tag{4.33}$$

On a donc :

$$\mathcal{G}(x,x;\omega) = -2\frac{\partial}{\partial\omega}\ln Z \tag{4.34}$$

et donc :

$$G(\omega) \equiv \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}\overline{\mathcal{G}(x,x;\omega)}dx = -\lim_{L\to\infty}\frac{2}{L}\frac{\partial}{\partial\omega}\overline{\ln Z} \tag{4.35}$$

**4.** Introduisant $n$ champs scalaires $\phi_1(x), ..., \phi_n(x)$, nous avons :

$$Z^n = \int[d\phi_1]\cdots\int[d\phi_n]e^{iS[\phi_1]+\cdots+iS[\phi_n]} \tag{4.36}$$

ce que l'on peut évidemment réecrire : $Z^n = \int[d\vec{\phi}]e^{iS_{eff}[\vec{\phi}]}$, avec :

$$S_{eff}[\vec{\phi}] = \int dx\{-\frac{1}{2}(\frac{\partial\vec{\phi}}{\partial x})^2 + \omega\vec{\phi}(x)^2 - v(x)\vec{\phi}(x)^2\} \tag{4.37}$$

**5.** a) Prenant la moyenne sur le désordre Lorentzien de l'expression de $Z^n$ ci-dessus, on obtient :

$$\overline{Z^n} = \int[d\vec{\phi}]e^{i\int dx\vec{\phi}(x).\left(\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\omega+i\Gamma\right).\vec{\phi}(x)} \tag{4.38}$$

Cette intégrale fonctionnelle est encore gaussienne, de sorte que :

$$\overline{Z^n} = C\left(Det[\omega + i\Gamma + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}]\right)^{-n/2} \tag{4.39}$$

uù $C$ est une constante de normalisation indépendante de $\omega$ et donc sans importance pour la suite.

b) $D$ désignant le déterminant d'opérateur apparaissant dans l'expression ci-dessus, on a : $\overline{Z^n} = e^{-\frac{n}{2}\ln D}$ dont le prolongemet à $n$ réel est immédiat. Nous obtenons donc :

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n\to 0} \frac{\overline{Z^n - 1}}{n} = -\frac{1}{2}\ln D \tag{4.40}$$

En utilisant le fait que la dérivée du déterminant d'une matrice par rapport à l'un de ses éléments satisfait : $\frac{\partial}{\partial M_{ij}} ln(detM) = (M^{-1})_{ij}$, on obtient :

$$\begin{aligned} G(\omega) &= -\lim_{L\to\infty} \frac{2}{L}\frac{\partial}{\partial\omega}\overline{\ln Z} = \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\frac{\partial}{\partial\omega}\ln D \\ &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int dx < x|[\omega + i\Gamma + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}]^{-1}|x > \end{aligned} \tag{4.41}$$

N.B : On peut aussi simplement remarquer que $G(\omega)$ est donné par le corrélateur $-2i\lim_{n\to 0}\frac{1}{n} < \phi(\vec{x}).\phi(\vec{x}) >$ où la moyenne est prise avec le poids gaussien associé à $S_{eff}$.

Passant en transformée de Fourier, on a donc :

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{1}{\omega + i\Gamma - k^2/2} = \int dE' \frac{\rho_0(E')}{\omega + i\Gamma - E'} \tag{4.42}$$

En posant $\omega = E + i0^+$ dans cette formule, avec $E$ réel, et en prenant la partie imaginaire, on obtient le résultat demandé :

$$\rho(E) = \int_{-\infty}^{+\infty}\rho_0(E')\frac{\Gamma}{\pi((E-E')^2 + \Gamma^2)}dE' \tag{4.43}$$

c) Ce résultat est valable quelle que soit la forme de $\hat{H}_0$, dès lors que $\rho_0$ désigne la densité d'états associée à $\hat{H}_0$. Les calculs du a) sont en effet inchangés et conduisent toujours à :

$$G(\omega) =< x|[\omega + i\Gamma - \hat{H}_0]^{-1}|x > \tag{4.44}$$

et donc à la formule ci-dessus pour $\rho$.

La simplicité du désordre Lorentzien provient du fait que la théorie des champs reste gaussienne après moyenne.

d) La distribution Lorentzienne est la loi de Levy d'indice $\mu = 1$ étudiée en petites classes. Elle est stable par convolution. De manière explicite, la distribution de $v = a_1 v_1 + a_2 v_2$ est donnée par :

$$P(v) = \int dv_1 L_{\Gamma_1}(v_1) \int dv_2 L_{\Gamma_2}(v_2) \delta(v - a_1 v_1 - a_2 v_2) \tag{4.45}$$

Soit, en introduisant une représentation de la distribution $\delta$ :

$$P(v) = \int \frac{ds}{2\pi} e^{isv} \int dv_1 L_{\Gamma_1}(v_1) e^{-isa_1 v_1} \int dv_2 L_{\Gamma_2}(v_2) e^{-isa_2 v_2} \tag{4.46}$$

La transformée de Fourier de $L_\Gamma(v)$ est donnée par l'énoncé :

$$\int dv L_\Gamma(v) e^{-isav} = e^{-\Gamma|a||s|} \tag{4.47}$$

et donc :

$$P(v) = \int \frac{ds}{2\pi} e^{isv} e^{-(|a_1|\Gamma_1 + |a_2|\Gamma_2)|s|} \tag{4.48}$$

Il s'agit de la représentation de Fourier de $L_{|a_1|\Gamma_1 + |a_2|\Gamma_2}(v)$.

e) Pour chaque niveau $E_n, \phi_n(x)$ de $\hat{H}_0$, on a, au premier ordre de la théorie de perturbation :

$$\delta E_n = \int |\phi_n(x)|^2 v(x) dx \tag{4.49}$$

$\delta E_n$ est donc une combinaison linéaire de variables aléatoires Lorentziennes décorrélées et de même largeur. Sa distribution est donc une Lorentzienne de largeur : $\Gamma \int |\phi_n(x)|^2 dx = \Gamma$ (par normalisation des fonctions d'onde). La densité d'états obtenue par ce calcul perturbatif coincide donc précisément avec le résultat exact trouvé plus haut.

**6.** a) Le calcul des valeurs moyennes avec le poids gaussien $P[v]$ conduit sans difficulté à $\overline{v(x)v(y)} = g^2 \delta(x-y)$ et :

$$\overline{\exp\left(i \int f(x) v(x) dx\right)} = e^{-\frac{g^2}{2} \int dx f(x)^2} \tag{4.50}$$

b) En prenant la moyenne sur le désordre de la représentation de $Z^n$ trouvée au $4^o$), on obtient l'expression (13) avec :

$$A = i \ , \ B = -2i\omega \ , \ C = 2g^2 \tag{4.51}$$

c) Si l'on considère que la coordonnée $x$ est une variable "temporelle", et que l'on pose $\vec{X} = \sqrt{A}\vec{\phi}$ (pour $A$ réel positif), on voit que l'intégrale fonctionnelle sur $\vec{\phi}$ est identique à celle d'une marche aléatoire dans un espace de dimension $n$, avec le potentiel

$V(\vec{\phi}) = B\vec{\phi}^2/2 + C(\vec{\phi}^2)^2/4$. La fonction de partition $Z_{eff}$, qui dépend de la taille $L$ du système, obéit donc à l'équation de Schrödinger (Eq.(2.15) du cours) :

$$-\frac{\partial Z_{eff}}{\partial L} = \mathcal{H}^{(n)}_{eff} Z_{eff} \tag{4.52}$$

où $\mathcal{H}^{(n)}_{eff}$ est l'opérateur :

$$\mathcal{H}^{(n)}_{eff} = -\frac{1}{2A}\Delta_{\vec{\phi}} + \frac{B}{2}\vec{\phi}^2 + \frac{C}{4}(\vec{\phi}^2)^2 \tag{4.53}$$

Le comportement de $Z_{eff}$ pour $L$ grand résulte immédiatement de sa décomposition sur les états propres de cet opérateur (Eq.(2.18) du cours).

d) Insérant ce comportement asymptotique dans l'expression établie plus haut pour $G(\omega)$, on obtient :

$$G(\omega) = -\lim_{L\to\infty} \frac{2}{L}\frac{\partial}{\partial\omega} \lim_{n\to 0} \frac{e^{-nLe_0} - 1}{n} = 2\frac{\partial e_0}{\partial \omega} \tag{4.54}$$

(Attention : l'ordre des limites est crucial). Ainsi, la densité d'états est donnée par :

$$\rho(E) \equiv \frac{-1}{\pi}\mathrm{Im}G(E+i0^+) = \frac{-2}{\pi}\frac{\partial \mathrm{Im} e_0}{\partial\omega}|_{\omega=E+i0^+} \tag{4.55}$$

soit, en intégrant depuis $E = -\infty$ :

$$N(E) \equiv \int_{-\infty}^{E} \rho(E')dE' = \frac{-2}{\pi}\mathrm{Im} e_0 \tag{4.56}$$

e) Lorsque $C = 0$ le hamiltonien de Schrödinger $-\frac{1}{2A}\Delta_{\vec{\phi}} + \frac{B}{2}\vec{\phi}^2$ est celui d'un oscillateur harmonique à $n$ dimensions de masse $M$ et de pulsation $\Omega$, avec l'identification $A = M/\hbar^2$ et $B = M\Omega^2$ (qui suppose $A$ et $B$ réels positifs). L'énergie du fondamental est $n$ fois l'énergie de point zéro d'un oscillateur unidimensionnel : $\mathcal{E}_0 = n\hbar\Omega/2 = \frac{n}{2}\sqrt{\frac{B}{A}}$ de sorte que $e_0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{B}{A}}$.

La densité d'états intégrée est obtenue en substituant les valeurs complexes : $A = i, B = -2i(E+i0^+)$, soit :

$$N(E) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\sqrt{\frac{B}{A}} = -\frac{\sqrt{2}}{\pi}\mathrm{Im}\sqrt{-E-i0^+} \tag{4.57}$$

qui redonne bien le résultat de la question $2^o$) :

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\sqrt{E}\theta(E) \tag{4.58}$$

en choisissant la détermination de la racine qui conduit à $N(E) \geq 0$.

f) Le changement de variable $q = \vec{\phi}^2/2$ est tel que :

$$\Delta_\phi \equiv \frac{d^2}{d\phi^2} + \frac{n-1}{\phi}\frac{d}{d\phi} = 2q\frac{d^2}{dq^2} + n\frac{d}{dq} \tag{4.59}$$

En substituant le développement proposé dans l'équation de Schrödinger, et en regroupant les termes d'ordre 0 et d'ordre 1 en $n$, on obtient sans difficulté :

$$\left(-\frac{1}{A}\frac{d^2}{dq^2} + B + Cq\right)\psi_0 = 0 \tag{4.60}$$

$$q\left(-\frac{1}{A}\frac{d^2}{dq^2} + B + Cq\right)\psi_1 - \frac{1}{2A}\frac{d\psi_0}{dq} = e_0\psi_0 \tag{4.61}$$

Prenant la limite $q \to 0^+$ de la seconde équation, on obtient la relation demandée :

$$e_0 = -\frac{1}{2A}\frac{d\ln\psi_0}{dq}|_{q=0^+} \tag{4.62}$$

g) Le changement de variables $z = u + vq$ est tel que $v\frac{d}{dz} = \frac{d}{dq}$ et $v^2\frac{d^2}{dz^2} = \frac{d^2}{dq^2}$, de sorte que l'équation pour $\psi_0$ s'écrit dans cette variable :

$$\left(-\frac{v^2}{A}\frac{d^2}{dz^2} + B + C\frac{z-u}{v}\right)\psi_0(z) = 0 \tag{4.63}$$

Il faut donc choisir $u$ et $v$ tels que : $B/C = u/v$ et $v^2/A = C/v$, c'est à dire :

$$u = A^{1/3}BC^{-2/3} \;\; , \;\; v = (AC)^{1/3} \tag{4.64}$$

pour ramener cette équation à l'équation d'Airy.

h) On doit choisir la solution qui décroit à l'infini pour pouvoir la normaliser. On a ainsi :

$$\psi_0(q) = Ai(z) = Ai\left(A^{1/3}BC^{-2/3} + (AC)^{1/3}q\right) \tag{4.65}$$

En utilisant la relation établie à la question f) :

$$e_0 \; = \; -\frac{(AC)^{1/3}}{2A}\frac{Ai'(A^{1/3}BC^{-2/3})}{Ai(A^{1/3}BC^{-2/3})} \tag{4.66}$$

i) Pour $E \to +\infty$, faisons le changement de variable $x = Eu/g^{4/3}$ dans l'intégrale donnant $N(E)$ :

$$\frac{1}{N(E)} = \sqrt{\frac{\pi}{2E}}\int_0^{+\infty}\frac{dx}{\sqrt{x}}e^{-\frac{g^4}{24E^3}x^3-x} \tag{4.67}$$

Le terme en $1/E^3$ dans l'intégrant est négligeable, de sorte que :

$$\frac{1}{N(E)} \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2E}}\int_0^{+\infty}\frac{dx}{\sqrt{x}}e^{-x} = \sqrt{\frac{\pi}{2E}}\int_0^{+\infty}dy 2e^{-y^2} = \frac{\pi}{\sqrt{2E}} \tag{4.68}$$

On retrouve donc pour $E \to +\infty$ le comportement $N(E) \simeq \frac{\sqrt{2E}}{\pi}$ de la densité d'états libre. On s'attend à ce résultat puisque pour ces valeurs de l'énergie l'effet du potentiel aléatoire (dont la valeur typique est d'ordre $g$) ne se fait plus sentir.

Le cas $E \to -\infty$ est plus subtil. L'intégrale est alors dominée par le col de l'exponentielle, donné par : $u^2/8 + E/g^{4/3} = 0$. Insérant cette valeur dans l'intégrant, on obtient à l'ordre dominant :

$$N(E) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-4\sqrt{2}E^{3/2}/3g} \tag{4.69}$$

La densité d'états est donc très petite dans ce régime. En effet, en l'absence de potentiel, tous les états ont une énergie positive. Les états d'énergie grande et négative sont donc purement dus au petit nombre de configurations dans lesquelles le potentiel reste grand et n'egatif sur une longue région.

## 4.3 Problème 3 : Exposant de Flory des polymères

### 4.3.1 Enoncé

Examen du mercredi 26 mars 1997, durée : 4 heures.

**Exposant de Flory des polymères**

L'objet de ce problème est d'étudier dans le cadre d'une certaine approximation l'exposant $\nu$ caractérisant l'extension typique $R$, par exemple le rayon de gyration, d'un polymère de longueur $L$, cet exposant $\nu$ étant défini comme à l'habitude par $R \sim L^\nu$. Le problème contient essentiellement deux parties, plus un complément optionnel. La première traite de quelques propriétés de la chaîne idéale Brownienne. La deuxième contient l'analyse du polymère en interaction proprement dit, conduisant au calcul approché de $\nu$.

La deuxième partie utilise certains résultats de la première. Elle peut néanmoins être abordée indépendament de celle-ci, à condition d'admettre les résultats des questions (I-4) et (I-5).

La partie trois contient deux questions complémentaires à ne traiter, éventuellement, qu'après avoir répondu à toutes les précédentes.

On donne la somme de la série suivante : $\sum_{p=1}^{\infty} 1/p^2 = \pi^2/6$ .

**I- Polymère idéal**

On considère un polymère fermé de longueur $L$ en dimension $d$, décrit par une courbe Brownienne $\vec{r}(s)$ ($\vec{r}(s)$ est donc un vecteur à $d$ composantes) périodique en $s$ de période

$L$, dont l'énergie est donnée par :

$$\frac{E}{k_B T} = \frac{c}{2} \int_0^L ds \left( \frac{\partial \vec{r}}{\partial s} \right)^2 \ . \tag{4.70}$$

Cette chaîne est supposée à l'équilibre thermique à la température $T$, et son centre de masse est fixé à l'origine :

$$\int_0^L ds \ \vec{r}(s) = \vec{0} \ . \tag{4.71}$$

On introduit les modes de Fourier :

$$\vec{\rho_p} = \frac{1}{L} \int_0^L ds \ \vec{r}(s) \exp \left( ip \frac{2\pi}{L} s \right) \quad , \quad p \in Z \tag{4.72}$$

de sorte que :

$$\vec{r}(s) = \sum_{p \in Z^*} \vec{\rho_p} \exp \left( -ip \frac{2\pi}{L} s \right) \ . \tag{4.73}$$

**1.** On introduit le carré du rayon de gyration, $Q$, défini par :

$$Q = \frac{1}{L} \int_0^L ds \ \vec{r}(s)^2 \ . \tag{4.74}$$

Indiquer sans calcul quel comportement vous attendez pour la dépendance de $Q$ en fonction de $L$ dans la limite des chaînes de grande longueur.

**2.** Quelle est la distribution de probabilité de l'ensemble des variables $\vec{\rho_p}$ ? Calculer, pour un $p$ donné, la valeur moyenne $< |\vec{\rho_p}^2| >$ (dans tout le problème, les crochets $< . >$ désignent la valeur moyenne thermique prise avec la loi de probabilité de Boltzmann). En déduire $< \vec{r}(s)^2 >$ et $< Q >$.

**3.** On cherche à calculer la distribution de probabilité $P(Q)$ du carré du rayon de gyration, introduit en **1.** On introduit la transformée de Laplace :

$$g(\lambda) = \int_0^\infty dQ \ P(Q) \ \exp \left( -\frac{\lambda}{2L} Q \right) \tag{4.75}$$

(P(Q) est supposée bien normalisée de sorte que $g(0) = 1$). Montrer que $g(\lambda)$ s'exprime comme le rapport entre deux déterminants, et vaut finalement :

$$g(\lambda) = \exp \left( -d \sum_{p=1}^{\infty} Log \left( 1 + \frac{\lambda}{4\pi^2 c p^2} \right) \right) \ . \tag{4.76}$$

**4.** On s'intéresse au comportement de $P(Q)$ à la limite où $Q/L$ est grand devant $1/c$. Montrer que $g(\lambda)$ est finie pour $\lambda$ réel et supérieur à un certain $\lambda_c$. Quel est le comportement de $g(\lambda)$ pour $\lambda - \lambda_c$ petit positif ? En déduire que $P(Q)$ se comporte dans la limite considérée comme

$$P(Q) \sim A \left(\frac{Q}{L}\right)^{d-1} \exp\left(-2\pi^2 c \frac{Q}{L}\right) \ , \tag{4.77}$$

où $A$ est une constante indépendante de $Q$ qu'on ne cherchera pas à calculer.

**5.** On contraint maintenant le polymère à avoir un rayon de gyration carré, $\frac{1}{L}\int_0^L ds\ \vec{r}(s)^2$, fixé à une valeur $Q = Lq$. Pour ce faire on introduit un ensemble canonique généralisé avec un paramètre conjugué à cette contrainte, paramètre qu'on notera $\mu$, de telle sorte que la fonction de partition devient :

$$\Xi = \int d[\vec{r}] \exp\left(-\frac{c}{2}\int_0^L ds \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial s}\right)^2 - \frac{\mu}{L}\int_0^L ds\ \vec{r}(s)^2\right) \ , \tag{4.78}$$

où $\mu$ est choisi de façon à assurer la contrainte en moyenne :

$$< \frac{1}{L}\int_0^L ds\ \vec{r}(s)^2 >= qL \ . \tag{4.79}$$

Montrer que $\mu$ est relié à q par

$$q = \sum_{p \in Z} \frac{d}{4\pi^2 c p^2 + 2\mu L} \ . \tag{4.80}$$

Pour un point $s$ du polymère fixé, montrer que la distribution de probabilité de $\vec{r}(s)$ (après sommation sur les positions de tous les autres points) est :

$$P_q(\vec{r}(s)) = \left(\frac{d}{2\pi q L}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{\vec{r}(s)^2 d}{2qL}\right) \tag{4.81}$$

Montrer que la densité de probabilité pour trouver un point du polymère en $\vec{r}$, définie par $n_q(\vec{r}) \equiv< \int_0^L ds\ \delta(\vec{r}(s) - \vec{r}) >$, vaut :

$$n_q(\vec{r}) = L \left(\frac{d}{2\pi q L}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2 d}{2qL}\right) \tag{4.82}$$

**II- Polymère en interaction**

On considère désormais un modèle plus réaliste de polymère, caractérisé par une énergie :

$$\frac{E}{k_B T} = \frac{c}{2}\int_0^L ds \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial s}\right)^2 + \frac{1}{2}\int_0^L ds \int_0^L ds' V(\vec{r}(s), \vec{r}(s')) \ , \tag{4.83}$$

où l'on a rajouté à l'énergie élastique un terme d'interaction répulsive à deux corps caractérisé par un potentiel $V(\vec{r}, \vec{r}')$ que nous spécifierons plus loin. Le centre de masse est toujours fixé à l'origine.

**1.** Montrer que la fonction de partition de ce problème peut se mettre sous la forme :

$$\Xi = \int d[\phi]\ \Xi_\phi\ \exp\left(-\frac{1}{2}\int d\vec{r}\int d\vec{r}'\phi(\vec{r})V^{-1}(\vec{r},\vec{r}')\phi(\vec{r}')\right)\ , \qquad (4.84)$$

où l'on a introduit la matrice $V^{-1}(\vec{r},\vec{r}')$ qui est l'inverse de $V(\vec{r},\vec{r}')$, et $\Xi_\phi$ est la fonction de partition d'un polymère idéal en présence d'un potentiel extérieur $i\phi(\vec{r})$ :

$$\Xi_\phi = \int d[\vec{r}]\delta\left(\int_0^L ds\ \vec{r}(s)\right)\exp\left(-\frac{c}{2}\int_0^L ds\left(\frac{\partial\vec{r}}{\partial s}\right)^2 - i\int_0^L ds\ \phi(\vec{r}(s))\right)\ . \qquad (4.85)$$

**2.** Pour le calcul de $\Xi_\phi$, on introduit tout d'abord, comme dans la première partie, une contrainte fixant le rayon de gyration carré, sous la forme :

$$\Xi_\phi = \int_0^\infty dq\ Z_\phi(q) \qquad (4.86)$$

avec :

$$\begin{aligned} Z_\phi(q) &= c^t\int d[\vec{r}]\ \delta\left(\int_0^L ds\ \vec{r}(s)\right)\delta\left(q-\frac{1}{L^2}\int_0^L ds\ \vec{r}(s)^2\right) \\ &\quad \exp\left(-\frac{c}{2}\int_0^L ds\left(\frac{\partial\vec{r}}{\partial s}\right)^2 - i\int_0^L ds\ \phi(\vec{r}(s))\right)\ . \end{aligned} \qquad (4.87)$$

Montrer que $Z_\phi(q)$ peut s'écrire sous la forme :

$$Z_\phi(q) = Z_0(q) < \exp\left(-i\int_0^L ds\ \phi(\vec{r}(s))\right) >_q \qquad (4.88)$$

où la moyenne $< . >_q$ est prise avec la mesure de probabilité du polymère idéal dont la rayon de gyration carré est fixé égal à $qL$ (appelé désormais polymère idéal contraint), et $Z_0(q)$ est la fonction de partition de ce polymère idéal contraint, définie par l'expression (4.87) avec $\phi = 0$.

**3.** On fait maintenant l'approximation consistant à remplacer $Z_\phi(q)$ par l'expression approchée :

$$Z_\phi(q) \sim Z_0(q)\exp\left(-i\int_0^L ds < \phi(\vec{r}(s)) >_q\right) = Z_0(q)\exp\left(-i\int d\vec{r}\ n_q(\vec{r})\phi(\vec{r})\right) \qquad (4.89)$$

où $n_q(\vec{r})$ est la densité de probabilité de présence d'un point en $\vec{r}$ pour le polymère contraint. Montrer que dans le cadre de cette approximation la fonction de partition du polymère en interaction s'écrit :

$$\Xi = C^{te}\int_0^\infty dq\ P(qL)\ \exp\left(-\frac{1}{2}\int d\vec{r}\int d\vec{r}' n_q(\vec{r})n_q(\vec{r}')V(\vec{r},\vec{r}')\right) \qquad (4.90)$$

où $P(Q = qL)$ est la densité de probabilité pour le carré du rayon de gyration du polymère idéal calculée en (4.77). On admettra dans la suite que la probabilité de présence $n_q(\vec{r})$, définie avec une contrainte stricte $q = \frac{1}{L^2}\int_0^L ds\ \vec{r}(s)^2$, est bien égale à celle calculée en (4.82) avec une contrainte imposée en moyenne dans un ensemble canonique généralisé.

**4.** On considère le cas où $V(\vec{r}, \vec{r}') = v\ \delta(\vec{r}-\vec{r}')$. Pour une longue chaîne, on suppose que la région dominante de l'intégrale sur q donnant $\Xi$ dans (4.90) est la région des grandes valeurs de $q$. Montrer que dans ce régime, l'intégrand de (4.90) est donné par

$$\exp\Big((d-1)Log(q) - 2\pi^2 cq - vBL^{2-d/2}q^{-d/2}\Big)\ . \tag{4.91}$$

où $B$ est une constante ne dépendant que de la dimension $d$. On calcule l'intégrale en $q$ par la méthode du col. En quelles dimensions ce calcul par la méthode du col est-il justifié ? Quelle dépendance de $q$ en fonction de $L$ trouve-t-on à $L$ grand ? Que vaut l'exposant $\nu$ des polymères dans le cadre de cette approximation ? Comparer aux valeurs connues.

**III- Questions complémentaires** (à ne traiter, éventuellement, qu'après avoir répondu à toutes les précédentes)

**1.** Quel est le comportement à $Q/L$ petit de la loi de probabilité $P(Q)$ du polymère idéal étudiée dans la première partie ?

**2.** Comment pourrait on tenter d'améliorer le calcul approché de $\nu$ dans la deuxième partie ?

## 4.3.2 Corrigé

**I- Polymère idéal**

1) On attend $< \vec{r}(s)^2 >\sim L$ et donc $Q \sim L$.

2) En écrivant l'énergie en terme des modes de Fourier, le poids de Boltzmann s'exprime comme

$$P[\vec{\rho_p}] = c^t e^{-\frac{E}{k_BT}} = c^t \exp\left(-\frac{c}{2}\frac{4\pi^2}{L}\sum_p p^2|\vec{\rho_p}^2|\right) \tag{4.92}$$

Introduisons les parties réelle et imaginaire de $\vec{\rho_p}$ :$\vec{\rho_p} = \vec{a_p}+i\vec{b_p}$, de sorte que $\rho_{-p}^{\to} = \vec{a_p}-i\vec{b_p}$. La fonction de partition s'écrit :

$$Z = c^t \int \prod_{p=1}^{\infty} d\vec{a_p}d\vec{b_p} \exp\left(-\frac{c}{2}\frac{4\pi^2}{L}2\sum_{p=1}^{\infty} p^2(\vec{a_p}^2 + \vec{b_p}^2)\right) \tag{4.93}$$

On en déduit :

$$< |\vec{\rho_p}^2| >= \frac{Ld}{4\pi^2 cp^2} \tag{4.94}$$

et donc

$$< Q >=< \vec{r}(s)^2 >= \sum_{p\in Z} < |\vec{\rho_p}^2| >= \frac{Ld}{12c} \tag{4.95}$$

3) Comme $Q = \sum_{p\in Z} |\vec{\rho_p}^2|$, il vient, en notant simplement $\prod d\vec{\rho_p} = \prod_{p=1}^{\infty} d\vec{a_p}d\vec{b_p}$ :

$$g(\lambda) = \frac{\int \prod d\vec{\rho_p} \exp\left(-\frac{1}{2L}\sum_p |\vec{\rho_p}^2| \left[4\pi^2cp^2 + \lambda\right]\right)}{\int \prod d\vec{\rho_p} \exp\left(-\frac{1}{2L}\sum_p |\vec{\rho_p}^2| \left[4\pi^2cp^2\right]\right)} \tag{4.96}$$

C'est le rapport de deux intégrales gaussiennes, chacune donnant un déterminant à la puissance $-1/2$. Ceux ci se calculent aisément car les intégrales sur les $\vec{a_p}$ et $\vec{b_p}$ sont des intégrales gaussiennes découplées, et on trouve :

$$g(\lambda) = \prod_{p=1}^{\infty} \left(\frac{4\pi^2cp^2}{4\pi^2cp^2 + \lambda}\right)^d = \exp\left(-d\sum_{p=1}^{\infty} Log\left(1 + \frac{\lambda}{4\pi^2cp^2}\right)\right) \ . \tag{4.97}$$

4) $g(\lambda)$ converge pour $\lambda > \lambda_c = -4\pi^2 c$. Pour $\lambda = \lambda_c + \epsilon$, avec $\epsilon$ petit, on a

$$g(\lambda) = \exp\left(-dLog\frac{\epsilon}{4\pi^2c} + O(\epsilon)\right) \tag{4.98}$$

qui se comporte donc comme $\epsilon^{-d}$. Clairement la fonction $P(Q)$ se comporte pour $Q/L$ grand comme

$$P(Q) \sim c^t \left(\frac{Q}{L}\right)^x \exp\left(-2\pi^2c\frac{Q}{L}\right) \tag{4.99}$$

et le calcul de la transformée de Laplace d'une telle fonction montre que $x = d - 1$.

5) La fonction de partition avec contrainte s'écrit :

$$\Xi = \int \prod d\vec{\rho_p} \exp\left(-\frac{c}{2}\frac{4\pi^2}{L}\sum_{p\in Z} p^2|\vec{\rho_p}^2| - \mu\sum_{p\in Z} |\vec{\rho_p}^2|\right) \tag{4.100}$$

et on en déduit :

$$q = \sum_{p\in Z} \frac{d}{4\pi^2cp^2 + 2\mu L} \ . \tag{4.101}$$

Pour un $s$ fixé, $\vec{r}(s)$ est une variable gaussienne de moyenne nulle, et $< \vec{r}(s)^2 >= qL$. Donc :

$$P_q(\vec{r}(s)) = \left(\frac{d}{2\pi qL}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{\vec{r}(s)^2d}{2qL}\right) \tag{4.102}$$

Comme cette distribution ne dépend pas explicitement de $s$, on a $n_q(\vec{r}) = LP_q(\vec{r})$.

**II- Polymère en interaction**

1) Introduisons le terme de 'source' $h(\vec{r}) = \int_0^L ds\delta(\vec{r}-\vec{r}(s))$. La fonction de partition s'écrit :

$$\Xi = \int d[\vec{r}]\delta\left(\int_0^L ds\ \vec{r}(s)\right)\exp\left(-\frac{c}{2}\int_0^L ds\left(\frac{\partial\vec{r}}{\partial s}\right)^2 - \frac{1}{2}\int d\vec{r}d\vec{r}'V(\vec{r},\vec{r}')h(\vec{r})h(\vec{r}')\right)\ . \tag{4.103}$$

Sous cette forme on peut utiliser les formules habituelles d'intégration gaussienne pour introduire un champ auxiliaire $\phi(\vec{r})$ :

$$\begin{aligned}\Xi = \quad c^t & \int d[\phi]d[\vec{r}]\delta\left(\int_0^L ds\ \vec{r}(s)\right)\\ \exp & \left(-\frac{c}{2}\int_0^L ds\left(\frac{\partial\vec{r}}{\partial s}\right)^2 - \frac{1}{2}\int d\vec{r}d\vec{r}'V^{-1}(\vec{r},\vec{r}')\phi(\vec{r})\phi(\vec{r}') - i\int d\vec{r}\phi(\vec{r})h(\vec{r})\right)\end{aligned} \tag{4.104}$$

ce qui n'est autre que l'expression (16) de l'énoncé.

2)Ecrivons simplement

$$Z_\phi(q) = Z_0(q)\frac{Z_\phi(q)}{Z_0(q)}\ . \tag{4.105}$$

Le rapport $Z_\phi(q)/Z_0(q)$ n'est autre que la valeur moyenne de $\exp\left(-i\int_0^L ds\ \phi(\vec{r}(s))\right)$ avec la mesure de probabilité du polymère idéal contraint.

3)Si on reporte l'expression approchée de $Z_\phi(q)$ proposée dans la formule (20) de l'énoncé dans la formule (15) de l'énoncé donnant la fonction de partition $\Xi$ en termes de $\Xi_\phi$, l'intégrale sur $\phi$ est de nouveau une simple intégrale gaussienne et donne :

$$\Xi = \int_0^\infty dq\ Z_0(q)\exp\left(-\frac{1}{2}\int d\vec{r}\int d\vec{r}'n_q(\vec{r})n_q(\vec{r}')V(\vec{r},\vec{r}')\right)\ . \tag{4.106}$$

Or $Z_0(q)$ est simplement proprtionnelle à la fonction $P(Q = qL)$ introduite en I-3,4, et $n_q(\vec{r})$ a été calculée en I-5.

4) Substituant ces expressions précédentes dans la forme finale de $\Xi$, on trouve, pour le cas où $V(\vec{r},\vec{r}') = v\ \delta(\vec{r}-\vec{r}')$ :

$$\Xi = \int_0^\infty dqP(Q = qL)\ \exp\left(-\frac{1}{2}\int d\vec{r}\ v\ n_q(\vec{r})^2\right) \tag{4.107}$$

Dans la région des grands $q$, l'intégrand est donné par $\exp(S(q))$ avec

$$S(q) = (d-1)Log(q) - 2\pi^2 cq - \frac{v}{2}\int d\vec{r}\ L^2\left(\frac{d}{2\pi qL}\right)^d\exp\left(-\frac{\vec{r}^2 d}{qL}\right) \tag{4.108}$$

Cette dernière intégrale donne :

$$S(q) = (d-1)Log(q) - 2\pi^2 cq - vBL^{2-d/2}q^{-d/2}\ , \tag{4.109}$$

avec $B = (1/2)(d/4\pi)^{d/2}$.

Le col en $q$ est obtenu en $dS/dq = 0$, ce qui donne :

$$\frac{d-1}{q} - 2\pi^2 c + \frac{d}{2} v B L^{2-d/2} q^{-1-d/2} = 0 \tag{4.110}$$

Si on cherche à compenser les deux derniers termes, il vient $q \sim L^{(4-d)/(2+d)}$. Un tel col est bien justifié pour $L$ grand en dimension $d < 4$. En effet : $q$ est grand, S(q) est proportionnel à $L^{(4-d)/(2+d)}$, et le premier terme dans (4.110) est bien négligeable. On trouve donc, en dimension inférieure à 4, $Q \sim L^{6/(2+d)}$, et donc $\nu = \frac{3}{2+d}$, qui est la valeur approchée obtenue par d'autres méthodes par Flory. Cette approximation donne les résultats exacts en dimensions 1,2,et 4, et une valeur $\nu = .6$ proche de la valeur exacte $\nu \sim .588$ en dimension 3.

## 4.4 Problème 4 : Effet du désordre sur les transitions de phase

### 4.4.1 Enoncé

Examen du lundi 16 mars 1998

**Effet du désordre sur les transitions de phase**

*Avertissement : Il n'est pas recommandé d'aborder la partie II avant la partie I. Les parties III et IV peuvent en revanche être abordées indépendament des précédentes -à l'exception de la question III.5-).*

On s'intéresse dans ce problème à la manière dont la transition de phase d'un système magnétique est affectée par la présence d'impuretés. Celles-ci introduisent des hétérogénéités spatiales susceptibles de modifier localement les constantes de couplage du système. On modélise donc souvent ces systèmes en supposant que ces constantes de couplage sont des variables aléatoires tirées selon une certaine loi caractéristique du désordre. Un échantillon donné correspond à un tirage particulier de ces variables aléatoires.

**I. Effet d'un champ aléatoire sur le comportement critique**

On considère un modèle de spins en interaction ferromagnétique en dimension $d$. En l'absence de désordre ("système pur"), le modèle est décrit par un hamiltonien $H$ spatialement homogène. On suppose que $H$ présente une transition de phase pour une valeur $T = T_c^{pur}$ de la température, avec des exposants critiques connus.

On suppose dans cette section que l'effet des impuretés est d'introduire en chaque site un champ magnétique local qui tend à polariser le spin dans sa direction au site considéré. Ce champ local est une variable aléatoire tirée de manière indépendante de site à site selon une loi qu'on précisera ci-dessous. On cherche à savoir si ces champs aléatoires modifient le comportement critique par rapport à celui du système pur (c'est à dire changent la valeur des exposants critiques). On rappelle que près du point critique, et lorsqu'on ne s'intéresse pas à la physique à très courte distance, on peut caractériser l'orientation locale des spins au point $\vec{x}$ par un champ continu $\phi(\vec{x})$ (supposé scalaire pour simplifier). La perturbation de $H$ due au champ aléatoire peut donc s'écrire :

$$\delta H = \int d^d x h(\vec{x})\phi(\vec{x}) \tag{4.111}$$

où la variable aléatoire $h(\vec{x})$ est tirée en chaque point selon une distribution gaussienne de valeur moyenne nulle et de variance $\Delta$ :

$$P[\{h(\vec{x})\}] = C \exp -\frac{1}{2\Delta}\int d^d x h(\vec{x})^2 \tag{4.112}$$

($C$ est une normalisation). On a donc :

$$\overline{h(\vec{x})h(\vec{y})} = \Delta\delta^d(\vec{x}-\vec{y}) \tag{4.113}$$

où $\overline{(\cdots)}$ désigne une moyenne sur les réalisations de $\{h(\vec{x})\}$.

On rappelle que dans une transformation de renormalisation qui fait passer la maille du réseau de $a$ à $sa$, les distances et le champ $\phi(x)$ se transforment selon :

$$x' = \frac{x}{s} \ , \ \ \phi'(x') = s^{d_\phi}\,\phi(x) \tag{4.114}$$

où $d_\phi$ est relié à l'exposant critique $\eta$ par $2d_\phi = d - 2 + \eta$.

I.1 En effectuant le changement d'échelle et de variables $x \to x', \phi \to \phi'$ sur $\delta H$, montrer qu'on peut écrire :

$$\delta H = \int d^d x' h'(x')\phi'(x') \tag{4.115}$$

Relier $h'(x')$ et $h(x)$.

I.2 En déduire la transformation de $\Delta$ par renormalisation : $\Delta' = \Delta s^{y_\Delta}$. Exprimer $y_\Delta$ en fonction de $d$ et $d_\phi$, puis de $\eta$.

Indication : on pourra soit calculer la corrélation $\overline{h'(x')h'(y')}$, soit directement la distribution $P[h']$.

I.3 Sachant que l'exposant $\eta$ est toujours tel que $\eta \ll 1$, la perturbation due au champ aléatoire est elle "relevante" ou "irrelevante" ? Vous attendez vous à ce que le comportement critique du système pur soit modifié par l'introduction de ce type de désordre ?

**II. Désordre sur les constantes d'échange, critère de Harris**

On considère maintenant un désordre sur les couplages entre spins, $J_{ij}$ qui sont des variables aléatoires tirées sur chaque lien de manière indépendante.

II.1 Rappeler, pour le modèle pur, la démonstration de la relation thermodynamique reliant la chaleur spécifique $C = \frac{\partial U}{\partial T}$ à la fluctuation de l'énergie à l'équilibre :

$$kT^2\, C =< H^2 > - < H >^2 \tag{4.116}$$

II.2 On considère la variable formée par le produit de deux spins sur deux sites plus proches voisins $\vec{x}$ et $\vec{x} + \vec{e}$ ($\vec{e}$ est un vecteur unitaire du réseau) :

$$B(\vec{x}) = S_{\vec{x}} \cdot S_{\vec{x}+\vec{e}} \tag{4.117}$$

et on cherche à déterminer la manière dont la fonction de corrélation :

$$G_B(\vec{x}) \equiv < B(\vec{0})B(\vec{x}) > - < B >^2 \tag{4.118}$$

décroît au point critique du système pur. Pour celà, on admettra que, près du point critique, cette fonction de corrélation prend une forme d'échelle :

$$G_B(\vec{x}) = \frac{1}{x^{2d_B}}\, f\left(\frac{x}{\xi}\right) \tag{4.119}$$

où $\xi$ est la longueur de corrélation, $f$ est une fonction d'échelle telle que $f(0) = 1$, et $d_B$ est un exposant à déterminer.

II.2.a Le hamiltonien pur s'écrit : $H = -J \int d^d x\, B(\vec{x})$. Relier $< H^2 > - < H >^2$ à $G_B(x)$.

II.2.b Sachant que la chaleur spécifique diverge au point critique en $|T - T_c|^{-\alpha}$, utiliser les deux questions précédentes pour exprimer $d_B$ en fonction de $d$, $\alpha$ et $\nu$.

II.3 On modélise l'effet des impuretés par un désordre de lien :

$$\delta H = \int d^d x\, \delta J(x)\, B(x) \tag{4.120}$$

tiré selon :

$$\overline{\delta J} = 0 \;\; , \;\; \overline{\delta J(x) \delta J(y)} = W \delta^d(x - y) \tag{4.121}$$

a) En suivant la même méthode qu'au I.), montrer que $W$ se transforme selon $W' = s^{y_W} W$ dans une transformation de renormalisation, et déterminer $y_W$.

b) On rappelle (pour $d < 4$) la relation entre exposants $\alpha = 2 - \nu d$. A quelle condition sur $\nu$ peut on s'attendre à ce que le désordre introduit *ne modifie pas* le comportement critique du système pur ? (C'est le "critère de Harris").

**III. Approximation de champ moyen en présence d'un champ aléatoire**

On revient dans cette section au problème du champ aléatoire introduit au I.), et on va chercher à établir son diagramme de phase en fonction de la température et du désordre en utilisant une approximation de champ moyen.

Pour celà, on considère le modèle d'Ising sur un réseau avec interactions entre plus proches voisins, dans la limite où le nombre de voisins $z$ de chaque site est grand : $z \to \infty$. Le hamiltonien du système pur est :

$$H = -\frac{J}{z} \sum_{<ij>} S_i S_j \tag{4.122}$$

et on introduit un champ aléatoire tiré en chaque site de manière indépendante selon une loi de distribution $P(h)$ (qu'on spécifiera plus bas) :

$$\delta H = -\sum_i h_i S_i \tag{4.123}$$

III.1 Ecrire les équations de champ moyen donnant l'aimantation locale en un site, $m_i$, en fonction du champ $h_i$ et des aimantations des voisins. Rappeler pourquoi ces équations sont exactes dans la limite $z \to \infty$.

III.2 On définit l'aimantation moyenne comme une moyenne sur l'ensemble des sites : $m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} m_i$. Montrer que $m$ est déterminée par :

$$m = \int dh P(h) \tanh(\beta J m + \beta h) \tag{4.124}$$

III.3 En déduire l'équation déterminant la température critique du modèle.

III.4 On choisit pour $P(h)$ la distribution :

$$P(h) = \frac{1}{2\Delta} \text{si } |h| < \Delta \;\; , \;\; P(h) = 0 \text{ si } |h| > \Delta \tag{4.125}$$

Simplifier l'équation précédente dans ce cas, et tracer le diagramme de phase du modèle en fonction des variables $T/J$ et $\Delta/J$. Montrer en particulier qu'il existe un désordre critique $\Delta_c$ au delà duquel la phase ordonnée est détruite à $T = 0$. Comment se comporte $T_c$ en fonction de $\Delta$ pour $\Delta$ petit ? Pour $\Delta$ proche de $\Delta_c$ ?

III.5 Combien, selon vous, le modèle possède- t- il de points fixes ? Pouvez vous deviner (sans démonstration, mais en motivant votre réponse) pour chacun d'entre eux si les perturbations correspondant à la température ($T$) et au désordre ($\Delta$) sont des perturbations relevantes ou irrelevantes ? Vous pourrez illustrer votre réponse par des flèches indiquant la stabilité des différents points fixes sur le diagramme des phases établi à la question précédente. [*Pour répondre complètement à cette question, il est nécessaire d'avoir répondu à I.3*].

**IV. Destruction de la phase ordonnée : argument de Imry-Ma**

Cette section concerne toujours le problème du champ aléatoire de hamiltonien $H+\delta H$, avec $H = -\sum_{<ij>} JS_iS_j$ et $\delta H = -\sum_i h_iS_i$. On a vu à la question précédente qu'en grande dimension (champ moyen), un désordre critique $\Delta_c > 0$ était nécessaire pour détruire la phase ordonnée à basse température. On cherche à déterminer par un argument physique (du à Imry et Ma) s'il en est de même en dimension plus basse.

On étudie pour celà la stabilité de l'état fondamental $S_i = +1$ de $H$ à $T = 0$ sous l'effet de la perturbation $\delta H$. On considère l'état obtenu à partir de $S_i = +1$ par retournement d'un ensemble de spins de taille linéaire $L$ (donc en nombre $L^d$). Le désordre est supposé faible ($\Delta \ll J$).

IV.1 Expliquer pourquoi, lorsque $L$ est grand, le *coût énergétique* de ce retournement (en l'absence de $\delta H$) est une énergie de surface d'ordre $JL^{d-1}$.

IV.2 En choisissant de manière appropriée le domaine retourné, il est possible (grâce à $\delta H$) de *gagner* une certaine énergie car les spins retournés s'aligneront dans la direction du champ aléatoire local. Estimer l'ordre de grandeur typique de ce gain énergétique.

IV.3 En comparant ces deux estimations, pour quelles dimensions $d$ doit on s'attendre à ce qu'un faible désordre préserve la phase ordonnée ?

### 4.4.2 Corrigé

I.1-I.3 Réecrivons $\delta H$ en terme du champ $\phi'$, et dans la nouvelle “unité ” de longueur :

$$\delta H = s^{d-d_\phi} \int d^d x' h(x) \phi'(x') \tag{4.126}$$

Il faut donc poser :

$$h'(x') = s^{d-d_\phi} h(x) \tag{4.127}$$

Calculons le corrélateur de ce nouveau champ :

$$\overline{h'(x')h'(y')} = s^{2(d-d_\phi)}\overline{h(x)h(y)} = \Delta s^{2(d-d_\phi)}\delta^d(x-y) = \Delta s^{2(d-d_\phi)} s^{-d}\delta^d(x'-y') = \Delta s^{d-2d_\phi}\delta^d(x'-y') \tag{4.128}$$

On identifie ainsi la loi de transformation de la variance du désordre :

$$\Delta' = s^{d-2d_\phi}\Delta \quad y_\Delta = d - 2d_\phi \tag{4.129}$$

On obtient le mê me résultat en considé rant la transformation de la loi de distribution de $h$, puisque :

$$\frac{1}{\Delta}\int d^dxh(x)^2 = \frac{1}{s^{d-2d_\phi}\Delta}\int d^dx'h'(x')^2 \tag{4.130}$$

En utilisant $2d_\phi = d-2+\eta$, on voit que $y_\Delta = 2-\eta$. Comme l'exposant $\eta$ est toujours petit, $y_\Delta$ est toujours proche de 2, et *l'effet d'un champ aléatoire faible est donc une perturbation relevante* au point critique du systè me pur, ce qui signifie qu'on doit s'attendre à un changement du comportement critique.

II.1 L'énergie interne s'obtient par dérivation de la fonction de partition canonique $Z = Tre^{-\beta H}$ : $U = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}$. On a de mê me :

$$< H^2 > - < H >^2 = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - (\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta})^2 \tag{4.131}$$

et donc :

$$< H^2 > - < H >^2 = \frac{\partial}{\partial \beta}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right) = -\frac{\partial U}{\partial \beta} = kT^2C \tag{4.132}$$

II.2 On obtient trè s simplement :

$$< H^2 > - < H >^2 = J^2\int d^dxd^dy\, G_B(x-y) = J^2\Omega^d\int d^dxG_B(x) \tag{4.133}$$

En séparant cette intégrale en deux contributions, l'une provenant des distances $|x| < \xi$ et l'autre des distances $|x| > \xi$, on constate que la premiè re contribution est responsable du comportement singulier prè s de $T_c$. Cette contribution peut être évalué e en remplacant $G_B(x)$ par son comportement aux grandes distances au point critique (puisque $f(0) = const.$) : $G_B(x) \sim 1/|x|^{2d_B}$. On obtient ainsi :

$$< H^2 > - < H >^2 \propto J^2\Omega^d\xi^{d-2d_B} \propto |T-T_c|^{-\nu(d-2d_B)} \tag{4.134}$$

En utilisant l'identité de cette fluctuation avec la chaleur spécifique, et $C \propto |T-T_c|^{-\alpha}$, on voit que : $\alpha = \nu(d-2d_B)$ et donc :

$$2d_B = d - \frac{\alpha}{\nu} \tag{4.135}$$

II.3 En suivant le mê me raisonnement que précedemment, on obtient sans difficulté : $y_W = d - 2d_B$ et donc :

$$y_W = \frac{\alpha}{\nu} \tag{4.136}$$

On voit donc qu'un désordre de lien est une perturbation irrelevante (i.e ne change pas le comportement critique du systè me pur) si celui-ci est tel que $\alpha < 0$ (critè re de Harris). En $d < 4$, ceci est équivalent à : $d > 2/\nu$.

III.1-III.2 Les équations de champ moyen locales s'écrivent :

$$m_i = \mathrm{th}\beta \left( \frac{J}{z} \sum_{j(i)} m_j + h_i \right) \tag{4.137}$$

où la somme porte sur les $z$ voisins du site $i$.

Dans la limite $z \to \infty$, le théorème central limite assure que le champ local total au site $i$ n'a plus de fluctuations thermodynamiques (on a en revanche des fluctuations de site à site, puisque $h_i$ dépend du site). De plus, $\frac{1}{z}\sum_{j(i)} m_j$ coverge avec probabilité 1 vers l'aimantation moyenne (par site) $\overline{m} \equiv m$. L'aimantation locale est donc déterminée par $m$ et le champ aléatoire au site $i$ par :

$$m_i = \mathrm{th}\beta(Jm + h_i) \tag{4.138}$$

On doit donc avoir une relation d'autocohérence, obtenue en moyennant chacun des membres de cette équation sur les différents sites (et donc sur les valeurs possibles de $h$) :

$$m = \int dhP(h)\, \mathrm{th}\beta(Jm + h) \tag{4.139}$$

III.3 Prè s de $T_c$, on peut développer à petite aimantation :

$$m = \overline{\mathrm{th}\beta h} + \beta Jm(1 - \overline{\mathrm{th}^2\beta h}) + \cdots \tag{4.140}$$

La loi $P(h)$ étant supposée paire, $\overline{\mathrm{th}}\beta h = 0$, et la température critique est obtenue en comparant les termes linéaires en $m$ :

$$\beta_c J(1 - \overline{\mathrm{th}^2\beta_c h}) = 1 \tag{4.141}$$

ou encore :

$$J\beta_c \int \frac{dh\, P(h)}{\mathrm{ch}^2\beta_c h} = 1 \tag{4.142}$$

III.4 Pour la distribution choisie, cette équation devient : $J\mathrm{th}\beta_c\Delta = \Delta$. La température critique est donc donée en fonction du rapport $\Delta/J$ (mesurant l'intensité du désordre par rapport aux constantes de couplages du modè le pur) par :

$$\frac{T_c}{J} = \frac{\Delta}{J\mathrm{Argth}\delta/J} \tag{4.143}$$

L'allure du diagramme de phases est représentée sur la figure ci-contre. On voit qu'au delà du désordre critique $\Delta_c = J$, la phase ordonnée est détruite par le désordre. Près de $\Delta_c$ : $T_c/J \propto 1/\ln(\Delta_c - \Delta)$, alors que pour $\Delta << J$ : $T_c/J = 1 - O(\Delta^2)$.

III.5 Le modèle possède au moins les points fixes suivants :

– Pour le système pur ($\Delta = 0$), les points fixes stables correspondant à la phase basse température ($T = 0$) et à la phase basse température ($T = \infty$), ainsi que le point fixe critique ($T = T_c$) pour lequel la température est une direction instable (relevante).
– L'analyse ci-dessus montre qu'un faible désordre est toujours une perturbation relevante par rapport au point critique du système pur. Supposons donc que le désordre préserve la phase ordonnée comme c'est le cas en champ moyen : l'hypothèse la plus simple est qu'il existe un nouveau point fixe situé à $T = 0$, $\Delta = \Delta_c$ contrôlant le comportement critique en prŝence de désordre.

Si le désordre préserve la phase ordonnée, il s'agit donc d'une perturbation irrelevante au point fixe $T = 0$, $\Delta = 0$. Schématiquement, les flots du groupe de renormalisation sont donc comme indiqués sur la figure ci-dessous. Bien entendu, ce raisonnement simple ne peut exclure un scenario plus complexe, impliquant des points fixes additionnels.

Les question suivantes établissent un critère pour la non-destruction de la phase ordonnée par le désordre.

IV.1 Le retournement d'un amas de spin de taille $L$ va couter une énergie d'échange correspondant aux liens qui se trouvent *sur les bords de l'amas*. En effet, si on retourne les deux spins d'un lien donné, l'énergie reste inchangée. Le coût énergétique est donc une énergie de surface $JL^{d-1}$.

IV.2 Le gain énergétique est *au plus* de l'ordre de grandeur typique du terme engendré par le champ aléatoire. Ce terme est une somme de $L^d$ termes de signes oscillants. Elle est donc typiquement d'ordre $\Delta L^{d/2}$.

IV.3 La phase ordonnée ne peut être détruite si le gain maximal d'énergie due au champ n'excède jamais le coût estimé ci dessus. On a $L^{d/2} \ll L^{d-1}$ si :

$$d > 2 \tag{4.144}$$

Pour ces dimensions, on s'attend à ce que la phase ordonnée soit préservée : c'est l'argument de Imry-Ma. Nous savons que cette phase est de toute facon absente en $d = 1$. Le cas litigieux est donc le cas bidimensionnel $d = 2$, qui a pendant un temps fait d'ailleurs l'objet de controverses parmi les physiciens. Des résultats rigoureux de physique mathématique ont établi *qu'un champ aléatoire faible détruit la phase ordonnée dans le cas bidimensionnel.*

## 4.5 Problème 5 : Enroulement des polymères browniens

### 4.5.1 Enoncé

Examen du lundi 2 mars 1999

**Enroulement des polymères browniens**

On considère un polymère Brownien idéal dans un plan, décrit par une courbe $\vec{r}(s)$ où $s$ est l'abscisse curviligne $0 \leq s \leq L$, Ce polymère est soumis à un potentiel extérieur $V(\vec{r})$, de sorte que la densité de probabilité d'une configuration $\vec{r}(s)$, à la température $T$, est (avec un bon choix d'unité permettant d'absorber la température) : $P[\vec{r}] = \frac{1}{Z}e^{-E[\vec{r}]}$, où :

$$E[\vec{r}] = \frac{1}{2}\int_0^L ds \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial s}\right)^2 + \int_0^L ds\, V(\vec{r}(s)) \tag{4.145}$$

L'origine du polymère est *fixée* en un point $\vec{r}_0 \neq \vec{0}$, et on s'intéresse à la statistique du nombre de tour que fait le polymère autour de l'origine, le point d'arrivée étant laissé libre.

Plus précisément, utilisant les coordonnées polaires $\vec{r}(s) = (r(s)\cos\theta(s), r(s)\sin\theta(s))$, on définit *l'enroulement algébrique* comme l'angle :

$$\phi = \int_0^L ds\, \frac{\partial \theta}{\partial s} \tag{4.146}$$

et on se propose de calculer la loi de distribution de $\phi$, $P_L(\phi)$, pour $L$ grand.

Dans tout le problème le potentiel est supposé posséder la symétrie de rotation : $V(\vec{r}) \equiv V(r)$.

On définit également les vecteurs $\vec{u}_r = \frac{\vec{r}}{r}$ et $\vec{u}_\theta = \hat{z} \times \vec{u}_r$ où $\hat{z}$ est le vecteur unitaire perpendiculaire au plan. On donne, en coordonnées polaires, le vecteur gradient :

$$\vec{\nabla} = \vec{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{u}_\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} \tag{4.147}$$

et le Laplacien :

$$\Delta = \vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \tag{4.148}$$

I. Fonction caractéristique

On introduit l'intégrale de chemin :

$$Z_\lambda(\vec{r}, L) = C\int_{\vec{r}(0)=\vec{r}_0}^{\vec{r}(L)=\vec{r}} d[\vec{r}(s)] \exp\left(-E[\vec{r}(s)] + i\lambda \int_0^L ds\, \frac{\partial \vec{r}}{\partial s}.\vec{A}(\vec{r}(s))\right) \tag{4.149}$$

où l'intégrale porte sur tous les chemins de longueur $L$ issus de $\vec{r}_0$ et arrivant en $\vec{r}$, $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\vec{u}_\theta}{r}$, et $C$ est une constante de normalisation qui sera précisée plus loin. Montrer que la fonction caractéristique de $P_L(\phi)$ est reliée à cette intégrale de chemin par :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\phi\ P_L(\phi) e^{i\lambda\phi} = \frac{A_\lambda(L)}{A_0(L)} \tag{4.150}$$

où

$$A_\lambda(L) = \int d\vec{r}\ Z_\lambda(\vec{r}, L) \tag{4.151}$$

II.Discrétisation

L'intégrale de chemin $Z_\lambda$ est discrétisée en découpant l'intervalle $L$ en $N$ sous-intervalles égaux de longueur $\epsilon = L/N$. Posant $\vec{r}_i = \vec{r}(s = iL/N)$, on choisit la discrétisation suivante :

$$Z_\lambda^{(N)}(\vec{r}, L) = \int \prod_{i=1}^{N} \frac{d^2\vec{r}_i}{2\pi\epsilon} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_i \frac{(\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i)^2}{\epsilon} - \epsilon \sum_i V(\vec{r}_i) + i\lambda \sum_i (\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i) \cdot \vec{A}\left(\frac{\vec{r}_{i+1} + \vec{r}_i}{2}\right)\right] \tag{4.152}$$

a) En étudiant le lien entre $Z_\lambda^{(N)}(\vec{r}, L)$ et $Z_\lambda^{(N)}(\vec{r}, L - \epsilon)$, montrer que, à la limite $N \to \infty$, l'intégrale de chemin vérifie l'équation :

$$\frac{\partial Z_\lambda(\vec{r}, L)}{\partial L} = -HZ_\lambda(\vec{r}, L) \tag{4.153}$$

où H est l'opérateur :

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{i}\vec{\nabla} + \lambda\vec{A}(\vec{r})\right)^2 + V(r) \tag{4.154}$$

b) Quelle est l'interprétation physique du champ $\vec{A}(\vec{r})$ ? A quel problème quantique notre problème d'enroulement de polymère est-il relié (On ne détaillera pas ce lien) ?

III. Mécanique quantique

On introduit une base complète (supposée discrète) d'états propres du Hamiltonien $H$, $\psi_n(\lambda, \vec{r})$, et on appelle $E_n(\lambda)$ les énergies correspondantes, ordonnées ($E_0(\lambda) < E_1(\lambda) <$ ...).

a) Montrer que $Z_\lambda$ peut s'écrire sous la forme :

$$Z_\lambda(\vec{r}, L) = \sum_n \psi_n(\lambda, \vec{r})\psi_n^*(\lambda, \vec{r}_0) e^{-E_n(\lambda)L}\ . \tag{4.155}$$

Pour l'étude de la statistique d'enroulement è $L$ grand, à quelle condition peut-on ne considérer dans cette somme que l'état fondamental $n = 0$ ? On supposera par la suite cette condition réalisée.

b) Montrer que le Hamiltonien $H$ s'écrit en coordonnées polaires comme

$$H = \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - 2i\frac{\lambda}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\lambda^2}{r^2}\right) + V(r). \tag{4.156}$$

c) Ce Hamiltonien commute avec l'opérateur moment cinétique suivant l'axe orthogonal au plan de déplacement ($L_z = (1/i)\frac{\partial}{\partial\theta}$), ce qui permet de chercher les fonctions d'ondes sous la forme $\psi_n(\lambda,\vec{r}) = \rho(\lambda,r)e^{im\theta}$. Montrer que, pour le calcul de la statistique d'enroulement (4.150) de polymères sans contrainte sur le point d'arrivée, on peut se limiter au cas $m = 0$, et donc résoudre l'équation radiale :

$$\left[-\frac{1}{2r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\lambda^2}{2r^2} + V(r)\right]\rho(\lambda,r) = E(\lambda)\rho(\lambda,r) \tag{4.157}$$

IV. Résultats sur l'enroulement à grand $L$

On appelle $\rho_0(\lambda,r)$ et $E_0(\lambda)$ la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental de l'équation radiale (4.157).

a) Montrer que, pour $L$ grand, la fonction caractéristique de $P_L(\phi)$ s'écrit :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\phi\ P_L(\phi)e^{i\lambda\phi} \simeq A(\lambda)e^{-L(E_0(\lambda)-E_0(0))} \tag{4.158}$$

où $A(\lambda)$ est une fonction indépendante de $L$.

b) On choisit un potentiel $V(r)$ qui est nul pour $r < R$ et infini pour $r > R$, de sorte que le polymère est contraint dans un disque de rayon $R$. La solution de l'équation de Schrödinger radiale (4.157) en termes de fonctions de Bessel permet alors de montrer que $E_0(\lambda) - E_0(0) \sim \alpha|\lambda|$ lorsque $\lambda \to 0$, où $\alpha$ est une constante numérique positive. Montrer que, en ce qui concerne l'enroulement à $L$ grand, la variable d'échelle est $\hat{\phi} = \phi/L^\nu$, et donner la valeur de l'exposant $\nu$. Quelle est la distribution de probabilité de la variable réduite $\hat{\phi}$ ?

c) On choisit maintenant un potentiel $V(r)$, toujours confinant dans un disque de rayon $R$, mais tel que le voisinage immédiat de l'origine est également exclu ($V(r) = 0$ pour $r \in [a,R]$, et infini ailleurs, où $a << R$), pour lequel la résolution en termes de fonctions de Bessel donne $E_0(\lambda) - E_0(0) \sim \gamma\lambda^2$, où $\gamma$ est une constante numérique positive. Quel est maintenant le nouvel exposant $\nu$ caractérisant la taille typique de l'angle d'enroulement $\phi$ à grand $L$. ? Quelle est la nouvelle distribution de probabilité de $\hat{\phi} = \phi/L^\nu$ ?

d) Commenter les résultats des questions b) et c). Que prédisez-vous pour l'enroulement autour de l'origine d'une marche aléatoire sur un réseau carré discret ?

### Lois d'échelle pour un système anisotrope

On considère un système physique possédant des propriétés *anisotropes* : toutes les directions de l'espace ne sont pas équivalentes. (exemples). Appelons G la fonction de corrélation des spins. On suppose que la relation d'échelle suivante est valide dans le domaine critique :

$$G(x_\parallel, x_\perp, \theta) = b^{-(D-2+\eta)}\, G(x_\parallel/b^z, x_\perp/b, b^{1/\nu}\theta). \tag{4.159}$$

Dans cette relation, $z$, $\nu$ et $\eta$ sont des exposants critiques, les distances $x_\parallel$ et $x_\perp$ sont relatives à des sous-espaces orthogonaux, $\theta$ est l'écart au point critique $\theta = T - T_c/T_c$. La dimension totale de l'espace est $D$ et les dimensions des deux sous-espaces $\parallel$ et $\perp$ n'interviennent pas dans ce qui suit.

1) Calculer l'exposant caractérisant la décroissance des corrélations $G(x_\parallel, x_\perp = 0, \theta = 0)$ ainsi que $G(x_\parallel = 0, x_\perp, \theta = 0)$.

2) Quand on n'est pas au point critique $\theta \neq 0$, montrer qu'on peut définir deux longueurs de corrélations $\xi_\parallel$ et $\xi_\perp$, quels sont les exposants critiques associés ?

### Phénomènes tricritiques, dimension critique supérieure

On rappelle que le modèle d'Ising traité en champ moyen conduit à une énergie libre de la forme :

$$\frac{F}{NkT} = Cste + \frac{1}{2}\theta m^2 + \frac{g}{4}m^4 + \dots \tag{4.160}$$

où $\theta$ est l'écart à la température critique. Certains systèmes physiques (exemples) correspondent au cas particulier où le coefficient $g$ du développement précédent est *nul*. On est alors en présence d'un point "tricritique" et non pas simplement "critique" Il faut alors tenir compte du coefficient en $m^6$. Tronquant alors l'énergie libre, utilisons l'expression approchée :

$$\frac{F}{NkT} = Cste + \frac{1}{2}\theta m^2 + c_6 m^6. \tag{4.161}$$

1) Que prédisez-vous pour l'exposant $\beta$ dans un tel système ?

2) En admettant que l'exposant $\nu$ est inchangé par rapport aux phénomènes critiques ordinaires en champ moyen, utilisez le critère de Ginzburg pour trouver la dimension critique pour la validité du champ moyen dans de tels systèmes.

### 4.5.2 Corrigé

I-Fonction caractéristique. Examinons le terme $\frac{\partial \vec{r}(s)}{\partial s} \cdot \vec{A}$. On a :

$$d\vec{r} = \begin{pmatrix} \cos\theta dr - r\sin\theta d\theta \\ \sin\theta dr + r\cos\theta d\theta \end{pmatrix},$$

et :

$$\vec{u}_\theta = \begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix}.$$

Ceci donne $\vec{u}_\theta \cdot d\vec{r} = rd\theta$ et donc $\frac{\partial \vec{r}}{\partial s} \cdot \vec{A} = \frac{\partial \theta}{\partial s}$. L'intégrale est donc égale à l'enroulement algébrique :

$$\int_0^L ds\, \frac{\partial \vec{r}}{\partial s} \cdot \vec{A} = \phi.$$

L'intégrale de chemin est donc égale à :

$$Z_\lambda(\vec{r}, L) = C \int_{\vec{r}(0)=\vec{r}_0}^{\vec{r}(L)=\vec{r}} d[\vec{r}(s)]\ \exp(-E[\vec{r}(s)]) \exp(i\lambda\phi[\vec{r}(s)]).$$

La quantité $\int d\vec{r}\ Z_{\lambda=0}(\vec{r}, L)$ notée $A_0(L)$ est la fonction de partition du polymère. On a donc :

$$\frac{A_\lambda(L)}{A_0(L)} = \langle \exp(i\lambda\phi) \rangle$$

C'est bien la fonction caractéristique de l'angle $\phi$ de l'enroulement.

II-Discrétisation

II-a. Si l'on ajoute un pas de temps on a :

$$Z_\lambda^{(N+1)}(\vec{r}, L) = \int \frac{d\vec{r}'}{2\pi\epsilon} e^{-\frac{1}{2}\frac{(\vec{r}'-\vec{r})^2}{\epsilon} - \epsilon V(\vec{r})} e^{i\lambda(\vec{r}'-\vec{r})\cdot\vec{A}(\frac{\vec{r}'+\vec{r}}{2})}\ Z_\lambda^{(N)}(\vec{r}', L).$$

On pose ensuite $\vec{r}' = \vec{r} + \sqrt{\epsilon}\vec{z}$ et on développe en puissance de $\epsilon$, l'intégrale sur $\vec{z}$ est Gaussienne et peut être faite explicitement (cf. cours). On obtient :

$$\frac{\partial Z_\lambda}{\partial L} = \frac{1}{2}\Delta Z_\lambda - V\ Z_\lambda - \frac{\lambda^2}{2}\vec{A}^2 Z_\lambda + \frac{i\lambda}{2}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}) Z_\lambda + i\lambda\vec{A}\cdot\vec{\nabla} Z_\lambda.$$

ce qui donne bien :

$$\frac{\partial Z_\lambda}{\partial L} = -\frac{1}{2}(\frac{1}{i}\vec{\nabla} + \lambda\vec{A})^2 Z_\lambda - V\ Z_\lambda.$$

II-b. Si on calcule le champ magnétique fictif associé au potentiel vecteur $\vec{A}$ avec la formule de $\vec{\nabla}$ en coordonnées polaires on trouve que $\vec{\nabla}\times\vec{A}=0$ partout où $\vec{r}\neq\vec{0}$. Il n'y a donc pas de champ. Mais la circulation de $\vec{A}$ le long 'd'un cercle autour de l'origine est égale à :

$$\oint \vec{A}\cdot d\vec{r} = 2\pi.$$

Il y a donc du flux magnétique concentré en $\vec{r}=\vec{0}$. Le potentiel vecteur $\vec{A}$ est donc celui d'un solénoïde infiniment fin placé à l'origine des coordonnées. Ce solénoïde ne produit pas de champ magnétique extérieur mais il induit un facteur de phase sur les trajectoires qui l'encerclent d'où son apparition dans le problème de l'enroulement. C'est l'effet Aharonov-Bohm dans le cas des particules chargées dont les interférences sont modifiées par la présence du solénoïde.

III-Mécanique Quantique

III-a. La fonction $Z_\lambda$ est solution de l'équation de Schrödinger Euclidienne, on peut la décomposer sur une base d'états propres de H (cf. Cours). Si l'écart en énergie entre le fondamental et le premier état excité est *non-nul*, $E_1-E_0>0$ alors seul le premier terme de la somme domine à des corrections exponentiellement petites près quand $L\to\infty$ III-b.

On a pour le potentiel vecteur les propriétés $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0$, $\vec{A}^2=1/\vec{r}^2$, $\vec{A}\cdot\vec{\nabla}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}$. Ceci conduit à :

$$\begin{aligned}(\frac{1}{i}\vec{\nabla}+\lambda\vec{A})^2 &= -\Delta+\frac{2}{i}\lambda\vec{A}\cdot\vec{\nabla}+\frac{1}{i}\lambda\vec{\nabla}\cdot\vec{A}+\lambda^2\vec{A}^2\\ &= -\Delta-2i\lambda\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\lambda^2}{r^2}\end{aligned}$$

Avec la formule du Laplacien on a :

$$(\frac{1}{i}\vec{\nabla}+\lambda\vec{A})^2=-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-2i\lambda\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\lambda^2}{r^2}$$

ce qui conduit à la formule de l'énoncé pour H. III-c. Dans la fonction caractéristique pour

l'angle $\phi$ seul intervient l'intégrale sur $\vec{r}$ de la fonction de partition $Z_\lambda$. Donc seules les fonctions d'onde $\psi_n$ dont l'intégrale spatiale est non nulle contribuent. A cause du facteur $e^{im\theta}$, il n'y a donc que les fonctions avec $m=0$.

IV-Résultats sur l'enroulement à grand L

IV-a. Quand L devient grand on peut garder le terme dominant dans les sommes sur les états :

$$Z_\lambda\to\rho(\lambda,r)\rho(\lambda,r_0)e^{-E_0(\lambda)L},$$

$$A_\lambda(L) \to (2\pi \int_0^\infty r\,dr\,\rho(\lambda,r)) \times \rho(\lambda,r_0)e^{-E_0(\lambda)L},$$
$$A_{\lambda=0}(L) \to (2\pi \int_0^\infty r\,dr\,\rho(0,r)) \times \rho(0,r_0)e^{-E_0(0)L},$$

ce qui donne une fonction caractéristique calculée à partir de la première partie :

$$\langle \exp(i\lambda\phi)\rangle \to \frac{\int_0^\infty r\,dr\,\rho(\lambda,r)) \times \rho(\lambda,r_0)}{\int_0^\infty r\,dr\,\rho(0,r)) \times \rho(0,r_0)} \times e^{-(E_0(\lambda)-E_0(0))L} \equiv F_L(\lambda)$$

IV-b. *Le cas du disque.* La distribution de probabilité $P_L(\phi)$ s'obtient par transformée de

Fourier inverse de la fonction $F_L(\lambda)$. On a :

$$P_L(\phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi}\, e^{-i\lambda\phi} F_L(\lambda).$$

Pour L grand, on s'attend à ce que le polymère s'enroule de nombreuses fois autour de l'origine : $\phi \to \infty$. Le comportement à grand $\phi$ s'obtient par le comportement à petit $\lambda$ de la Fourier. On peut donc utiliser le comportement asymptotique :

$$F_L(\lambda) \sim A(\lambda)e^{-\alpha L|\lambda|},$$

Dans l'expression de $P$ ceci conduit à :

$$P_L(\phi) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi}\, e^{-i\lambda\phi} e^{-\alpha L|\lambda| + \ln A(\lambda)}$$

Pour $L \to \infty$ le terme en $\alpha L|\lambda|$ domine. Le calcul de l'intégrale sur $\lambda$ nous donne :

$$P_L(\phi) \sim \frac{\alpha}{\pi L} \frac{1}{1+(\phi/L)^2}.$$

La variable d'échelle est donc $\hat{\phi} = \phi/L$ et la fonction d'échelle est une Lorentzienne : c'est la distribution de probabilité de $\hat{\phi}$. On a bien $\phi \to \infty$ pour $L \to \infty$. L'exposant $\nu$ vaut donc 1. Notons qu'il s'agit d'une loi large : $\langle\phi^2\rangle$ n'existe pas. IV-c. *Le disque avec obstacle*

*au centre.* On utilise le même raisonnement que précédemment :

$$P_L(\phi) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi}\, e^{-i\lambda\phi} e^{-\gamma L\lambda^2 + \ln A(\lambda)}$$

A L grand l'intégrale est Gaussienne, son évaluation conduit à :

$$P_L(\phi) \sim \frac{1}{\sqrt{4\pi\gamma L}} e^{-\phi^2/4\gamma L}.$$

L'exposant $\nu$ vaut 1/2 car la variable réduite est maintenant $\phi/\sqrt{L}$ et la distribution de probabilité de $\hat{\phi} = \phi/\sqrt{L}$ est Gaussienne. Maintenant tous les moments de la distribution sont définis. IV-d. L'enroulement est donc très différent selon que l'on exclut un voisinage fini de l'origine ou pas. La limite où l'on fait tendre vers zéro le rayon du disque interdit est très singulière. Ce phénomène est dû à la limite continue que l'on prend pour définir le mouvement Brownien. Si l'on considère une marche aléatoire sur un réseau discret on va évidemment retrouver le résultat IV-c. Le détail du processus de la limite a été clarifié par Messulam et Yor (J. Lond. Math. Soc. **26**, 348 (1982)) dans le cas d'un mouvement Brownien dans un plan non borné. Dans ce problème on s'est limité à un disque de rayon R uniquement pour avoir des formules asymptotiques très simples. Si l'on se place dans tout le plan il faut sommer sur les états propres de l'Hamiltonien, ce qui est possible mais nécessite des manipulations de fonctions de Bessel. (Référence A. Comtet, J. Desbois, C. Monthus, J. Stat. Phys. **73**, 433 (1993))

## 4.6 Problème 6 : Modèle XY, oscillateur harmonique et intégrale fonctionnelle

### 4.6.1 Enoncé

Examen du 25 mars 2002

**Partie I -Modèle $O(2)$ bidimensionnel ("modèle XY")**

Dans cette partie, on considère un modèle de physique statistique (classique) défini de la manière suivante. En chaque site d'un *réseau carré* (de maille $a$), on place un vecteur de norme unité $\vec{S}_i$, à deux composantes. L'énergie d'une configuration donnée de ces variables a pour expression :

$$H = -J \sum_{<ij>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

avec $J > 0$. La notation $< ij >$ signifie que l'interaction est entre sites plus proches voisins, et que chaque lien du réseau n'est compté qu'une seule fois dans cette somme.

1) En posant $\vec{S}_i = (\cos\varphi_i, \sin\varphi_j)$ ($\varphi_i \in [0, 2\pi]$), réecrire $H$ en faisant apparaitre la différence $\varphi_i - \varphi_j$

2) a) Quelles sont les états fondamentaux du système à $T = 0$, c'est à dire les configurations des $\varphi_i$ qui minimisent l'énergie totale ?

b) Caractériser le groupe de symétrie du hamiltonien $H$, et expliquer en quoi consisterait une brisure spontanée de cette symétrie.

3) On suppose dans un premier temps que la valeur moyenne thermique $\langle\varphi_i\rangle$ (indépendante du site $i$) peut être non-nulle, et on note $\delta\varphi_i$ la fluctuation de $\varphi_i$ autour de sa moyenne : $\varphi_i = \langle\varphi\rangle + \delta\varphi_i$. On considère que cette fluctuation est faible, de sorte que $H$ peut être développé en puissances de $\delta\varphi_i - \delta\varphi_j$. Montrer qu'au second ordre, on obtient :

$$\beta H = \text{Const.} + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \delta\varphi_i\, M_{ij}\, \delta\varphi_j + \cdots \tag{4.162}$$

où $M_{ij}$ est une matrice ayant pour indices les sites du réseau, que l'on exprimera en fonction de la matrice $\Delta_{ij}$ (=1 si $i, j$ plus proches voisins, =0 sinon), et des paramètres du problème.

4) Donner l'expression de la transformée de Fourier de la fonction de corrélation $< \delta\varphi_i\, \delta\varphi_j >$ en utilisant l'approximation de la question précédente

5) a) En déduire l'expression de la fluctuation $< \delta\varphi_i^2 >$ comme une intégrale sur $\vec{k}$.

b) Dans un système de taille finie $L \times L$, l'intégration sur le module de $\vec{k}$ est bornée : $k > 1/L$. Comment se comporte $< \delta\varphi_i^2 >$ en fonction de la température et de $L$, pour $L$ grand ?

c) Expliquer physiquement pourquoi cette remarque suggère qu'en réalité $\langle\varphi\rangle = 0$.

5) a) Simplifier l'expression (4.162) dans la limite continue $a \to 0$ (on notera $\delta\varphi_i \equiv \varphi_i$ puisque $\langle\varphi\rangle = 0$).

b) Calculer (dans cette limite continue) la fonction de corrélation :

$$D(x) \equiv \langle(\varphi(\vec{x}) - \varphi(\vec{0}))^2\rangle$$

On rappelle que (avec $r = ||\vec{x}||$) :

$$\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{1-\cos(\vec{k}\cdot\vec{x})}{k^2} = \frac{1}{2\pi}\ln\frac{r}{a}$$

6) a) Montrer que la fonction de corrélation :

$$\langle\vec{S}(\vec{0})\cdot\vec{S}(\vec{x})\rangle \;=\; \langle\exp i(\varphi(\vec{0}) - \varphi(\vec{x}))\rangle$$

peut s'exprimer en fonction de $D(x)$.

b) En déduire le comportement de cette fonction de corrélation à grande distance $r/a \gg 1$. Que valent la longueur de corrélation $\xi$ et l'exposant critique $\eta$ d'après ce calcul ?

c) Les résultats de la question précédente vous paraissent ils surprenants ? Sont ils acceptables à toute température ?

7) On va maintenant considérer une configuration particulière des spins (un “vortex”), définie par :

$$\vec{S}(\vec{x}) = (-\sin\theta(\vec{x}), \cos\theta(\vec{x}))$$

où $\theta(\vec{x})$ est l'angle polaire du vecteur $\vec{x} = r(\cos\theta, \sin\theta)$.

a) Faire un dessin représentant cette configuration.

b) Calculer son énergie en utilisant l'expression de $H$ à la limite continue. On considèrera que le système est un disque de taille finie, de rayon $R$.

c) Estimer la contribution de ces configurations de type vortex à l'entropie du système (dans la limite thermodynamique $R \gg a$). Pour celà, on considérera que le nombre de telles configurations est donné par le nombre de manières de placer le centre du vortex en un site quelconque du réseau, à l'intérieur du disque de rayon $R$.

d) Montrer que ces considérations physiques suggèrent l'existence d'une *transition de phase* à une température $T_c$ que l'on déterminera. Expliquer en quoi cette transition de phase a une nature très particulière, différente du cas général expliqué en cours.

e) Que vaut l'exposant $\eta$ à $T = T_c$ ?

## Partie II : Oscillateur harmonique en mécanique quantique, théorie des perturbations et intégrale fonctionnelle :

*Dans toute cette partie, on se place dans le cadre de la mécanique quantique, mais on utilise des unités où $\hbar = 1$*

1) On considère un problème de Mécanique Quantique à une dimension spatiale dont l'Hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2 + V(\hat{q}),$$

où le potentiel $V(\hat{q})$ est quelconque et on a pris une masse unité (m=1). Ecrire l'amplitude de probabilité pour aller d'un point $x$ à un point $y$ en un temps $t$ au moyen d'une intégrale de chemin.

2) En utilisant un temps imaginaire (Euclidien) $t = -i\tau$ avec $\tau \in [0, \beta]$, écrire une intégrale fonctionnelle pour la fonction de partition $Z(\beta)$ de l'Hamiltonien $\hat{H}$ à la température $T$ (On notera $\beta = 1/k_B T$). Comment calculer l'énergie du fondamental ? (On supposera l'existence d'un gap non-nul entre le fondamental et le premier état excité).

3) On se place dans le cas de l'oscillateur harmonique $V_0(\hat{q}) = \frac{1}{2}\omega_0^2\hat{q}^2$. On note la fonction de partition correspondante $\mathrm{Z}_0(\beta)$ (on ne cherchera surtout pas à la calculer explicitement). On ajoute maintenant un terme de source $J(\tau)$ en définissant la fonction de partition en présence d'une source :

$$Z_0(J,\beta) = \int \mathcal{D}q \quad \exp\left(-\int_0^\beta d\tau H + \int_0^\beta d\tau J(\tau)q(\tau)\right)$$

où $\mathcal{D}q$ dénote l'intégration sur les chemins $q(\tau)$ (périodiques : $q(0) = q(\beta)$).

Exprimer le rapport $Z_0(J,\beta)/Z_0(J = 0,\beta)$ en fonction du propagateur $\Delta(\tau - \tau') \equiv \langle q(\tau)q(\tau')\rangle$. On ne cherchera pas pour l'instant à calculer explicitement ce propagateur.

4) On va maintenant établir certaines relations utiles concernant l'intégrale fonctionnelle.

a) Evaluer :

$$\frac{\delta}{\delta J(\tau_0)} \quad \exp(\int_0^\beta d\tau' J(\tau')q(\tau'))$$

où $\tau_0$ est dans l'intervalle $[0,\beta]$. On rappelle que la notation $\frac{\delta}{\delta J(\tau)}$ désigne la dérivée fonctionnelle par rapport à la fonction $J(\tau)$.

b) $V_1(x)$ étant une fonction d'une variable réelle (dont on pourra supposer qu'elle peut être développée en série : $V_1(x) = \sum_n v_n x^n$), évaluer :

$$V_1\left[\frac{\delta}{\delta J(\tau_0)}\right] \quad \exp(\int_0^\beta d\tau' J(\tau')q(\tau'))$$

c) Calculer finalement la quantité suivante :

$$\exp(-\int_0^\beta d\tau V_1\left[\frac{\delta}{\delta J(\tau)}\right]) \quad \exp(\int_0^\beta d\tau' J(\tau')q(\tau'))$$

6) On veut étudier un problème de mécanique quantique $\hat{H} = \hat{p}^2/2 + V_0(\hat{q}) + V_1(\hat{q})$ en traitant $V_1$ en perturbation. On appelle $Z(J,\beta)$ la fonction de partition de cet Hamiltonien en présence d'une source J, exprimer $Z(J,\beta)$ au moyen de $Z_0(J,\beta)$ en utilisant la formule de la question précédente.

7) On se place maintenant dans le cas où $\mathrm{V}_1(\mathrm{q})=\lambda\mathrm{q}^4$ et on veut étudierl'effet de cette perturbation au premier ordre en $\lambda$. Calculer à cet ordre en $\lambda$ le rapport $Z(J = 0,\beta)/Z_0(J = 0,\beta)$.

8) Quand $\beta \to \infty$, les fonctions de partition sont dominées par l'état fondamental, calculer la correction $\delta E_0$ à l'énergie du fondamental de l'oscillateur harmonique au premier ordre en $\lambda$. On rappelle l'expression du propagateur de l'oscillateur harmonique quand $\beta \to \infty$ :

$$\Delta(\tau) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\mathrm{e}^{ik\tau}}{k^2+\omega_0^2} = \frac{1}{2\omega_0}\mathrm{e}^{-\omega_0\tau}$$

9) Vérifier ce résultat en utilisant la théorie des perturbations stationnaires en Mécanique Quantique, au premier ordre en $\lambda$. On rappelle que le déplacement en énergie du fondamental est donné par : $\delta E_0 = \lambda\langle 0|q^4|0\rangle$ où $|0\rangle$ est le fondamental de l'oscillateur harmonique. On utilisera les opérateurs $a$ et $a^\dagger$ avec $q = (a+a^\dagger)/\sqrt{2\omega_0}$, $[a, a^\dagger] = 1$ et $a|0\rangle = 0$.

### 10) Questions subsidiaires

*Ces questions, qui apporteront des points supplémentaires, ont pour but d'établir l'expression du propagateur $\Delta(\tau)$ à température finie.*

a) Exprimer $\Delta(\tau)$ comme l'inverse (i.e la solution élémentaire) d'un opérateur différentiel que l'on précisera.

b) $\Delta(\tau)$ étant une fonction périodique de période $\tau$, on introduit sa décomposition en série de Fourier :

$$\Delta(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \Delta_n e^{-i\nu_n\tau}$$

$$\Delta_n = \int_0^\beta \Delta(\tau)\, e^{i\nu_n\tau}$$

avec $\nu_n = 2\pi n/\beta$ ("fréquences de Matsubara"). Calculer $\Delta_n$ (on notera que $\exp(i\nu_n\tau)$ est une fonction propre de l'opérateur différentiel du a)).

c) On donne :

$$\frac{1}{\beta}\sum_n \frac{e^{-i\nu_n\tau}}{i\nu_n - \Omega} = -\frac{e^{-\Omega\tau}}{e^{\beta\Omega}-1}$$

Calculer $\Delta(\tau)$. Vérifier que la limite de $\Delta(\tau)$ pour $\beta \to \infty$ coincide bien avec l'expression donnée dans l'énoncé à la question 8).

d) $\hat{q}$ étant l'opérateur position, on définit : $\hat{q}(\tau) \equiv e^{\tau\hat{H}}\hat{q}\, e^{-\tau\hat{H}}$, et on considère la valeur moyenne thermique :

$$\langle \hat{q}(0)\hat{q}(\tau)\rangle \;\equiv\; \frac{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}}\hat{q}(0)\hat{q}(\tau)\right]}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}}$$

On désigne par $E_m = (m+1/2)\omega_0$ et $|m\rangle$ les énergies propres et les états propres de l'oscillateur harmonique. Montrer que :

$$\langle \hat{q}(0)\hat{q}(\tau)\rangle = \sum_{m,p} C_{mp}\, e^{\tau(E_m - E_p)}$$

où les $C_{mp}$ sont des coefficients que l'on reliera aux éléments de matrice $\langle m|\hat{q}|p\rangle$.

e) Calculer l'élément de matrice $\langle m|\hat{q}|p\rangle$, puis $C_{mp}$. On rappelle que :

$$a|m\rangle = \sqrt{m}|m-1\rangle \ \ , \ \ a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}|m+1\rangle \ \ , \ \ \hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}}(a+a^\dagger)$$

f) En déduire l'expression de $\langle \hat{q}(0)\hat{q}(\tau)\rangle$ et vérifier qu'elle est bien identique à celle de $\Delta(\tau)$ établie à la question c). On effectuera les sommes en utilisant les formules ($\alpha > 0$) :

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha n} = \frac{1}{1-e^{-\alpha}} \ \ , \ \ \sum_{n=0}^{\infty} n\, e^{-\alpha n} = \frac{e^{-\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^2}$$

## 4.7 Problème 7 : Applications de l'approximation du champ moyen

### 4.7.1 Enoncé

Examen du 18 Mars 2003

*On étudie dans ce problème l'approximation de champ moyen dans plusieurs situations différentes, et ses limites de validité.*

**I. Question préliminaire : transformée de Legendre**

On considère un modèle de mécanique statistique sur un réseau. En chaque site $i$ du réseau on a une variable réelle $\phi_i$. Ces variables interagissent entre elles et sont soumises à un champ magnétique $h_i$ (qui peut dépendre du site), de sorte que l'hamiltonien s'écrit :

$$H = H_0[\{\phi_i\}] - \sum_i h_i \phi_i$$

La fonction de partition canonique $Z$ et l'énergie libre $F$ sont définies par :

$$Z(\beta) = \int \prod_i d\phi_i e^{-\beta H[\{\phi_i\}]} \ \ , \ \ F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$$

I.1)a) Etablir la relation entre l'aimantation moyenne au site $i$ : $m_i \equiv \langle \phi_i \rangle$ et une dérivée partielle de F.

b) Etablir la relation entre la fonction de correlation $G_{ij} \equiv \langle \phi_i \phi_j \rangle - \langle \phi_i \rangle \langle \phi_j \rangle$ et les dérivees secondes de $F$.

I.2) On admet que la relation entre les $h_i$ et les $m_i$ peut être inversée, de sorte que les champs locaux $h_i$ peuvent être obtenus comme une fonction des aimantations locales :

$h_i = h_i[\{m_j\}]$. On construit alors la fonction des seules aimantations locales (transformée de Legendre de F) :

$$\Gamma[\{m_i\}] = F\left[\{h_j[\{m_i\}]\right] + \sum_j m_j h_j[\{m_i\}]$$

a) Relier $h_i[\{m_j\}]$ et $\frac{\partial \Gamma}{\partial m_i}$

b) Démontrer que :

$$[G^{-1}]_{ij} = \beta \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial m_i \partial m_j}$$

$G^{-1}$ désigne l'inverse de $G$, considérée comme une matrice dont les indices sont les sites du réseau.

## II. Champ moyen : développement de Landau

Dans le cadre d'une approximation de champ moyen, on suppose que $\Gamma$ est donné par l'expression suivante :

$$\Gamma\left[\{m_i\}\right] = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} m_i m_j + \frac{T}{2}\sum_i m_i^2 + \frac{e_4}{4!}\sum_i m_i^4 + \frac{e_6}{6!}\sum_i m_i^6$$

Dans cette expression, $T$ est la température (la constante de Boltzmann est prise égale à l'unité), et $e_4, e_6$ sont des coefficients dont on négligera la dépendance en température. On supposera de plus $e_6 > 0$, mais le signe de $e_4$ peut être quelconque. $J_{ij}$ est une matrice de constantes d'interactions, *qui ne se limite pas nécessairement aux sites plus proches voisins*, mais supposée invariante par translation : $J_{ij} = J(R_{ij})$ avec $R_{ij} = ||\vec{R}_i - \vec{R}_j||$.

a) Préciser la dimension des constantes $J_{ij}$, $e_4$ et $e_6$.

b) On applique au système un champ magnétique uniforme $h_i = h$. Etablir la relation entre $h$ et l'aimantation moyenne par site $m$.

c) Donner l'expression de l'inverse de la matrice des corrélations $[G^{-1}]_{ij}$

d) En déduire l'expression de la transformée de Fourier de la fonction de corrélation $G(\vec{q})$. On exprimera le résultat en terme de la transformée de Fourier :

$$J_{\vec{q}} = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} J(\vec{R})$$

On précisera en particulier l'expression de $G(\vec{q})$ dans la phase paramagnétique $m = 0$.

## III. Nature de la transition de phase

**Note :** Dans les parties III, IV et V, on suppose que le développement de $J_{\vec{q}}$ pour $q$ petit a la forme suivante : $J_q = J_0 - J_2 q^2 + \cdots$.

III.1) On suppose dans cette question $e_4 > 0$.

Ce cas est celui considéré dans le cours : on se contentera donc de démonstrations aussi brèves que possible.

a) Montrer l'existence d'une transition de phase du second ordre (pour $h = 0$), à une température critique $T_c$ qu'on calculera en fonction de la constante $J_0 = J_{\vec{q}=\vec{0}}$.

b) Calculer les exposants critiques $\beta$, $\gamma$ et $\delta$

c) Calculer les exposants critiques $\eta$ et $\nu$ associés au comportement de la fonction de corrélation (pour ce dernier, on se contentera d'une analyse pour $T > T_c$).

III.2) On suppose dans cette question $e_4 = 0$ ("point tricritique").

Reprendre l'analyse précédente dans ce cas. Calculer les exposants critiques $\alpha, \beta, \gamma$, puis $\nu$ et $\eta$.

### IV. Validité du champ moyen : critère de Ginzburg

1) En utilisant l'argument de Ginzburg décrit dans le cours, donner la condition sur la dimension $d$ et les valeurs de champ moyen des exposants $\beta$, $\nu$ et $\eta$ pour que l'approximation de champ moyen soit justifiée.

2) Appliquer ce critère aux deux cas précédents ($e_4 > 0$ et $e_4 = 0$) en précisant pour chacun la dimension critique supérieure au dessus de laquelle le champ moyen est justifié.

### V. Le cas $e_4 < 0$ : transition du premier ordre

1) Donner l'allure de la fonction $h(m)$ dans le cas $e_4 < 0$

2) En étudiant cette fonction, montrer que la transition de phase est maintenant *du premier ordre*, c'est à dire que l'aimantation se développe discontinûment à $T = T_c$. Calculer $T_c$ et le saut d'aimantation (i.e sa valeur pour $T \to T_c^-$).

3) La susceptibilité et la longuer de corrélation divergent-elles à $T = T_c$ ?

### VI. Interactions à longue portée

On suppose que l'interaction se comporte comme une loi de puissance à grande distance :

$$J(R) \sim J \left(\frac{a}{R}\right)^{d+\sigma} \quad (R \to \infty)$$

avec $\sigma > 0$.

1) Donner la condition sur $\sigma$ pour que le comportement $J_q = J_0 - J_2 q^2 + \cdots$ postulé plus haut soit vérifié, et relier la constante $J_2$ à la fonction $J(R)$ dans ce cas.

2) On se place dans le cas où cette condition *n'est pas vérifiée* (on désignera ce cas par le terme "d'interactions à longue portée").

a) En passant à la limite continue, exprimer $J_0 - J_q$ comme une intégrale

b) Effectuer dans cette intégrale le changement de variable $x = qR$ et en déduire le comportement, pour $q \to 0$ :

$$J_0 - J_q = J_1 q^\sigma + \cdots$$

On donnera l'expression de la constante $J_1$ comme une intégrale (qu'on ne cherchera pas à calculer mais dont on vérifiera la convergence).

3) a) Calculer la valeur de champ moyen des exposants critiques $\beta, \gamma, \delta$, dans le cas d'interactions à longue portée.

b) Même question pour $\nu$ et $\eta$. Pour répondre à cette question, on ne cherchera pas à faire un calcul d'intégrale, mais on se rappelera simplement que la fonction de corrélation près du point critique obéit à une forme d'échelle : $G(q) = q^{-2+\eta} g(q\xi)$ avec $\xi \sim (T - T_c)^{-\nu}$.

c) Comment décroît la fonction de corrélation $G(R)$ au point critique ? Comparer à la décroissance des interactions $J(R)$.

4) a) Appliquer le critère de Ginzburg et préciser comment la dimension critique supérieure dépend de $\sigma$, pour tout $\sigma > 0$.

b) Application : comment les interactions doivent-elles décroitre pour que l'approximation de champ moyen soit valable en $d = 3$ ?

## 4.8 Problème 8 : Effet des fluctuations thermiques et du désordre sur l'ordre cristallin.

### 4.8.1 Enoncé

Examen du 29 Mars 2004

*Note : la longueur de l'énoncé ne présage en rien de la difficulté du problème, qu'il devrait être possible de faire entièrement dans le temps imparti*

On considère dans ce problème un cristal de N atomes, repérés par leurs positions $\vec{R}_n$ $(n = 1, \cdots, N)$. On définit la densité locale dans le cristal par :

$$\rho(\vec{r}) \equiv \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Le facteur de structure de structure du cristal, qui peut par exemple être mesuré par diffraction des rayons X ou de neutrons, est défini par :

$$S(\vec{q}) \equiv \langle \rho_{\vec{q}}\, \rho_{-\vec{q}} \rangle = \sum_{nm} \langle e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_m)} \rangle$$

où $\rho_{\vec{q}} = \int d^d r e^{i\vec{q}\vec{r}} \rho(\vec{r})$ est la transformée de Fourier de $\rho(\vec{r})$. Dans cette expression, la valeur moyenne est prise sur toutes les configurations possibles des positions $\vec{R}_n$, lorsque celles-ci peuvent fluctuer.

### I. Préliminaires : cristal parfait

On considère ici un cristal périodique parfait, où les atomes occupent les noeuds $\vec{R}_n^0$ d'un réseau régulier cubique de dimension $d$ et de maille $a$. On dénote $S_0(\vec{q})$ le facteur de structure de ce cristal parfait (dans ce cas la valeur moyenne est inutile).

I.1 En utilisant la définition de $S_0(\vec{q})$, évaluer les deux quantités :

$$S_0(\vec{q} = \vec{0}) \text{ et } \int_{BZ} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} S_0(\vec{q})$$

On notera que dans la seconde expression, l'intégrale est restreinte à la zone de Brillouin $\vec{q} \in [-\pi/a, \pi/a]^d$.

I.2 On considère d'abord le cas unidimensionnel, avec $R_n^0 = n\, a$ $(n = 0, \cdots, N-1)$. Calculer $\rho_{\vec{q}}$ et en déduire le facteur de structure $S_0(\vec{q})$.

I.3 Montrer que ce calcul se généralise de manière très simple en dimension quelconque.

I.4 Faire un schema de $S_0(\vec{q})$ dans le cas $d = 1$.

I.5 Montrer que $S_0(\vec{q})$ présente des pics (de Bragg) très étroits centrés sur les vecteurs d'onde du réseau réciproque définis par : $\vec{K} = \frac{2\pi}{a}\vec{P}$ où $\vec{P}$ est un vecteur à coordonnées entières.

I.6 Justifier brièvement (cf aussi I.1) que dans la limite d'un grand nombre d'atomes $N \to \infty$, $S_0(\vec{q})$ se réduità :

$$S_0(\vec{q}) = \Omega \rho_0^2 \sum_{\vec{K}} \delta(\vec{q} - \vec{K}) \qquad (4.163)$$

où la somme porte sur les vecteurs du réseau réciproque, $\Omega = N a^d$ est le volume du système et $\rho_0 = N/\Omega$ est la densité moyenne du cristal.

### II. Fluctuations des positions : considérations générales

Dans toute la suite du problème, on s'intéresse à des cas où les positions des atomes sont déplacées par rapport aux valeurs $\vec{R}_n^0$ du cristal parfait. On note $\vec{u}_n$ les déplacements :

$$\vec{R}_n = \vec{R}_n^0 + \vec{u}_n$$

De sorte que :

$$S(\vec{q}) = \sum_{nm} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_m^0)} \langle e^{i\vec{q}\cdot(\vec{u}_n - \vec{u}_m)} \rangle$$

II.1 On considère un vecteur d'onde proche d'un vecteur particulier du réseau réciproque. On pose ainsi : $\vec{q} = \vec{K} + \vec{k}$ avec $|\vec{k}| \ll |\vec{K}|$. On admettra alors : i) qu'on peut négliger la dépendance en $\vec{k}$ de la fonction de corrélation figurant dans l'expression de $S(\vec{q})$ et que ii) on peut passer à la limite continue, de sorte que les déplacements sont décrits par un champ $\vec{u}(\vec{x})$ dépendant de la variable continue $\vec{x}$.

a) Justifier, sous ces hypothèses, l'expression :

$$S(\vec{K} + \vec{k}\,) \simeq \Omega \rho_0^2 \int d^d x \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \, C_{\vec{K}}(\vec{x}) \tag{4.164}$$

avec :

$$C_{\vec{K}}(\vec{x}) = \langle e^{i\vec{K}\cdot(\vec{u}(\vec{0} - \vec{u}(\vec{x}))} \rangle$$

b) Vérifier que cette expression est bien cohérente avec (4.163) dans le cas d'un cristal parfait.

II.2 On considère dans cette question les conséquences de l'équation (4.164) pour différents comportements de la fonction $C_{\vec{K}}(\vec{x})$ à grande distance

a) On suppose que $C_{\vec{K}}(\vec{x})$ tends vers une constante $C_{\vec{K}}(\infty)$ à grande distance. Montrer qu'il subsiste des pics de Bragg, mais avec un poids réduit, c'est à dire que $S(\vec{q})$ s'écrit :

$$S(\vec{K} + \vec{k}\,) = \Omega \rho_0^2 \, Z_K \, \delta(\vec{k}) + S_{reg}(\vec{k})$$

où $S_{reg}$ est une fonction qui reste régulière quand $k \to 0$. On donnera l'expression de la constante $Z_K$1L'ordre cristallin à longue portée est donc préservé dans ce cas.

b) On suppose que $C_{\vec{K}}(\vec{x})$ décroît en loi de puissance $\sim 1/|x|^\alpha$. Etudier le comportement de $S(\vec{K} + \vec{k}\,)$ pour $k \to 0$ et montrer qu'il existe deux cas selon la valeur de $\alpha$. Dans quel cas l'ordre cristallin (i.e le pic de Bragg) est-il détruit ?

c) Qu'en est il du cas où $C_{\vec{K}}(\vec{x})$ décroît plus rapidement qu'une loi de puissance ? Préciser la forme de $S(\vec{K} + \vec{k}\,)$ pour $C_{\vec{K}}(\vec{x}) \sim \exp(-|x|/\xi)$ (on pourra se limiter à un calcul explicite pour $d = 1$).

II.3 On suppose que les déplacements $\vec{u}(\vec{x})$ sont des variables aléatoires décrits par une mesure Gaussienne. On note $B(\vec{x})$ la fonction de corrélation :

$$B(\vec{x}) \equiv \langle (\vec{u}(\vec{0}\,) - \vec{u}(\vec{x}))^2 \rangle$$

Relier l'expression de la mesure Gaussienne à $B(\vec{x})$ et démontrer que :

$$C_{\vec{K}}(\vec{x}) = e^{-\frac{K^2}{2} B(\vec{x} - \vec{x}')} \tag{4.165}$$

### III. Fluctuations thermiques

On considère dans cette question que les déplacements des atomes sont régis par l'hamiltonien élastique :

$$H_{el} = \frac{\gamma}{2} \int d^d x \, (\nabla u)^2$$

et que le cristal est en équilibre thermique à la température $T = 1/\beta$ (mesure $e^{-\beta H}/Z$).

III. a) Rappeler l'expression de $B(\vec{x})$ obtenue dans le cours.

III. b) Rappeler les comportements à $x \to \infty$ de $B(\vec{x})$, selon la dimension, et dire si l'ordre cristallin est ou non détruit par les fluctuations thermiques.

### IV. Effet du désordre : modèle de Larkin

On ajoute au terme élastique de la section précédente un terme :

$$H_f = \int d^d x \, f(\vec{x}) \, u(\vec{x})$$

Ce terme décrit l'effet d'une force d'ancrage $f(\vec{x})$ due à des impuretés. Cette force est elle même une variable aléatoire, tirée en chaque point $\vec{x}$ selon une distribution que l'on précisera ci-dessous.

IV.1 On considère une configuration donnée $\{f(\vec{x})\}$ de la force. En effectuant un changement de variables, montrer que la fonction de corrélation des déplacements vérifie :

$$B(\vec{q}) = B_{f=0}(\vec{q}) + \phi(\vec{q}) \, f_{\vec{q}} f_{-\vec{q}} \tag{4.166}$$

Dans cette expression, $B_{f=0}$ désigne la fonction de corrélation en l'absence de force, $f_{\vec{q}}$ désigne les composantes de Fourier de $f(\vec{x})$ et $\phi(\vec{q})$ est une fonction dont on donnera l'expression.

IV.2 La force aléatoire est tirée selon la mesure de probabilité :

$$P[f] = C \, \exp\left(-\frac{1}{2\Delta} \int d^d x \, f(\vec{x})^2\right)$$

où $C$ est une constante de normalisation.

Donner l'expression de $\overline{f_{\vec{q}} f_{-\vec{q}}}$ et celle de $\overline{B(\vec{q})}$, où $\overline{(...)}$ désigne la moyenne sur les configurations de la force aléatoire.

IV.3 En déduire pour quels cas la force aléatoire détruit l'ordre cristallin.

## 4.9 Problème 9 : Marches aléatoires avec pièges, Modèle $O(n)$

### 4.9.1 Enoncé

Examen du 31 Mars 2005

*Les deux exercices sont indépendants : il est recommandé de diviser son temps de manière approximativement égale entre les deux.*

## Exercice 1 : Marche aléatoire avec pièges

*Important : Les questions 1) à 3) de cet exercice ne nécessitent aucun calcul !*

On considère dans cet exercice un marcheur sur un réseau unidimensionnel. Chaque fois qu'il arrive sur un site du réseau, le marcheur attend un temps $\tau$ avant d'effectuer un nouveau saut. $\tau$ est une variable aléatoire tirée selon une loi de probabilité de densité $\psi(\tau)$ (normalisée selon $\int_0^\infty d\tau\psi(\tau) = 1$). Le "temps d'attente" $\tau$ est retiré à chaque fois, de manière indépendante de l'instant et du site considéré. Chaque saut s'effectue vers l'un des deux sites voisins, avec une probabilité égale à 1/2. Le marcheur se trouve en $x = 0$ à l'instant $t = 0$ pris comme origine.

1) On note $N$ le nombre de sauts effectués par le marcheur. Exprimer comme des sommes de variables aléatoires indépendantes :

- la position $x$ du marcheur
- la durée totale $t$ qui s'est écoulée lorsque le N-iéme saut vient juste d'être effectué

2.a) Quel est le comportement typique de $x$ en fonction de $N$ ?
b) On suppose que le temps d'attente moyen est fini : $\langle\tau\rangle \equiv \int d\tau\psi(\tau)\tau < \infty$. Quel est le comportement typique de $t$ en fonction de $N$ ?
c) En déduire que le marcheur diffuse de manière Brownienne, et dire comment la constante de diffusion dépend de $\langle\tau\rangle$.

3) On suppose maintenant que $\psi(\tau) \sim 1/\tau^{1+\mu}$ pour $\tau \to \infty$, avec $0 < \mu < 1$, de sorte que le temps moyen d'attente est infini. On admet que la somme de $N$ variables aléatoires tirées selon $\psi(\tau)$ se comporte alors typiquement comme $N^{1/\mu}$. En déduire la loi de diffusion du marcheur, et interpréter le résultat.

4) On cherche maintenant à effectuer un traitement plus précis du problème, et à calculer la probabilité $P(x,t)$ de trouver le marcheur au site $x$ à l'instant $t$. On notera :

- $Q(x;N)$ la loi de probabilité de la position $x$, étant donné le nombre de sauts $N$ effectués.

- $R(N;t)$ la loi de probabilité du nombre de sauts $N$, étant donnée la durée totale $t$.

a) Préciser, pour chacune des lois $P, Q, R$, la condition exprimant sa normalisation.

b) Exprimer $P(x,t)$ comme une somme (infinie) faisant intervenir $Q$ et $R$.

5) Dans cette question, on va calculer $R$.

a) Ecrire l'expression de $R(N=0;t)$. En déduire, en utilisant les propriétés données en Appendice, la transformée de Laplace $\hat{R}(N=0;s)$

b) Ecrire une relation intégrale entre $R(N;t)$ et $R(N-1;t')$. En déduire, toujours grâce aux formules de l'Appendice, une relation entre $\hat{R}(N;s)$ et $\hat{R}(N-1;s)$

c) En utilisant a) et b), en déduire finalement l'expression de la transformée de Laplace $\hat{R}(N;s)$.

d) Vérifier que la condition de normalisation trouvée au 4.a) est bien satisfaite par l'expression que vous venez de trouver.

6) a) Donner l'expression de la fonction génératrice $\sum_{N=0}^{\infty} \lambda^N \tilde{Q}(k;N)$, où $\tilde{Q}$ désigne la transformée de Fourier par rapport à $x$ (il s'agit d'une question de cours !).

b) En substituant l'expression trouvée au 5.c) dans la somme trouvée au 4.b), et en utilisant l'expression de cette fonction génératrice, déduire finalement que l'expression de la transformée de Fourier (par rapport à $x$) et de Laplace (par rapport à $t$) de $P(x,t)$ s'écrit :

$$\hat{\tilde{P}}(k,s) = \frac{1}{s}\frac{1-\hat{\psi}(s)}{1-\hat{\psi}(s)\cos k} \tag{4.167}$$

Vérifier que cette expression assure bien la normalisation de $P$.

7) a) Dans le cas où $\langle\tau\rangle < \infty$, donner le développement de $\hat{\tilde{P}}(k,s)$ pour $k$ et $s$ petits. En déduire (en utilisant l'Appendice) la forme asymptotique de $P(x,t)$ à long temps. Retrouvez-vous les résultats de la questions 2) ?

b) Dans le cas considéré au 3), on admettra que pour $s$ petit, $\hat{\psi}(s)$ a le comportement suivant : $\hat{\psi}(s) = 1 - cs^{\mu} + \cdots$. En déduire que $P(x,t)$ satisfait à temps longs une forme d'échelle : $P(x,t) \sim 1/t^{\nu} f(|x|/t^{\nu})$, où $\nu$ est un exposant que l'on calculera.

### Appendice de l'exercice 1 : transformée de Laplace

Etant donnée une fonction $f(t)$ définie pour $t > 0$, et décroissant assez vite à l'infini, on définit sa transformée de Laplace par :

$$\hat{f}(s) \equiv \int_0^{+\infty} dt e^{-st} f(t) \tag{4.168}$$

On sera amené à utiliser les propriétés suivantes (faciles à démontrer, mais une démonstration n'est pas demandée) :

- P1 : Transformée de Laplace d'une exponentielle et d'une constante : si $f_\alpha(t) = e^{-\alpha t}$, $\hat{f}_\alpha(s) = 1/(\alpha + s)$. En particulier pour une fonction constante : $\hat{f}_0 = 1/s$
- P2 : Si $g(t) = \int_t^\infty dt' f(t')$, alors : $\hat{g}(s) = [1 - \hat{f}(s)]/s$
- P3 : Convolution. Si $h(t) = \int_0^t dt' f(t') g(t - t')$, alors : $\hat{h}(s) = \hat{f}(s)\hat{g}(s)$

## Exercice 2 : Solution du modèle $O(n)$ dans la limite $n \to \infty$

On considère dans cet exercice le modèle $O(n)$ sur un réseau cubique de dimension $d$. On rappelle le hamiltonien de ce modèle :

$$H = -\sum_{<ij>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \Delta_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \tag{4.169}$$

Dans cette expression, les $\vec{S}_i$ sont des vecteurs à $n$-composantes, de norme $\vec{S}_i^2 = n$. La somme porte sur les sites plus proches voisins dans la première écriture. Dans la seconde, la somme sur les sites est libre, et $\Delta_{ij} = 1$ si les sites sont plus proches voisins, $= 0$ sinon. La constante d'échange a été incluse dans la définition de $\beta$. La fonction de partition du modèle s'écrit donc :

$$Z = \int \prod_i [d^n \vec{S}_i \delta(\vec{S}_i^2 - n)] e^{\beta \sum_{<ij>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j} \tag{4.170}$$

1) On introduit en chaque site $j$ une variable $\lambda_j$ et on utilise l'identité :

$$\delta(\vec{S}_j^2 - n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_j}{2\pi} e^{-i\lambda_j (\vec{S}_j^2 - n)} \tag{4.171}$$

En déduire que la fonction de partition peut se mettre sous la forme suivante (à une constante multiplicative près qu'on ne calculera pas) :

$$Z \propto \int \prod_j d\lambda_j \exp\left( n \left[ i \sum_j \lambda_j - \frac{1}{2} Tr \ln Q \right] \right) \tag{4.172}$$

où $Q_{ij}$ est une matrice dont on donnera l'expression.

2) Dans la limite $n \to \infty$, l'intégrale (4.172) peut être évaluée par la *méthode du col* : elle est dominée par la configuration des $\lambda_i$ qui rend stationnaire l'argument de l'exponentielle. Ecrire la condition qui traduit cette stationarité.

Note : On rappelle que, pour toute matrice $M$ : $\frac{\partial}{\partial M_{ij}} Tr \ln M = [M^{-1}]_{ij}$

3) On *admettra* que la configuration $\lambda_i^*$ qui rend l'intégrand stationnaire satisfait les propriétés suivantes :

- Les $\lambda_i^*$ sont tous égaux, indépendants du site considéré : $\lambda_i^* = \lambda^*$.
- $\lambda^*$ est *imaginaire pur*

On posera alors : $2(i\lambda^* - d\beta) \equiv \beta\xi^{-2}$. Montrer que la condition de stationarité qui détermine le paramètre $\xi$ s'écrit :

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{\xi^{-2} + 2\sum_{\mu=1}^{d}(1 - \cos k_\mu)} = \beta \tag{4.173}$$

Dans cette expression, l'intégrale porte sur la première zone de Brillouin du réseau cubique : $\vec{k} \in [-\pi, +\pi]^d$ et la maille du réseau est $a = 1$. $\xi$ peut être interprétée comme la longueur de corrélation du modèle, comme on le montrera à la dernière question.

4) a) Donner le comportement de la solution $\xi(\beta)$ de l'équation (4.173) dans la limite haute température $\beta \to 0$. Interpréter.

b) Montrer que $\xi(\beta)$ diverge pour $\beta = \beta_c$. Donner l'expression de $\beta_c$ et montrer qu'il y a deux cas : $\beta_c = \infty$, ou $\beta_c < \infty$ selon la dimension $d$. Interpréter.

c) En faisant la différence entre l'expression (4.173) et celle de $\beta_c$, donner le comportement de $\xi$ pour $\beta \to \beta_c$. En déduire la valeur de l'exposant critique $\nu$, selon la dimension $d$. Interpréter.

5) a) En ajoutant un terme $\sum_i \vec{h}_i \cdot \vec{S}_i$ dans l'hamiltonien, et en prenant des dérivées par rapport aux champs $\vec{h}_i$, montrer que la fonction de corrélation $G_{ij}$ est égale à la matrice $Q_{ij}$ au point stationnaire.

b) En déduire l'expression de la transformée de Fourier $G(\vec{k})$. Montrer que $\xi$ est la longueur de corrélation. Que vaut l'exposant $\eta$ ?

c) On rappelle que la susceptibilité magnétique est reliée à la fonction de corrélation par la relation fluctuation-dissipation : $\chi \propto G(\vec{k} = \vec{0})$. En déduire l'exposant $\gamma$, et vérifier la relation entre exposants $\gamma = \nu(2 - \eta)$.

## 4.10 Problème 10 : Percolation 2D, modèle de Potts 1D

### 4.10.1 Enoncé

Examen du 30 Mars 2006, durée de l'épreuve : 3h00. Les différentes parties sont indépendantes.

**I-Percolation bidimensionnelle et exposants critiques**

On considère un réseau triangulaire de sites atomiques. Chacun des sites, figurés en noir sur la figure 1, est occupé par un atome avec la probabilité $p$. On peut regrouper des triangles élémentaires pour former des blocs triangulaires, repérés par les points rouges sur la figure. Ils forment également un réseau triangulaire avec une maille différente. Un bloc est déclaré "occupé" si au moins deux sites du réseau original sont occupés. Cette formation de blocs peut être itérée jusqu'à atteindre la taille macroscopique. Ceci peut être un modèle de conductivité des solides. Le solide est déclaré conducteur à l'échelle macroscopique si le site macroscopique qui englobe le solide tout entier est dans l'état "occupé".

1) Donner le flot de renormalisation de la probabilité $p$. (c'est à dire : quelle est la probabilité $p'$ qu'un bloc soit occupé en fonction de $p$ ?)

2) Quels sont les points fixes du flot ? quelle est la nature des phases décrites par les points fixes ?

3) Par quel facteur $b$ change-t-on la longueur de corrélation à chaque itération du groupe de renormalisation ?

4) Donner l'exposant critique de la divergence de la longueur de corrélation près de la transition de phase.

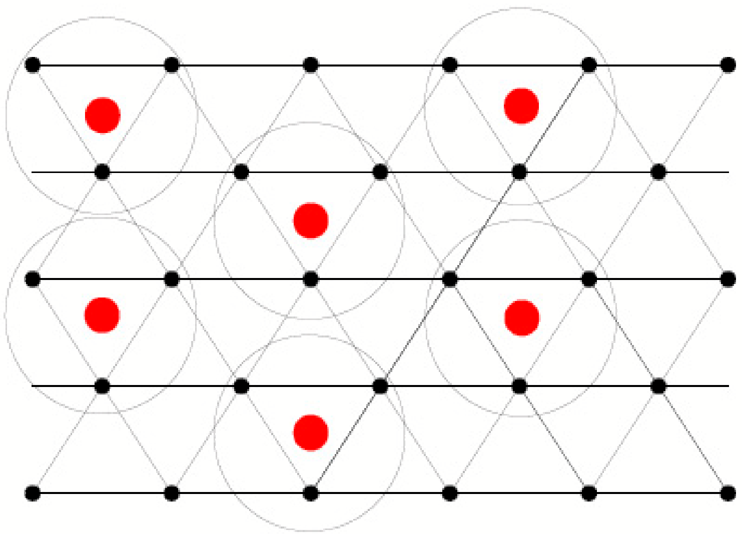


FIG. 4.3 – Réseau des sites atomiques. Les superblocs sont définis par les points noirs de grande taille.

**II-Modèle de Potts unidimensionnel : traitement par décimation**

Le modèle de Potts est une généralisation du modèle d'Ising. Chaque spin peut pointer dans $n \geq 3$ directions. Ces directions sont notées $s = 1, \ldots, n$. L'énergie du modèle de Potts est donnée par :

$$\mathcal{E} = -\sum_i \left( J\delta_{s_i,s_{i+1}} + \frac{h}{2}(\delta_{s_i,1} + \delta_{s_{i+1},1}) \right), \tag{4.174}$$

où on utilise la notation de Kronecker :

$$\delta_{s_1,s_2} = \begin{cases} 1 & s_1 = s_2 \\ 0 & s_1 \neq s_2 \end{cases} \tag{4.175}$$

1) Montrer que le modèle de Potts $n = 2$ est simplement le modèle d'Ising :

$$\mathcal{E}_{Ising} = -\sum_i \left( J' S_i S_{i+1} + \frac{h'}{2}(S_i + S_{i+1}) \right). \tag{4.176}$$

Donner $J'$ et $h'$ en fonction de $J$ et $h$.

2) Tout comme le modèle d'Ising, le modèle de Potts peut être traité par renormalisation. Pour obtenir les équations du flot, nous écrivons la fonction de partition sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{s_i\}} \ldots \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}_i}\, \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}_{i+1}}\, \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}_{i+2}} \ldots \\ &= \sum_{\{s_i\},\,\mathrm{i\,impair}} \ldots \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}'_i}\, \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}'_{i+2}} \ldots \end{aligned} \tag{4.177}$$

avec une énergie renormalisée donnée par :

$$\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}'(s_i,s_{i+2})} = \sum_{\{s_{i+1}\}} \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}_i}\, \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{E}_{i+1}}, \tag{4.178}$$

avec la notation :

$$\mathcal{E}_i = -J\delta_{s_i,s_{i+1}} - \frac{h}{2}(\delta_{s_i,1} + \delta_{s_{i+1},1}). \tag{4.179}$$

En considérant trois sites avec valeurs $s_1, s_2, s_3$ trouver l'énergie renormalisée (on obtient quatre équations). Par cette opération de renormalisation, l'énergie s'est enrichie d'une troisième interaction :

$$\mathcal{E}'_1(s_1, s_3) = C' - J'\delta_{s_1,s_3} - \frac{h'}{2}(\delta_{s_1,1} + \delta_{s_{i+1},1}) - K'\delta_{s_1,s_3}\delta_{s_1,1}. \tag{4.180}$$

Comment trouve-t-on $J', h', K'$ en fonction des constantes $J, h, K$ ? si on inclut le terme $K$ dans l'énergie de départ, quelles sont les modifications ?

3) Que deviennent les équations de flot quand $h = K = 0$ ?

4) Montrer que pour $n = 3$ états ainsi que pour n très grand les seuls points fixes sont $\beta J = 0$ et $\beta J = \infty$. Montrer que le point fixe $\beta J = 0$ est instable. Discuter la physique de ce modèle.

**III- Deux courts exercices sur les marches aléatoires. -** *Ces exercices sont en principe faciles et auront donc un poids faible dans le barême*-

**Exercice III.1 : Relation d'Einstein**

On considère une marche aléatoire à une dimension, sur un réseau de pas $a$. A chaque pas de temps $\tau$, le marcheur peut sauter sur le site voisin de droite avec une probabilité $p_+$ ou sur celui de gauche avec une probabilité $p_-$, données par :

$$p_+ = \frac{e^{aF/2kT}}{2\mathrm{ch(aF/2kT)}} \ , \ p_- = \frac{e^{-aF/2kT}}{2\mathrm{ch(aF/2kT)}} \tag{4.181}$$

III.1.a Dans cette expression, $T$ désigne la température et $k$ la constante de Boltzmann. En pensant au cas d'un polymère (Brownien) en équilibre à la température $T$, justifier physiquement ces expressions et donner l'interprétation physique de $F$.

III.1.b Calculer la vitesse moyenne $V$ et la constante de diffusion $D$ définies par :

$$< X(t) >= Vt \ , \ < [X(t)- < X(t) >]^2 >= 2Dt \tag{4.182}$$

III.1.c Dans la limite où $aF \ll kT$, donner l'expression qui relie $V$ et $D$ (relation d'Einstein). A quelle type de relation (vu dans l'étude des transitions de phase) cela vous fait-il penser ?

III.1.d Dans la limite opposée, donner l'expression de $V$ et $D$ et interpréter le résultat.

**Exercice III.2 : Coefficient de diffusion et corrélations des vitesses**

III.2.a On considère une marche aléatoire définies par des règles qui ne dépendent pas de l'instant considéré (c'est à dire qu'on a invariance par translation dans le temps). Montrer que sans aucune autre hypothèse, on a la relation :

$$< [\vec{X}(t) - \vec{X}(0)]^2 >= t \int_0^t C_V(t')dt' \tag{4.183}$$

où $C_V(t) =< \vec{V}(0).\vec{V}(t) >$ est la fonction de corrélation des vitesses du marcheur.

III.2.b. En déduire que pour que la marche soit Brownienne (i.e $< [\vec{X}(t) - \vec{X}(0)]^2 >= 2Dt$ pour $t$ grand), la fonction de corrélation des vitesses doit décroître assez vite, et établir la relation entre le coefficient de diffusion et $C_V$.

III.2.c On considére un traceur dans un fluide turbulent dont les corrélations de vitesse locales ont des corrélations à longue portée : $< V(0)V(X) >\sim |X|^{2/3}$ (c'est la loi de

Kolmogorov). En déduire, *par un argument physique auto-cohérent*, l'exposant de diffusion du traceur ($< \Delta X^2 > \sim t^{2\nu}$) dans ce milieu (diffusion de Richardson).

## 4.11 Problème 11 : Transitions dans les cristaux liquides

### 4.11.1 Enoncé

Examen du 30 mars 2007.

Les cristaux liquides furent découverts par F. Reinitzer en 1888. Ce sont des systèmes constitués de molécules complexes, que l'on représentera ici par des batonnets rigides (voir Figure 4.4), dans un solvant. Chaque batonnet peut être repéré par la position $\vec{r}$ de son centre et sa direction $\vec{u}$ (vecteur unitaire). Suivant les conditions chimiques et physiques (température, densité, ...) ces systèmes peuvent être dans différentes phases, classifiées par G. Friedel (X 1885) en 1922 :

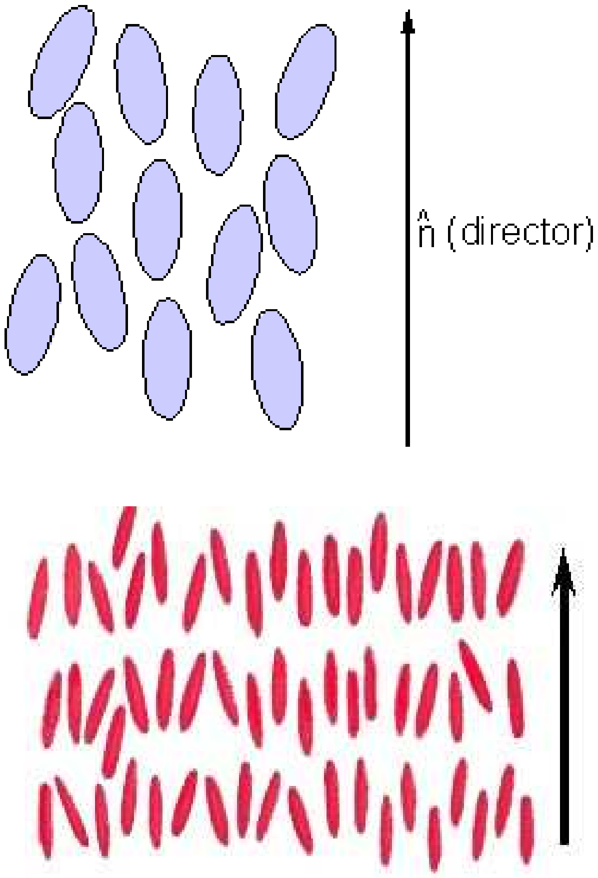
- la phase isotrope (I) où les batonnets n'ont pas de direction préférée est la plus désordonnée. La valeur moyenne de $\vec{u}$ est nulle et la densité de batonnets indépendante de $\vec{r}$.
- la phase nématique (N) où un ordre orientationnel existe (Figure 4.4 haut) car la valeur moyenne de $\vec{u}$ n'est pas nulle. Mais il n'y a pas d'ordre positionnel : la densité de batonnets est indépendante de $\vec{r}$.
- la phase smectique (S) où la valeur moyenne de $\vec{u}$ est non nulle et il y a un ordre positionnel : la densité de batonnets est périodique le long de la direction préférée et uniforme dans les directions transverses (Figure 4.4 bas). On appelle $d$ la distance entre deux 'couches' successives de batonnets.

Le but de cet examen est de déterminer le diagramme de phases des cristaux liquides par une approche variationnelle, puis d'étudier certaines propriétés de la phase S et de la transition N-S.

La section 1 est indépendante des autres sections ; les sections 3 et 4 sont indépendantes entre elles.

**Transition isotrope-nématique (IN)**

On représente les batonnets $i = 1, 2, \ldots, N$ par les positions $\vec{r}_i$ de leurs centres et leurs orientations $\vec{u}_i$ (vecteur unitaire). On choisit l'unité de longueur de manière à ce que chaque batonnet soit de longueur unité. On définit l'énergie d'une configuration du




Nématique

Smectique

FIG. 4.4 – Configurations typique d'un cristal liquide (système de batonnets) dans la phase nématique (N, figure du haut) et dans la phase smectique (S, figure du bas). La direction préférée est la verticale $\hat{n}$. Dans la phase isotrope (I) les batonnets n'ont pas de direction préférée.

système par

$$E[\{\vec{r}_i, \vec{u}_i\}] = \sum_{i<j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j; \vec{u}_i \cdot \vec{u}_j) \tag{4.184}$$

où le potentiel d'interaction est

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, \vec{u}_1 \cdot \vec{u}_2) = V_0 \, \frac{e^{-\frac{1}{2}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}}{(2\pi)^{3/2}} \left[1 - (\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_2)^2\right] . \tag{4.185}$$

**1a.** Justifier brièvement la dépendance de ce potentiel dans la distance et l'angle relatifs entre les batonnets. Dans la suite on choisira l'échelle des énergies pour avoir $V_0 = 1$.

**1b.** On considère l'espace des phases $\vec{r}, \vec{u}$ et on appelle $\rho(\vec{r}, \vec{u})$ la densité de batonnets dans cet espace : $\rho(\vec{r}, \vec{u})\, d\vec{r}\, d\vec{u}$ le nombre de batonnets dans un petit volume $d\vec{r}$ autour du point $\vec{r}$ et dans un petit angle solide $d\vec{u}$ autour de la direction $\vec{u}$. On écrit la fonction de partition du système des $N$ batonnets à température $T = \frac{1}{\beta}$ sous la forme

$$Z = \int d[\rho(\vec{r}, \vec{u})] \exp\Big(\mathcal{S}[\rho(\vec{r}, \vec{u})] - \beta\, \mathcal{E}[\rho(\vec{r}, \vec{u})]\Big) \tag{4.186}$$

où

$$\mathcal{E}[\rho(\vec{r}, \vec{u})] = \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{u} d\vec{r}' d\vec{u}'\, \rho(\vec{r}, \vec{u}) V(\vec{r} - \vec{r}', \vec{u} \cdot \vec{u}') \rho(\vec{r}', \vec{u}') \tag{4.187}$$

est l'énergie associée à un champ de densité $\rho$ et $\mathcal{S}$ son entropie. On supposera dans la suite que cette entropie est donnée par la formule

$$\mathcal{S}[\rho(\vec{r}, \vec{u})] = -\int d\vec{r} d\vec{u}\, \rho(\vec{r}, \vec{u}) \ln \rho(\vec{r}, \vec{u}) \ . \tag{4.188}$$

Quelle est l'origine de cette expression ? Quand est-elle valable ?

**1c.** On cherche maintenant à décrire la transition I-N à l'aide d'une approche variationnelle visant à minimiser l'énergie libre $\mathcal{F} = \mathcal{E} - T\,\mathcal{S}$. Une champ de densité possible est

$$\rho(\vec{r}, \vec{u}) = \rho_0\, \frac{\alpha + 1}{4\pi}\, |\cos\theta|^{\alpha} \ , \tag{4.189}$$

où $\theta$ est l'angle entre le vecteur $\vec{u}$ est la direction $z$ préférée dans la phase N, $\rho_0 = \frac{N}{L^3}$ est la densité moyenne de batonnets et $\alpha$ est un paramètre réel positif. A quelle phase correspond la valeur $\alpha = 0$ ? et les valeurs $\alpha > 0$ ? Vérifier que (4.189) est correctement normalisée.

**1d.** Montrer que l'entropie (4.188) du champ de densité (4.189) vaut, par unité de volume,

$$\mathcal{S}[\alpha] = -\rho_0 \ln \rho_0 + \rho_0\, \left[\ln\left(\frac{4\pi}{\alpha + 1}\right) + \frac{\alpha}{\alpha + 1}\right] \ . \tag{4.190}$$

**1e.** Montrer que l'énergie (4.187) du champ de densité (4.189) vaut, par unité de volume,

$$\mathcal{E}[\alpha] = \rho_0^2\, \frac{2\alpha + 3}{(\alpha + 3)^2} \ . \tag{4.191}$$

(*Indication : on calculera au préalable la valeur moyenne, avec la mesure (4.189), de $u_z^2$, puis on en déduira celle de $u_x^2$ et $u_y^2$.* )

**1f.** La fonction

$$\mathcal{F}[\alpha, t] = \frac{2\alpha + 3}{(\alpha + 3)^2} - t\left[\ln\left(\frac{4\pi}{\alpha + 1}\right) + \frac{\alpha}{\alpha + 1}\right] \tag{4.192}$$

est représentée sur la figure 4.5 pour différentes valeurs de $t$. En déduire qu'il existe une transition de phase I-N à une température critique $T_{IN}(\rho_0)$ dont on donnera la valeur en

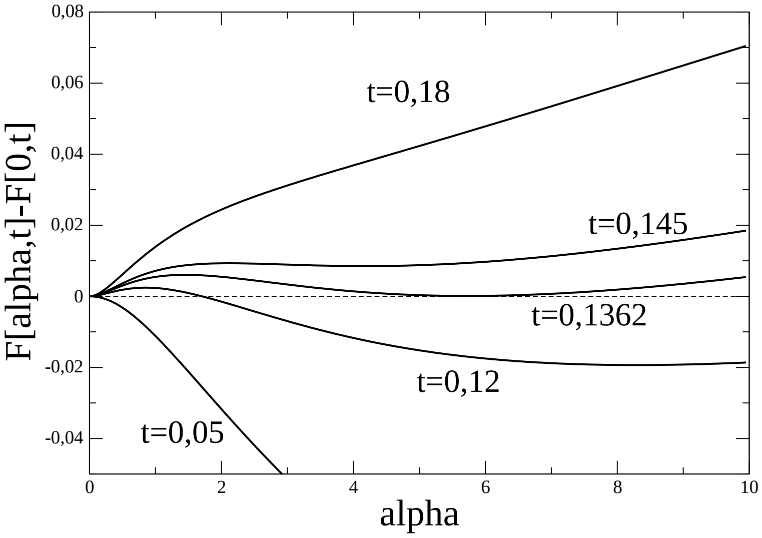



FIG. 4.5 – Fonction $\mathcal{F}[\alpha, t]$ (moins sa valeur en $\alpha = 0$) en fonction de $\alpha$ pour quelques valeurs de $t$ indiquées sur la figure.

fonction de la densité moyenne $\rho_0$. Quel est l'ordre de cette transition ? Tracer l'allure de la valeur de $\alpha$ en fonction de la température. Discuter brièvement la métastabilité des phases I et N pour des valeurs de la température inférieures et supérieures à $T_{IN}$ respectivement.

**Transition nématique - smectique (NS)**

L'approche variationnelle de la partie 1 ci-dessus peut être étendue à l'étude de la transition de phase N-S. Le champ de densité variationnel (4.189) est maintenant substitué par

$$\rho(\vec{r}, \vec{u}) = \rho_0 \, \frac{\alpha + 1}{4\pi} \, |\cos\theta|^{\alpha} \left(1 + \Delta \times G(\cos q_0 z)\right) \tag{4.193}$$

où $G$ est une fonction impaire fixée.

**2a.** Justifier brièvement cette hypothèse. Quel est le sens de $\Delta$ et de $q_0$ ?

**2b.** En répétant les calculs ci-dessus et pour une forme de $G$ adéquate on trouve que l'énergie libre du système à densité moyenne $\rho_0$ fixée est celle en l'absence de modulation spatiale ($\Delta = 0$) plus

$$\begin{aligned} F'(\Delta, T, q_0) \;&=\; A_2 \,(T - T_2(q_0))\, \Delta^2 + A_4 \,(T - T_4(q_0))\, \Delta^4 \\ &+\; A_6 \,\Delta^6 + O(\Delta^8) \;. \end{aligned} \tag{4.194}$$

Les coefficients $A_2, A_4, A_6$ sont des fonctions de $q_0$ et $T$ strictement positives. Les températures

$T_2$ et $T_4$ sont tracées sur la figure 4.6 en fonction du nombre d'onde $q_0$. En déduire le diagramme des phases I, N, S dans le plan $(1/q_0, T)$. Quel est l'ordre de la transition NS ?

**2c.** On suppose que le vecteur d'onde $q_0$ du système dans la phase S coincide avec celui $q^*$ du point du croisement des courbes $T_2, T_4$ (Figure 4.6). Un système vérifiant cette condition est appelé *tricritique*. On se place à la température $T = T_2(q^*) + t$. Le potentiel associée au paramètre d'ordre $\Delta$ vaut alors

$$F'(\Delta) = \bar{A}_2\, t\, \Delta^2 + \bar{A}_4\, t\, \Delta^4 + \bar{A}_6\, \Delta^6 + ... \tag{4.195}$$

où $\bar{A}_2, \bar{A}_4, \bar{A}_6$ sont des coefficients positifs. Calculer les exposants critiques $\beta_3$, $\alpha_3$, $\eta_3$, $\nu_3$ et $\gamma_3$ en champ moyen dans le cas $\bar{A}_4 = 0$. Pourquoi ces exposants restent-ils inchangés si $\bar{A}_4 > 0$ ? Montrer en utilisant le critère de Ginzburg que ces exposants restent corrects en dimension supérieure à trois.

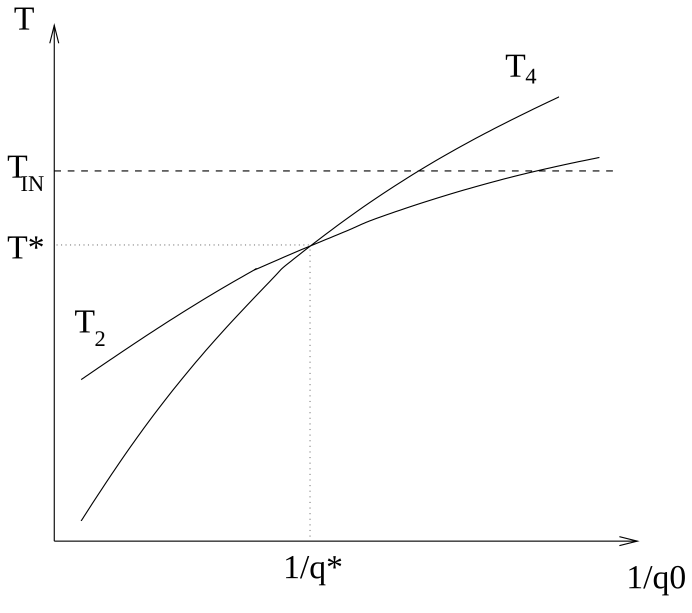



FIG. 4.6 – Températures $T_2$ et $T_4$ en fonction du nombre d'onde inverse $1/q_0$. Le point d'intersection a pour coordonnées $1/q^*, T^*$. On montre aussi la température $T_{IN}$ de la transition IN. La densité moyenne $\rho_0$ est ici fixée.

### Fluctuations dans la phase S

Dans la phase smectique le système est une superposition de couches d'épaisseur $d$ avec de petites fluctuations le long de l'axe $z$ représentées par un champ de déplacement

$\varphi(x, y, z)$. On associe à ce champ l'énergie élastique

$$E[\{\varphi(\vec{r})\}] = \int d\vec{r} \Big[ \frac{B}{2} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 + \frac{K}{2} \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right)^2 \Big] \,. \tag{4.196}$$

**3a.** Commenter brièvement l'expression de l'énergie $E$. On pose $\vec{r} = (\vec{r}_\perp, z)$ où $\vec{r}_\perp$ est un vecteur bidimensionnel dans le plan horizontal. Montrer que les fonctions de corrélation déplacement-déplacement à grande distance valent

$$\begin{aligned} \langle [\varphi(\vec{0}_\perp, z) - \varphi(\vec{0})]^2 \rangle &\sim \omega \ln z \,, \\ \langle [\varphi(\vec{r}_\perp, 0) - \varphi(\vec{0})]^2 \rangle &\sim 2\,\omega \ln r_\perp \,. \end{aligned} \tag{4.197}$$

avec

$$\omega = \frac{kT}{4\pi\sqrt{B\,K}} \,. \tag{4.198}$$

*(Indication : on rappelle que*

$$\int_0^\infty \frac{dy}{y^2 + x} = \int_0^\infty \frac{2\,y\,dy}{y^4 + x} = \frac{\pi}{2\sqrt{x}} \,.) \tag{4.199}$$

**3b.** On envoie des rayons X le long de l'axe $z$ avec un vecteur d'onde $\vec{q} = (0, 0, q_z)$ et on mesure l'intensité diffusée après interaction avec le smectique. Cette intensité est, à une constante multiplicative près, égale au facteur de structure

$$I(q_z) = \Big\langle \sum_{j,j'} e^{i\,\vec{q}.(\vec{r}_j - \vec{r}_{j'})} \Big\rangle \,, \tag{4.200}$$

où la somme porte sur les paires de batonnets et on fait la moyenne sur leurs positions. En écrivant que la position d'un batonnet est de la forme $\vec{r} \simeq (\vec{r}_\perp, \ell\,d + \varphi(\vec{r}_\perp, \ell\,d))$ où $\ell$ est un entier montrer que, par unité de volume,

$$I(q_z) = \int d\vec{r}_\perp \sum_\ell \exp \left( i\,q_z\,d\,\ell - \frac{1}{2} q_z^2 \,\langle [\varphi(\vec{r}_\perp, \ell\,d) - \varphi(\vec{0})]^2 \rangle \right) \,. \tag{4.201}$$

**3c.** On suppose que $q_z$ est proche de $q_0 = 2\pi/d$. Montrer que

$$I(q_z) \sim |q_z - q_0|^{\eta - 2} \tag{4.202}$$

où

$$\eta = \frac{q_0^2}{2}\,\omega \,. \tag{4.203}$$

Dans la pratique $\eta$ est de l'ordre de 0.1-0.4. Comparer le résultat théorique (4.202) avec les données expérimentales de la Figure 4.7.
*(Indication : on utilisera*

$$\sum_{\ell>0} \frac{\cos(\epsilon\,\ell)}{\ell^a} \sim \epsilon^{a-1} \tag{4.204}$$

*où la somme porte sur les entiers et $a<1$ et $\epsilon \to 0$.)*

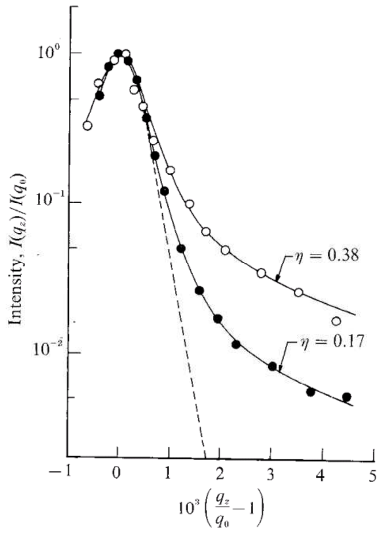



FIG. 4.7 – Intensité diffusée lorsque un smectique 80CB est bombardé par un faisceau X de vecteur d'onde $q_z$ en fonction de l'écart à $q_0 = 2\pi/d$. Les points sont les données expérimentales pour deux températures différentes, les courbes pleines montrent la prévision théorique (4.202). Les valeurs de $\eta$ correspondantes sont indiquées. La courbe pointillée est la limite de température nulle.

### Exposants critiques à la transition NS

**4a.** La Figure 4.8 montre les longueurs de corrélations le long de l'axe $z$ ($\xi^{\parallel}$) et dans le plan horizontal ($\xi^{\perp}$) ainsi que la susceptibilité $\chi$ en fonction de l'écart à la température de transition $T_c$ pour un cristal liquide appelé "40.8". Vérifier numériquement que $\xi^{\parallel}$ et $\xi^{\perp}$ divergent avec approximativement le même exposant $\nu$ et estimer les valeurs de $\nu$ et $\gamma$.

Une théorie de la transition NS continue, pas complètement certaine à ce jour, suggère que cette transition tombe dans la même classe d'universalité que la modèle XY, et a pour exposants

$$\gamma_2 \simeq 1.32, \nu_2 \simeq 0.67, \beta_2 \simeq 0.35, \eta_2 \simeq 0.04, \alpha_2 \simeq -0.01 \;.$$

Ces valeurs sont-elles compatibles avec la Figure 4.8 ? Vérifier les relations d'échelle entre ces exposants.

**4b.** Les valeurs des exposants ci-dessus sont valides partout sur la ligne de transition continue ($q_0 < q^*$) sauf au point tricritique ($q_0 = q^*$, Figure 4.6) où les exposants prennent les valeurs calculées dans la question **2c**.

Cependant si l'on est proche du point tricritique ($q_0 \approx q^*$) il faut aller à des températures extrèmement proches de la transition pour observer le vrai comportement critique du modèle XY et pas celui du point tricritique. Ce phénomène d'influence est appelé cross-over et se manifeste déjà en champ moyen. On considère l'énergie libre du paramètre d'ordre $\Delta$

$$F(\Delta) = t\,\Delta^2 + u\,\Delta^4 + \Delta^6 + ... \tag{4.205}$$

où $t$ est l'écart à la température crtique et $u \geq 0$ mesure l'écart au point tricritique ($u = 0$). Montrer que le phénomène de cross-over se manifeste pour $t \sim u^2$ (*Indication : calculer la valeur moyenne de* $\Delta$ *pour* $t < 0$).

**4c.** On se place maintenant en dimension trois et on considère la théorie des champs comportant un terme élastique pour $\Delta(\vec{r})$ et le potentiel local (4.205). Des arguments basés sur l'idée du groupe de renormalisation suggèrent que la fonction de corrélation $G$ à distance $r$ est décrite par le comportement d'échelle

$$G(r,t,u) = s^{-(d-2-\eta_3)}\; G\left(\frac{r}{s}, t\, s^{1/\nu_3}, u\, s^{\omega_3}\right)\ . \tag{4.206}$$

Pourquoi cette relation d'échelle fait-elle intervenir $\nu_3, \eta_3$ et pas $\nu_2, \eta_2$ ? Que vaut l'exposant $\omega_3$ en champ moyen ? Dessiner l'allure du flot de renormalisation dans le plan $(t, u)$. Que vaut la fonction $G(1, 0, u)$ lorsque $u \gg 1$ ?
Montrer que la relation (4.206) est compatible avec la relation

$$G(r,t,u) = r^{-(d-2-\eta_3)}\; g\left(x = \frac{r}{\xi(t,u)}, y\right) \tag{4.207}$$

où

$$y = u\, t^{-\nu_3\,\omega_3} \tag{4.208}$$

et

$$\xi(t,u) = t^{-\nu_3}\; K(u\, t^{-\nu_3\,\omega_3}) \tag{4.209}$$

définit une longueur de corrélation dépendant de $t$ et $u$. Comment se comporte $g(x, y)$ lorsque $x \to \infty$ et $y = 0$ ? Même question lorsque $x \to \infty$ et $y \to \infty$ ?

Tracer l'allure de la fonction d'échelle $K$. On déduire l'allure de l'exposant $\nu$ effectif

$$\nu_{eff}(t,u) = -\frac{d\ln\xi(t,u)}{d\ln t} \ . \tag{4.210}$$

**4d.** La table 4.11.1 donne des valeurs des exposants $\alpha$ et $\nu$ mesurés pour différents cristaux liquides. Les valeurs des exposants sont données à 10% près. Commenter ces données au vu des régimes critique, tricritique ou de cross-over étudiés ci-dessus.

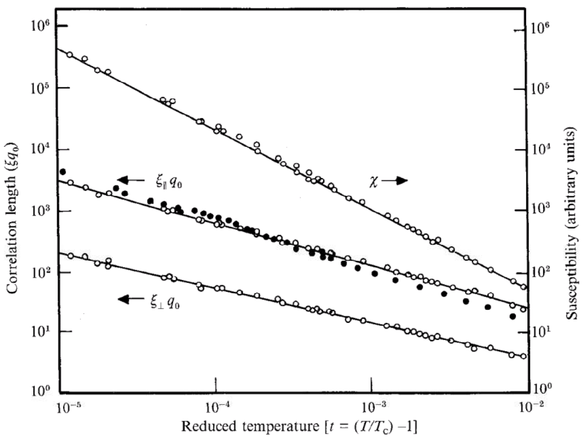



FIG. 4.8 – Longueurs de corrélation $\xi^\parallel$ et $\xi^\perp$, susceptibilité $\chi$ en fonction de l'écart entre la température $T$ et sa valeur critique $T_c$ pour le corps 40.8 (voir Table). Remarquer que l'échelle est logarithmique sur chaque axe. Le vecteur d'onde $q_0$ vaut environ 1 $nm^{-1}$.

| *corps* | $\alpha$ | $\nu$ | $T_{NS}/T_{IN}$ |
|---:|---:|---:|---:|
| T8 | 0.07 | 0.67 | 0.66 |
| T7 | 0.05 | 0.64 | 0.71 |
| 40.7 | -0.01 | 0.69 | 0.926 |
| 8S5 | 0. | 0.70 | 0.936 |
| CB00A | 0.15 | 0.63 | 0.94 |
| 40.8 | 0.15 | 0.61 | 0.958 |
| 80CB | 0.2 | 0.62 | 0.963 |
| 9S5 | 0.22 | 0.61 | 0.967 |
| 8CB | 0.31 | 0.56 | 0.977 |
| 10S5 | 0.45 | 0.54 | 0.983 |
| 9CB | 0.5 | 0.45 | 0.994 |

### 4.11.2 Corrigé

**1a.** Le potentiel entre batonnets décroît sur une distance de l'ordre de la taille d'un batonnet et est proportionnel au carré du sinus de leur angle relatif. On représente ainsi, de manière approchée, l'interaction stérique entre batonnets.

**1b.** L'expression de $\mathcal{S}$ correspond à celle d'un gaz parfait de batonnets ayant des degrés de libertés spatiaux et orientationnels. Cette expression n'est pas correcte en général à cause des interactions mais vaut seulement à faible densité $N \times (1/L)^3 = \rho_0 \ll 1$.

**1c.** La phase I correspond à $\alpha = 0$, la phase N à $\alpha > 0$. Lorsque $\alpha$ est grand la densité est piquée autour de $\theta = 0$ et $\theta = \pi$ comme sur la figure 1. On vérifie que

$$\begin{aligned}\int d\vec{r} d\vec{u} \rho(\vec{r}, \vec{u}) &= \rho_0 \, L^3 \times \frac{\alpha+1}{4\pi} \int_0^\pi 2\pi d\theta \sin\theta |\cos\theta|^\alpha \\ &= N \times \frac{\alpha+1}{2} \times 2 \int_0^1 dx \; x^\alpha = N \end{aligned} \tag{4.211}$$

**1d.** Pour obtenir l'entropie il suffit d'observer que

$$\int_0^1 dx \, x^\alpha \ln x^\alpha = \int_0^1 \frac{du}{\alpha+1} \ln u \times \frac{\alpha}{\alpha+1} = -\frac{\alpha}{(\alpha+1)^2} \tag{4.212}$$

avec le changement de variable $x \to u = x^{\alpha+1}$.

**1e.** On calcule

$$\langle u_z^2 \rangle = (\alpha+1) \int_0^1 dx \, x^\alpha \, x^2 = \frac{\alpha+1}{\alpha+3} \tag{4.213}$$

puis $\vec{u}^2 = 1$ donne

$$\langle u_x^2 \rangle = \langle u_y^2 \rangle = \frac{1}{\alpha+3} \tag{4.214}$$

Les valeurs moyennes croisées, par exemple $\langle u_x \, u_z \rangle$, sont toutes nulles par symétrie. Ensuite on remarque que, par unité de volume,

$$\mathcal{E} = \rho_0^2 \left( 1 - \sum_{i,j=x,y,z} \langle u_i \, u_j \rangle \right) \tag{4.215}$$

**1f.** L'énergie libre vaut $\rho_0^2 \times \mathcal{F}[\alpha, t]$ en $t = kT/\rho_0$ (plus des termes ne dépendant pas de $\alpha$). D'après la figure 2 à grand $t$ le seul minimum de $\mathcal{F}$ est en $\alpha = 0$ : le système est dans la phase isotrope. Un autre minimum local apparaît à $t \simeq 0.145$ : cela correspond à l'apparition d'une phase N métastable. Le minimum local en $\alpha > 0$ devient global pour $t < .1362$. Le système est donc dans la phase nématique pour des températures

$T < T_{IN}(\rho_0) = .1362\rho_0/k$. A cette température la transition est du premier ordre. La phase I reste métastable tant que $\mathcal{F}''(\alpha = 0, t) > 0$.

**2a.** La figure 1 montre que le système dans la phase smectique a des modulations de densité suivant l'axe $z$ de période $d$ (épaisseur d'une couche) donc $q_0 = 2\pi/d$. $\Delta$ est le paramètre variationnel égal à dans la phase N, et positif dans la phase S. La fonction $G$ étant impair la densité $\rho$ reste normalisée.

**2b.** Si la transition advient à $q_0 \geq q^*$ elle est du deuxième ordre avec $\Delta = 0$ à la transition : $T_{NS} = T_2$. Si $q_0 < q^*$ à la transition on retrouve le scénario de la transition IN : la transition NS est alors du premier ordre et $T_2 < T_{NS} < T_4$.

**2c.** Pour que les deux termes dans $F'$ soient du même ordre on doit avoir $\Delta^4 \sim t$ c'est-à-dire $\beta_3 = \frac{1}{4}$. $F'$ vaut alors $t^{\frac{3}{2}} = t^{2-\alpha_3}$ d'où $\alpha_3 = \frac{1}{2}$. Le coefficient de $\Delta^2$ étant $t$ on a $\nu_3 = \frac{1}{2}$. Comme $\eta_3 = 0$ on trouve $\gamma_3 = 2\nu_3 = 1$. Le terme en $\Delta^4$ a comme coefficient $t$ lui-aussi ; il est donc d'ordre $t^2$ et est négligeable.

On peut refaire facilement l'argument de Ginzburg donné dans le cours. Le résultat est que

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta - \langle\Delta\rangle)^2\rangle}}{\langle\Delta\rangle} \sim t^{\frac{d}{4}-\frac{\gamma_3}{2}-\beta_3} \sim t^{\frac{d-3}{4}} \tag{4.216}$$

donc la dimension critique supérieure vaut 3 au point tricritique (elle vaut 4 sur la ligne de transition continue $T_2$).

**3a.** Il n'y a pas de terme en

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2, \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)^2$$

car si $\varphi$ dépend linéairement de $x, y$ on a seulement une phase smectique dont l'axe principal n'est plus dans la direction $z$, sans fluctuation de l'épaisseur de la couche donc sans que l'énergie soit affectée. Les termes dépendant de la dérivée seconde de $\varphi$ par rapport à $z$ sont dans la pratique négligeables. On calcule

$$\langle[\varphi(\vec{0}_\perp, z) - \varphi(\vec{0})]^2\rangle \quad = \quad 2kT \int \frac{d\vec{q}_\perp\, dq_z}{(2\pi)^3} \frac{1 - e^{i\, q_z\, z}}{B\, q_z^2 + K\,(\vec{q}_\perp^{\,2})^2} \tag{4.217}$$

L'intégrale sur $q_z$ est limitée à $|q_z| < q_0$ (car la maille élémentaire dans la direction $z$ vaut $d$). On effectue d'abord l'intégrale sur les dimension transverses :

$$\int \frac{d\vec{q}_\perp}{B\, q_z^2 + K\,(\vec{q}_\perp^{\,2})^2} = \int_0^\infty \frac{dq\, 2\pi q}{K\, q^4 + B\, q_z^2} = \frac{\pi^2}{2\,|q_z|\,\sqrt{BK}} \tag{4.218}$$

en utilisant la formule dans les indications. L'intégrale sur $q_z$ diverge logarithmiquement en $q_0 z$ avec la constante multiplicative indiquée. Le calcul des variations quadratiques de $\varphi$ dans le plan horizontal et en fonction de $r_\perp$ est identique.

**3b.** On écrit

$$\sum_j e^{i\, q_z\, z_j} \simeq \int d\vec{r}_\perp \sum_\ell e^{i\, q_z [d\, \ell + \varphi(\vec{r}_\perp, \ell\, d)]} \tag{4.219}$$

où la somme prote sur les entiers $\ell$. On en déduit, après multiplication par le complexe conjugué, division par le volume et moyenne sur les champs gaussiens $\varphi$ la formule désirée pour $I$.

**3c.** Avec $q_z = q_0 + \epsilon/d$ on a

$$I(q_z) \simeq \sum_{\ell \geq 1} \cos(\epsilon\, \ell) \int d\vec{r}_\perp \exp\big(-\frac{q_0^2}{2} G(r_\perp, \ell d)\big) \tag{4.220}$$

où $G$ est la fonction de corrélation du champ $\varphi$. Soit $\ell$ fixé. D'après la question précédente $G(r_\perp, \ell d)$ est très grand devant $G(0, \ell d)$ lorsque $r_\perp \gg \sqrt{\ell d}$ et la contribution à l'intégrale devient négligeable. On peut donc écrire

$$I(q_z) \simeq \sum_{\ell \geq 1} \cos(\epsilon\, \ell)\, (\sqrt{\ell d})^2\, \exp\big(-\frac{q_0^2}{2} G(0, \ell d)\big) \simeq \sum_{\ell \geq 1} \frac{\cos(\epsilon\, \ell)}{\ell^{\eta - 1}} \tag{4.221}$$

d'où le résultat annoncé puisque $\eta - 1 < 1$. L'accord avec les données est bon sauf lorsque $q_z$ est très proche de $q_0$ : en volume fini $I$ ne peut diverger et est borné par une puissance de $L$.

**4a.** On trouve que $\nu_\perp$ est $\nu_\parallel$ sont dans l'intervalle à 0.6-0.7. On néglige dans la suite l'anisotropie et on considère que les deux exposants sont égaux. L'exposant $\gamma$ vaut 1.2-1.3

**4b.** On minimise $F$ pour obtenir $\Delta \sim |t|^{\frac{1}{4}} \times H(x = u\, |t|^{-\frac{1}{2}})$. Lorsque $x \to \infty$, $H(x) \sim 1/\sqrt{x}$ et on retrouve $\Delta \sim |t|^{\frac{1}{2}}$ (régime critique normal).

La fonction de corrélation $G$ est celle du point tricritique lorsque $u = 0$ ; elle fait donc intervenir les exposants $\eta_3, \nu_3$. Le point fixe tricritique est instable suivant l'axe $u$ et le flot se dirige vers le point fixe critique $u = \infty$ à $t = 0$. On en déduit $G(1, 0, u) \sim u^{\eta_2/\omega_3}$ pour retouver le comportement critique de la fonction de corrélation.

En choisissant $s \sim r$ on exprime les corrélations à distance $r$ en fonction des corrélations à distance 1 avec une température $t' = t r^{1/\nu_3}$ et une constante $u' = u r^{\omega_3}$. En champ moyen le système reste dans le régime tricritique si $t'^2 \sim u'$ c'est-à-dire $\omega_3 = 1$.

On vérifie la relation d'échelle avec

$$g(x, y) = [x K(y)]^{d - 2 + \eta_3}\, G(x K(y), 1, y) \tag{4.222}$$

Pour $y = 0$ $g(x, 0)$ se comporte comme une fonction exponentiellement décroissante. Pour $y \gg 1$ même comportement avec un facteur multiplicatif $x^{\eta_2}$.

La fonction d'échelle $K(y)$ tend vers une constante lorsque $y \to 0$ et croît comme $y^a$ lorsque $y \to \infty$ avec

$$a = \frac{\nu_2 - \nu_3}{\nu_3\,\omega_3} \simeq \frac{1}{3} \tag{4.223}$$

en prenant la valeur de $\omega_3$ en champ moyen. Ainsi on a un exposant $\nu$ effectif qui ne prend sa vraie valeur ($\nu_2$ qu'à des températures très proches de la température critique et ceci d'autant plus que l'on est proche du point tricritique c'est-à-dire que la constante de couplage $u$ est faible. Dans la pratique la température ne peut s'approcher infiniment près de sa valeur critique et on mesure un exposant qui est intermédiaire entre la valeur XY et la valeur tricritique. C'est ce qu'on voit dans la table. L'effet de crossover est d'autant plus fort que la température de transition $T_{NS}$ est proche de celle de $T_{IN}$ en accord avec le diagramme de phase qualitatif de la section 2.

## 4.12 Problème 12 : Zéros de Lee et Yang

### 4.12.1 Enoncé

Examen du 28 mars 2008

En 1952 T.D. Lee et C.N. Yang publient deux articles théoriques qui apportent un éclairage nouveau sur les transitions de phases en général et la transition ferromagnétique-paramagnétique en particulier. L'idée essentielle est d'étudier les propriétés de la fonction de partition (ou, de manière similaire, de l'énergie libre) dans le plan *complexe* du champ magnétique $h$.

Pour comprendre cette approche, considérons un exemple très simple : un modèle d'Ising à $N = 2$ spins interagissant à travers un couplage $J > 0$ et soumis à un champ externe $h$. La fonction de partition, à température $T = \frac{1}{\beta}$, est

$$\begin{aligned} Z_2(T,h) &= \sum_{S_1=\pm 1}\sum_{S_2=\pm 1} \exp(\beta\,J\,S_1\,S_2 + \beta\,h\,S_1 + \beta\,h\,S_2) \\ &= \left(e^{2\beta h} + e^{-2\beta h}\right) e^{\beta J} + 2\,e^{-\beta J}\ . \end{aligned} \tag{4.224}$$

Physiquement $h$ représente un champ magnétique et est donc à valeur réelle. D'un point de vue mathématique, rien n'empêche de considérer que $h$ est un nombre complexe et de chercher les valeurs de $h$ pour lesquelles la fonction de partition s'annule. On voit que $Z(h) \times \exp(-2\beta h)$ est un polynôme de degré 2 en $\exp(-2\beta h)$ et s'annule donc pour deux valeurs de $h$ que nous notons $h_+$ et $h_-$. Un calcul élémentaire montre que ces deux zéros sont imaginaires purs,

$$h_\pm = \pm i\,\frac{T}{2}\,\theta \tag{4.225}$$

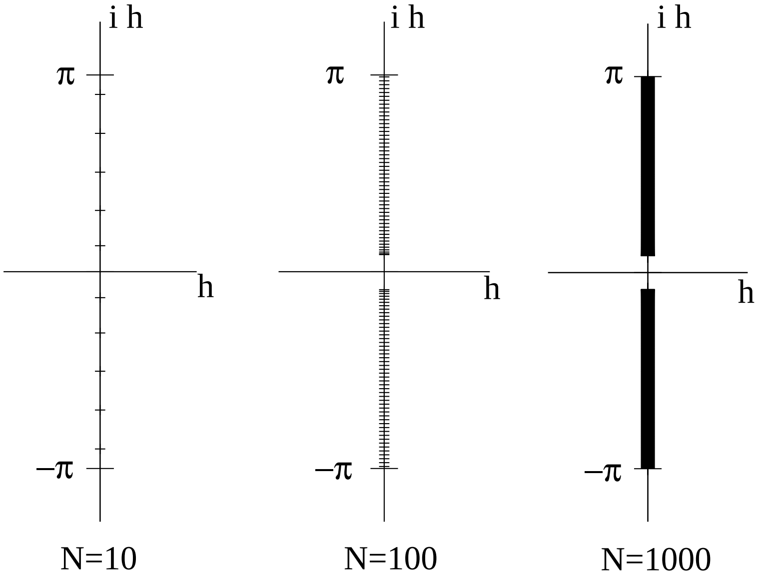



FIG. 4.9 – Zéros dans le plan complexe du champ $h$ de la fonction de partition du modèle d'Ising à une dimension pour 10 (gauche), 100 (milieu) et 1000 (droite) spins. La température et le couplage valent respectivement $T = 2$ et $J = 2$ ; les conditions limites sont périodiques. Les champs qui annulent la fonction de partition sont à valeurs imaginaires pures et sont repérés par des petites barres perpendiculaires à l'axe imaginaire $ih$ et d'ordonnées correspondantes.

où $\theta \in [\frac{\pi}{2}; \pi]$ est l'angle tel que $\cos\theta = -\exp(-2\beta J)$.

Ce résultat est très général. Lee et Yang ont en effet montré le théorème suivant : la fonction de partition d'un système de $N$ spins d'Ising à couplages positifs ou nuls et en champ extérieur $h$ s'annule pour $N$ valeurs, éventuellement dégénérées, *imaginaires pures* de ce champ.

La figure 4.9 montre où sont situés ces zéros imaginaires pour le modèle d'Ising à une dimension avec, respectivement, $N = 10$, $N = 100$ et $N = 1000$ spins. Dans la limite thermodynamique $N \to \infty$ les zéros sont en nombre infini. On pose $h = i\,H$ et on appelle $\rho(H)$ la densité des parties imaginaires $H$ des zéros : $N \times \rho(H)\,dH$ est, lorsque $N$ est très grand, le nombre de zéros de la fonction de partition de parties imaginaires comprises entre $H$ et $H + dH$.

Lee et Yang ont montré que :

– La densité $\rho(H)$ est une fonction paire de $H$. Son allure dépend de la température $T$. Pour $T$ supérieure à la température $T_c$ de la transition paramagnétique-ferromagnétique, $\rho(H)$ est nulle dans un intervalle $[-H_B; H_B]$, voir figure 4.10(gauche). Pour $T < T_c$

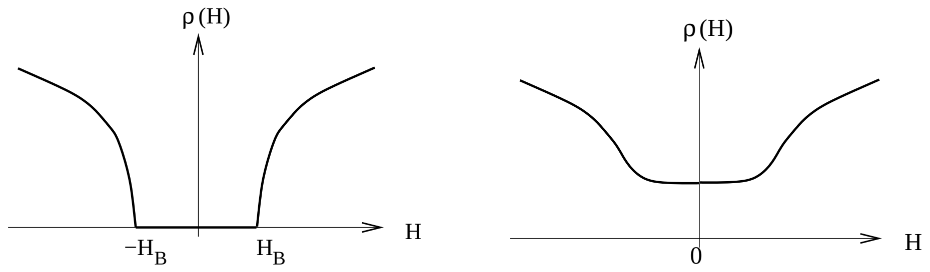



FIG. 4.10 – Allure de la densité des zéros, $\rho(H)$, en fonction de leur partie imaginaire $H$ à température $T > T_c$ (gauche) et $T < T_c$ (droite). La manière dont $\rho(H)$ se comporte lorsque $H \to \pm H_B$ définit l'exposant $\sigma$, voir équation (4.227).

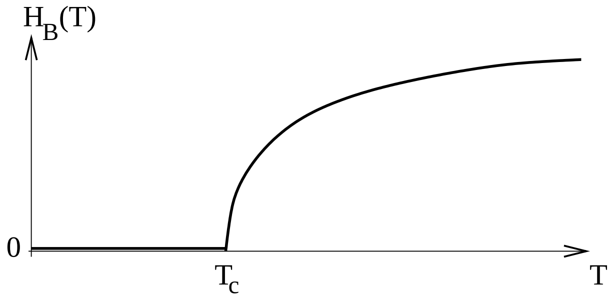



FIG. 4.11 – Allure du bord de la densité des zéros, $H_B$, en fonction de la température. La manière dont $H_B$ s'annule à la température critique $T_c$ définit l'exposant $\Omega$, voir équation (4.226).

la densité de zéros est non nulle en $H = 0$, voir figure 4.10(droite).

- $H_B$ est strictement positif pour des températures supérieures à la température $T_c$, et nul en dessous, voir figure 4.11. La manière dont $H_B$ s'annule lorsque $T \to T_c$ définit l'exposant critique $\Omega$,

$$H_B(T) \simeq \text{constante} \times (T - T_c)^{\Omega} \qquad (T > T_c) \ . \tag{4.226}$$

- Lorsque $T > T_c$ et $H$ tend vers $H_B$ par valeurs supérieures, la densité de zéros se comporte comme

$$\rho(H) \simeq \text{constante} \times (H - H_B)^{\sigma} \qquad (H > H_B) \ . \tag{4.227}$$

Cette relation définit l'exposant $\sigma$ (qui dépend a priori de la température).

- Le modèle de spins se comporte, lorsque $T > T_c$ et $h = i\,H_B$, comme s'il était critique, ce qui étend la notion habituelle de point critique en $T = T_c$ et $h = 0$. En particulier l'aimantation (qui est à valeur complexe) se comporte comme

$$m(T,h) - m(T, i\,H_B) \simeq \text{constante} \times (h - i\,H_B)^{1/\delta} \qquad (h \to i\,H_B) \tag{4.228}$$

où $\delta$ est un exposant universel (indépendant des détails du réseau). De même la longueur de corrélation diverge comme

$$\xi(T,h) \simeq \text{constante} \times (h - i\,H_B)^{-\nu} \qquad (h \to i\,H_B) \tag{4.229}$$

et la corrélation entre deux spins à distance $r$ l'un de l'autre se comporte, au 'point critique', comme

$$G(r) \simeq \frac{\text{constante}}{r^{d-2+\eta}} \qquad (h = i\,H_B) \tag{4.230}$$

où $d$ est la dimension de l'espace. Les exposants $\delta$, $\nu$ et $\eta$ dépendent a priori de la température.

Le but principal du présent sujet est d'étudier les valeurs de ces exposants en fonction de la dimension $d$ de l'espace. Les sections 1, 2 et 3 sont indépendantes, sauf indication contraire. La section 4 fait appel aux résultats des sections précédentes. La section 5 ne doit être traitée que si toutes les autres questions l'ont été.

**Relations entre exposants**

**1a.** En utilisant le théorème fluctuation–dissipation qui relie susceptibilité et fonction de corrélation montrer que

$$1 - \frac{1}{\delta} = \nu(2 - \eta)\ . \tag{4.231}$$

**1b.** A l'aide des arguments de Ginzburg, montrer que, si la valeur moyenne de $\Delta M = (m(T,h) - m(T, i\,H_B)) \times \xi^d$ est du même ordre de grandeur que ses fluctuations, alors

$$\frac{1}{\delta} = \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta)\ . \tag{4.232}$$

Cette relation est-elle vraie en toute dimension $d$ ?

**1c.** En utilisant le théorème de Lee-Yang énoncé en page 1, montrer que la fonction de partition d'un modèle d'Ising comportant $N$ spins et à température $T = \frac{1}{\beta}$ peut s'écrire sous la forme

$$Z_N(T,h) = C(T) \times e^{N\beta h} \prod_{j=1}^{N} \left(e^{-2\beta\,h} - e^{-2\beta\,i\,H_j}\right) \tag{4.233}$$

où $H_j$ est la partie imaginaire du j$^{\text{ième}}$ zéro et $C(T)$ une fonction de la température indépendante de $h$. En déduire que dans la limite thermodynamique, l'aimantation par spin vaut

$$m(T,h) = \int_{-\infty}^{\infty} dH \, \frac{\rho(H)}{\tanh[\beta\,(h - i\,H)]} \; . \tag{4.234}$$

puis que, lorsque le champ $h$ est proche de la valeur $i\,H_B$,

$$m(T,h) - m(T, i\,H_B) \simeq \text{constante} \times (h - i\,H_B)^{\sigma} \tag{4.235}$$

où $\sigma$ est l'exposant défini en (4.227) et à condition que $-1 < \sigma < 1$. *(On montrera la relation (4.235) pour des champs $h$ imaginaires, $h = iH$ avec $|H| < H_B$ ; on pourra utiliser $\frac{1}{\tanh x} = \frac{1}{x} + O(x)$ pour $x \to 0$)*

**1d.** Déduire des questions précédentes les relations suivantes entre exposants :

$$\sigma = \frac{1}{\delta} = \frac{d-2+\eta}{d+2-\eta} \tag{4.236}$$

$$\nu = \frac{2}{d+2-\eta} \; . \tag{4.237}$$

**Etude de la dimension $d = 1$**

On considère d'abord le modèle d'Ising en dimension $d = 1$ ayant pour énergie

$$E = -J \sum_{i=1}^{N} S_i\, S_{i+1} - h \sum_{i=1}^{N} S_i \; . \tag{4.238}$$

Les conditions limites sont périodiques : $S_{N+1} = S_1$.

**2a.** Rappeler brièvement pourquoi on peut écrire la fonction de partition de ce modèle sous la forme

$$Z_N(T,h) = \lambda_+(T,h)^N + \lambda_-(T,h)^N \tag{4.239}$$

où

$$\lambda_\pm(T,h) = \frac{1}{2}\left[x(y + \frac{1}{y}) \pm \sqrt{x^2(y - \frac{1}{y})^2 + \frac{4}{x^2}}\right] \tag{4.240}$$

et $x = e^{\beta J}$, $y = e^{-\beta h}$.

**2b.** Montrer que les zéros de la fonction de partition sont les champs $h_j = i\,H_j$, $j = 1, 2, \ldots, N$ tels que les $y_j = e^{-\beta i H_j}$ sont les solutions de

$$(y_j - \frac{1}{y_j})^2 + \frac{4}{x^4} + (y_j + \frac{1}{y_j})^2 \tan(\phi_j/2)^2 = 0 \tag{4.241}$$

avec $\phi_j = \frac{\pi}{N}(2j-1)$.

**2c.** En déduire que, dans la limite $N \to \infty$, la densité de zéros s'annule en $H_B$ solution de

$$\sin(H_B/T) = \exp(-2J/T) \ . \tag{4.242}$$

Comparer ce résultat avec l'équation (4.226). Que concluez-vous ?

**2d.** En utilisant (4.241) montrer que $H_j - H_B \simeq$ constante $\times\, \phi_j^2$ lorsque $j/N$ est petit, c'est-à-dire lorsque $\phi_j$ est petit. En déduire que

$$\sigma = -\frac{1}{2} \ , \tag{4.243}$$

indépendamment de la température.

**2e.** Comment la longueur de corrélation est-elle reliée aux valeurs propres $\lambda_+$ et $\lambda_-$ ? Montrer que

$$\nu = \frac{1}{2} \ . \tag{4.244}$$

**Théorie de champ moyen**

Dans cette section on désire calculer les exposants critiques définis dans l'introduction dans le cadre de la théorie de champ moyen. On considère un réseau de taille infinie en dimension $d$ ayant pour matrice d'adjacence $\Delta$ : $\Delta_{ab} = 1$ si les sites $a$ et $b$ sont voisins sur le réseau, $\Delta_{ab} = 0$ sinon. On note

$$\tilde{\Delta}(k) = \sum_b e^{-i\,k\cdot(b-a)}\, \Delta_{ab} \tag{4.245}$$

la transformée de Fourier de la matrice d'adjacence (indépendante de $a$ par invariance par translation). $a, b, k$ sont ici des vecteurs à $d$ composantes.

Chaque site $a$ du réseau porte un spin $S_a = \pm 1$. L'énergie d'une configuration des spins est

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{a,b} \Delta_{ab}\, S_a\, S_b - \sum_a h_a\, S_a \tag{4.246}$$

où $J > 0$ est le couplage et $h_a$ un champ extérieur dépendant du site.

**3a.** Rappeler brièvement pourquoi en champ moyen les aimantations $m_a = \langle S_a \rangle$ à température $T = \frac{1}{\beta}$ sont solutions des équations

$$m_a = \tanh\big(\beta\, J \sum_b \Delta_{ab}\, m_b + \beta\, h_a\big) \ . \tag{4.247}$$

En déduire que lorsque tous les champs sont égaux, $h_a = h$, la susceptibilité vaut

$$\frac{\partial m(T,h)}{\partial h} = \frac{\beta(1 - m(T,h)^2)}{1 - \beta J (1 - m(T,h)^2)\, \tilde{\Delta}(0)} \ . \tag{4.248}$$

Que vaut la température critique $T_c$ en champ $h = 0$ ?

**3b.** En déduire que, pour $T > T_c$, le champ $i\,H_B$ auquel s'annule la densité de zéros et l'aimantation $m_B = m(T, iH_B)$ satisfont les deux équations couplées

$$m_B = \tanh\left(\frac{T_c}{T}\,m_B + \frac{i\,H_B}{T}\right) , \tag{4.249}$$

$$1 - m_B^2 = \frac{T}{T_c} , \tag{4.250}$$

puis que $\Omega = \frac{3}{2}$. *(Pour obtenir (4.249,4.250), observer que, pour $\delta > 1$, $m(T,h)$ n'est pas dérivable par rapport au champ en $h = iH_B$)*

**3c.** Montrer que $\delta = 2$, puis que $\nu = \frac{1}{4}$, indépendamment de la température.

**3d.** Quelle est la dimension critique supérieure associée aux exposants décrivant les zéros de Lee et Yang ? *(Indication : utiliser les identités (13,14) de la question 1d)*

### Allure des exposants en fonction de $d$

**4a.** En 1978, M. Fisher chercha à calculer les valeurs des exposants $\sigma$ et $\eta$ à l'aide du groupe de renormalisation. Pour cela il considéra une théorie des champs dont le hamiltonien était

$$H[\{\varphi(x)\}] = \int dx\ [(\nabla_x\varphi)^2 + g\,\varphi(x)^3] \tag{4.251}$$

où $\varphi(x)$ était un champ scalaire et $g$ un couplage imaginaire pur. Pourquoi ce choix était-il judicieux ? Pourquoi les exposants critiques associés à la théorie sont-ils indépendants de la température ?

**4b.** M. Fisher montra que, au premier ordre en $\epsilon = 6 - d$, les exposants valaient

$$\eta = -\frac{\epsilon}{9} \quad \text{et} \quad \sigma = \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{12} . \tag{4.252}$$

En outre, des résultats exacts issus des théories conformes ont permis ultérieurement de montrer que, en dimension $d = 2$, $\sigma = -\frac{1}{6}$ et $\eta = \frac{1}{4}$. Tracer $\sigma$ et $\eta$ en fonction de $d$ à partir de ces informations et des résultats obtenus dans les Sections 1, 2 et 3.

### Question supplémentaire

**5a.** Montrer que, pour $T < T_c$, l'aimantation spontanée en champ nul, $m_s$, est reliée à la densité de zéros de partie imaginaire nulle, $\rho(0)$, par

$$m_s = T\,\pi\ \times\ \rho(0) . \tag{4.253}$$

*(Indication : utiliser (4.234) et le fait que la densité $\rho(h)$ est une fonction paire de $h$).*

### 4.12.2 Corrigé

*(Ajouter 223 aux numéros des équations entre parenthèses)*

**1a.** Soit $\Delta h = h - i\,H_B$. Alors $dm(T,h)/dh \simeq (\Delta h)^{1/\delta-1}$ d'après (5). Puis $dm/dh = \beta \int drG(r)$ (fluctuation-dissipation) donc, en utilisant (7) puis (6), $dm/dh \simeq \xi^{(2-\eta)} \simeq (\Delta h)^{-\nu(2-\eta)}$.

**1b.** On pose $m_B = m(T, i\,H_B)$. On a, en valeur moyenne, $\langle \Delta M\rangle = (\Delta h)^{1/\delta-\nu\,d}$. Puis $\langle(\Delta M)^2\rangle = \xi^d \times (\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2 + (\langle m\rangle - \langle m_B\rangle)^2)$ et $\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2 \simeq \int^{\xi} dr\, r^{d-1} G(r) = \xi^{2-\eta}$ donc $\langle(\Delta M)^2\rangle - \langle\Delta M\rangle^2 \simeq (\Delta h)^{-\nu(d+2-\eta)}$. On trouve la relation (9), qui ne peut être valide qu'en dimension inférieure à la dimension critique supérieure. Lorsque les exposants de champ moyen sont exacts, on a bien sûr $\langle(\Delta M)^2\rangle \leq \langle\Delta M\rangle^2$.

**1c.** On écrit

$$Z_N(T,h) = \sum_{k=0,1,2,\ldots,N} e^{\beta h(N-2k)}\, Z_{N,k}(T) \tag{4.254}$$

où $Z_{N,k}(T)$ est la fonction de partition du modèle d'Ising en champ $h = 0$ et ayant $k$ spins égaux à $-1$ et $N-k$ égaux à $+1$. Donc $Z_N(T,h) \times e^{-N\beta h}$ est un polynôme en $z = e^{-2\beta h}$ de degré $N$. On en déduit (10) avec un facteur multiplicatif $C(T) = Z_{N,N}(T)$ indépendant de $h$. Puis

$$m(T,h) = \frac{T}{N}\frac{d\ln Z_N}{dh} = 1 - \frac{2}{N}\sum_j \frac{e^{-2\beta h}}{e^{-2\beta h} - e^{-2\beta i H_j}} = \frac{1}{N}\sum_j \frac{1}{\tanh[\beta(h - iH_j)]} \tag{4.255}$$

et on passe à la limite $N \to \infty$ en introduisant la densité de zéros pour obtenir (11). Pour obtenir (12), on pose $h - iH_B = \Delta h$, $H - H_B = y \times \Delta h$ :

$$\frac{1}{\tanh[\beta(h - iH)]} - \frac{1}{\tanh[\beta(iH_B - iH)]} = \frac{T}{\Delta h}\frac{y - i}{y(1+y^2)} + O(\Delta h) \tag{4.256}$$

Le terme imaginaire dans l'expression ci-dessus donne une contribution nulle par parité de la distribution $\rho$. Finalement on trouve

$$\Delta m \simeq (\Delta h)^{\sigma} \times \int_o^{\infty} dy\, \frac{2T\, y^{\sigma}}{y^2 + 1}\ . \tag{4.257}$$

L'intégrale définissant la constante multiplicative converge si $\sigma$ est dans l'intervalle $]-1;1[$.

**1d.** on a $\sigma = 1/\delta$ à partir de 1c. Les formules (13) et (14) se trouvent immédiatement à partir de (8) et (9).

**2a.** Nous avons vu en PC4 que la fonction de partition est égale à la trace de $M$ à la puissance $N$ (nombre de spins) où $M$ est la matrice

$$M = \begin{pmatrix} x/y & 1/x \\ 1/x & x\,y \end{pmatrix} \tag{4.258}$$

et que les valeurs propres de cette matrice sont $\lambda_+$ et $\lambda_-$.

**2b.** $Z_N = 0$ est équivalent à $\lambda_+ = \lambda_- \times e^{i\phi_j}$, pour $j = 1, 2, \ldots, N$. On pose $A = x(y + \frac{1}{y})$, $B =$ la racine carrée dans l'expression des valeurs propres. Alors $(A + B)/(A - B) = e^{i\phi_j}$ c'est-à-dire $B^2 = A^2 \times (1 - e^{i\phi_j})/(1 + e^{i\phi_j})^2$, ou encore $B^2 + A^2 \tan(\phi_j/2)^2 = 0$. D'où (18).

**2c.** Pour $N \to \infty$ $\phi_j$ varie entre 0 et $2\pi$. Pour $\phi \to \pi$, $\tanh(\phi/2) \to \infty$ donc $y + \frac{1}{y} \to 0$ et $h \to \frac{i\pi T}{2}$. Pour $\phi \to 0$ (ou $2\pi$) on obtient $y - \frac{1}{y} = \pm\frac{2i}{x^2}$ d'où la formule (19).

**2d.** On considère $\phi$ petit et $y = y_B(1 + \epsilon)$ avec $\epsilon$ petit. En développant (18) on trouve $(y_B - \frac{1}{y_B})\epsilon = \frac{1}{2}(y_B + \frac{1}{y_B})\phi^2$ à l'ordre le plus bas, c'est-à-dire $\epsilon = -\frac{i}{2}\phi^2/\tanh\beta H_B$. Puis on a $\epsilon = -i\beta(H - H_B)$ à l'ordre le plus bas. Donc $H - H_B = C\,\phi^2$ où $C$ est une constante positive. Or $\phi$ est uniformément distribué sur l'intervalle $[0; 2\pi]$ avec la mesure $p(\phi) = \frac{1}{2\pi}$. La densité de zéros satisfait $\rho(H)\,dH = p(\phi)\,d\phi$, donc $\rho(H)$ est proportionnelle à $d\phi/dH \sim (H - H_B)^{1/2}$.

**2e.** On peut calculer $\eta = -1$ d'après (13) puis $\nu = \frac{1}{2}$ d'après (14). On peut aussi faire le calcul direct en utilisant la relation vue en PC4 :

$$\exp(-1/\xi) = \lambda_-/\lambda_+ = \frac{A - B}{A + B}\ , \tag{4.259}$$

et, pour $h = i\,H_B + \Delta h$, on trouve $A = x(y_B + \frac{1}{y_B}) + O(\Delta h)$, $B^2 = 2(y_B^2 - \frac{1}{y_B^2})/T \times \Delta h + O(\Delta h^2)$. On trouve donc que $\frac{1}{\xi}$ est d'ordre $\sqrt{\Delta h}$ donc $\nu = \frac{1}{2}$.

**3a.** On écrit $E = -\sum_a S_a h_a^{tot}$ où le champ total s'exerçant sur le spin a vaut

$$h_a^{tot} = h_a + J\sum_b \Delta_{ab} S_b\ . \tag{4.260}$$

L'approximation de champ moyen consiste à remplacer ce champ total par sa valeur moyenne. Les spins sont alors indépendants et on a $\langle S_a\rangle = \tanh(\beta\langle h_a^{tot}\rangle)$ et donc (24). Pour calculer la susceptibilité on dérive (24) par rapport à $h_b$ pour trouver que la matrice $\chi_{ab} = dm_a/dh_b$ est l'inverse de la matrice $(\frac{T}{1-m^2}Id - J\Delta)_{ab}$. Puis $dm/dh = \sum_b \chi_{ab} = \tilde{\chi}(0)$ permet de trouver (25). La température critique s'obtient lorsque la susceptibilité en champ nul diverge et vaut donc $T_c = J\tilde{\Delta}(0)$.

**3b.** (26) est obtenue immédiatement à partir de (24) et de la définition de $m_B$. Pour obtenir (27) on utilise le fait que $m$ n'est pas dérivable en $h = iH_B$ donc la susceptibilité (25) doit diverger. On pose ensuite $t = T/T_c - 1 \ll 1$, alors $m_B^2 = -t$ d'après (27). Puis on développe (26) au premier ordre en $H_B$ et au troisième ordre en $m_B$ pour trouver $i\,H_B = \frac{4}{3}m_B\,t$ donc $\Omega = \frac{3}{2}$.

**3c.** Pour calculer $\delta$ on part de $m = \tanh(\frac{T_c}{T}m + h)$ et on développe avec $\Delta m = m - M_B$ et $\Delta h = h - iH_B$ petits. On trouve $\Delta h = m_B(\frac{T_c}{T}\Delta m + \Delta h)^2$ et donc $\Delta m \simeq (\Delta h)^{1/2}$. D'où $\delta = 2$.
D'après le corrigé de la question 3a, pour $k$ petit, $\tilde{G}(k) \propto \frac{1}{\tilde{\chi}(k)} = k^2 + \xi^{-2}$ avec $\xi^{-2} \propto \frac{T}{1-m^2} - J\tilde{\Delta}(0) \simeq 2T_c \frac{m_B}{1-m_B^2}\Delta m \simeq (\Delta h)^{1/2}$. Donc $\nu = \frac{1}{4}$.

**3d.** On cherche la dimension $d$ telle que (13) et (14) sont vraies avec les exposants en champ moyen. On trouve $\eta = 0$ comme attendu en champ moyen et $d = 6$. Donc on s'attend à ce que les exposants aient des valeurs différentes de celles du champ moyen en dimension inférieure à 6.

**4a.** Soit $F(m) = \frac{t}{2}m^2 + \frac{a}{4}m^4 - hm$ (avec $a > 0$) l'énergie libre de Landau (on peut aussi partir de l'expression de $F$ en champ moyen). Le point critique de Lee et Yang correspond à $F'(m_B) = F''(m_B) = 0$. La théorie des champs associée est donnée par le hamiltonien des fluctuations autour du champ moyen, $H[\{\varphi(x)\}] = \int dx[(\nabla\varphi)^2 + F(m_B + \varphi(x))]$. On trouve (28) en développant $F$ avec $g = \frac{1}{6}F'''(m_B) = ia\sqrt{t}$ imaginaire pur. Dès que $t > 0$, $g$ est non nul et la constante de couplage, par le flot du groupe de renormalisation, évoluera vers le point fixe $g^* \neq 0$ indépendant de $t$. En revanche, si $t = 0$, il faut développer $F$ au quatrième ordre et on retombe sur la théorie en $\varphi^4$ habituelle pour la transition para-ferro avec des exposants différents (en particulier $\delta$) de ceux associés au point critique de Lee et Yang.

**4b.** Voir la figure 1 de l'article de M. Fisher, Physical Review Letters, volume 40, page 1610 (1978).

**5a.** On a

$$m(T,h) = \int_0^\infty dH\, \rho(H) \left\{ \frac{1}{\tanh[\beta\,(h - i\,H)]} + \frac{1}{\tanh[\beta\,(h + i\,H)]} \right\} . \tag{4.261}$$

Lorsque $h \to 0$ on voit que l'argument entre $\{\ldots\}$ est nul, donc la seule contribution à l'intégrale provient du voisinage de $H = 0$. On peut alors linéariser la tangente pour trouver

$$m_s = \lim_{h\to 0} \int_0^\infty dH\, \rho(H) \left\{ \frac{T}{h - i\,H} + \frac{T}{h + i\,H} \right\} = \lim_{h\to 0} \int_0^\infty dH\, \rho(H)\, \frac{2T\,h}{h^2 + H^2} . \tag{4.262}$$

En faisant le changement de variable $H = h\,u$, on a

$$m(T,0) = \lim_{h\to 0} \int_0^\infty du\, \rho(h\,u) \frac{2T}{u^2+1} = \rho(0) \int_0^\infty du \frac{2T}{u^2+1} = \rho(0) \times T\,\pi . \tag{4.263}$$