



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

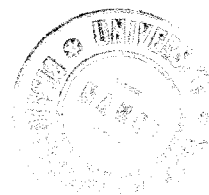
UNIVERSITE DE NANCY I
UFR Sciences et Techniques de la Matière et des Procédés
Groupe de Formation Doctorale Sciences et Génie des matériaux

THESE
présentée à
l'Université de Nancy I

pour obtenir
le titre de Docteur de l'Université de Nancy I
en Sciences et Génie des Matériaux

par

Bertrand BERCHE



Modèle d'Ising bidimensionnel perturbé : effets de taille finie
et invariance conforme

Soutenue publiquement devant la Commission d'Examen
le 23 janvier 1991 à 15 heures

Membres du Jury : MM	M Gerl	Président
	C Brouder	
	JM Debierre	
	F Iglói	
	K Penson	
	TT Truong	
	L Turban	

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé dans le cadre sympathique du Laboratoire de Physique du Solide de l'Université de Nancy I (UA 155) où le professeur Maurice Gerl a bien voulu m'accueillir, récompensant ainsi l'assiduité avec laquelle j'ai suivi ses enseignements du DEUG au DEA. Je lui suis reconnaissant de m'avoir inspiré la passion de la physique et, plus prosaïquement aujourd'hui, d'assurer la présidence du jury.

J'en remercie aussi les autres membres, éminents s'il en est, qui m'ont aidé à mener à bien ce travail. Au cours de l'élaboration de ce texte, j'ai bénéficié des conseils et des encouragements de tous. Karol Penson et Jean-Marc Debierre suivent mes premiers pas en physique statistique depuis le DEA et je suis touché par l'intérêt qu'ils manifestent à l'égard de cette thèse. Je dois beaucoup à Ferenc Iglói pour sa bienveillante attention et ses commentaires constructifs. Je remercie également Tuong Truong et Christian Brouder qui ont la gentillesse de participer au jury.

Je voudrais ici exprimer ma reconnaissance avec toute la ferveur dont je suis capable (!) à mon cher directeur de recherche, Loïc Turban, pour m'avoir initié à un domaine passionnant de la physique. C'est grâce à sa complicité très active que je peux aujourd'hui mettre un point final à ce mémoire. Il a su me guider, m'encourager, m'a honoré de son amitié. Bref, il a tant fait qu'il serait vain d'énumérer toutes les gentilleses qu'il a eues pour moi, d'autant plus que *j'ai remarqué qu'il fallait remercier les hommes le moins possible, parce que la reconnaissance qu'on leur témoigne les persuade aisément qu'ils en font trop.* Benjamin Constant

Je tiens enfin à remercier Anne pour le réconfort constant qu'elle m'a toujours apporté et pour le travail considérable qu'elle a réalisé en assurant la frappe de ce texte.

Table des matières

Avant-propos	7
Chapitre 1. Généralités sur les phénomènes critiques, modèle d'Ising et invariance conforme	15
1 Introduction	15
2 Le modèle d'Ising	18
2.1 Le modèle d'Ising bidimensionnel	18
2.2 Limite hamiltonienne et modèle d'Ising dans un champ transverse	20
2.3 Energie libre et fonction de corrélation dans la limite hamiltonienne	23
3 Homogénéité, effets de taille finie	26
3.1 Groupe de renormalisation et homogénéité	26
3.2 Les effets de taille finie	32
4 Invariance conforme	33
4.1 Aperçu bibliographique	33
4.2 Invariance conforme à deux dimensions, algèbre de Virasoro	36
4.3 Invariance conforme et effets de taille finie	40
5 Solution exacte du modèle d'Ising en champ transverse	45
5.1 Conditions périodiques	46
5.1.1 Diagonalisation de l'hamiltonien	46
5.1.2 Effets de taille finie	54
5.1.3 Invariance conforme	57
5.2 Conditions de bords libres	63
6 Conclusion	65

Chapitre 2. Transitions de surface dans le modèle d'Ising bidimensionnel.	
Surfaces-Interfaces	66
1 Introduction	66
2 Phénomènes critiques à la surface d'un système semi-infini	67
2.1 Diagramme de phase dans la théorie de Ginzburg-Landau	67
2.2 Homogénéité et exposants critiques de surface	72
3 Perturbations pertinentes, marginales et non pertinentes	73
4 Etude des surfaces et interfaces dans le modèle d'Ising bidimensionnel	76
4.1 Motivations	76
4.2 Perturbations de surface dans le modèle d'Ising bidimensionnel	77
4.2.1 Spectre d'excitation, énergie et aimantation de surface	77
4.2.2 Transformation de dualité et transition extraordinaire	88
4.3 Interface "critique - non critique" dans le modèle d'Ising bidimensionnel	90
4.3.1 Spectre d'excitation, énergie et aimantation à l'interface	90
4.3.2 Transformation de dualité de la chaîne d'Ising périodique	103
5 Conclusion	104
 Annexe A. Excitations et vecteurs propres du modèle d'Ising en champ transverse perturbé en surface	108
A.1 Perturbation $h_s/J_s \neq 0$	108
A.2 Perturbation $h_s = 0$	112
 Annexe B. Excitations et vecteurs propres de la chaîne quantique d'Ising avec interfaces	114
 Chapitre 3. Systèmes inhomogènes et relation gap-exposant	118
1 Introduction	118
2 Inhomogénéité spatiale décroissant depuis une surface libre	121
2.1 Présentation du modèle et résultats numériques	121

2.2 Résultats exacts dans le cas d'un système non ordonné en surface . . .	126
2.3 Spectre d'excitation dans la limite continue	128
2.4 Discussion	132
3 Inhomogénéité spatiale décroissant depuis un défaut linéaire en volume . . .	140
3.1 Présentation du modèle et résultats numériques	140
3.2 Spectre d'excitation dans la limite continue	146
3.3 Discussion	151
4 Chaîne quantique XY inhomogène	156
4.1 Chaîne XY avec conditions de bords libres	156
4.2 Chaîne XY avec conditions périodiques	166
5 Conclusion	168
Annexe C. Spectre d'excitation de la chaîne d'Ising inhomogène avec conditions de bords libres	172
Conclusion	176
Liste des figures	179
Liste des tableaux	182
Références bibliographiques	183

Avant-propos

La théorie des phénomènes critiques a pour objet l'étude du comportement de la matière au voisinage de transitions de phase du second ordre. Ce comportement est largement dominé par la présence de fluctuations dont la portée diverge au point critique, ce qui en rend l'étude très complexe. Heureusement, un formalisme riche a été développé autour du concept d'*universalité*, dégageant parmi la diversité des paramètres entrant en jeu quelques constantes indépendantes des systèmes envisagés. Une telle description unifiée des phénomènes critiques a demandé cent cinquante ans d'efforts et de sagacité.

La première observation expérimentale du comportement critique de la matière remonte, semble-t-il, au XIX^e siècle avec les expériences de Cagniard de Latour sur la vaporisation de l'eau et de l'alcool (1822) (*). Le phénomène d'opalescence critique qu'il observe alors, et qui résulte de l'intense diffusion de la lumière par un fluide au voisinage de son point critique, a fait l'objet de nombreuses études de la part de ses contemporains qui s'y réfèrent sous le terme éloquent d'*état de Cagniard de Latour*.

(*) Les informations et les citations signalées par un astérisque et rapportées dans cette introduction sont empruntées à l'essai de Rowlinson qui accompagne l'édition du texte de la thèse de JD van der Waals (1988).

Herschel est le premier à évoquer à ce sujet le principe de continuité lorsqu'il écrit (1830) (*) :

Il n'y a aucun doute que les états solide, liquide et gazeux des corps ne sont que des étapes dans un processus de transition graduelle d'une extrême à l'autre et que, si fortement marquées qu'apparaissent les différences entre ces étapes, il s'avérera en fin de compte qu'elles ne sont séparées par aucune limite abrupte, mais se fondent les unes dans les autres par gradations insensibles. Les dernières expériences du Baron Cagniard de Latour peuvent être considérées comme un premier pas vers une démonstration complète de cette [...] loi générale qui semble s'étendre à toute la nature, la loi dite de continuité et qu'exprime la sentence [...] "Natura non agit per saltum".

Plus tard, Faraday cherchant une appellation plus appropriée pour l'état de Cagniard de Latour en donne la description suivante (1844) (*) :

Il existe un point de température et de pression où le liquide et sa vapeur sont identiques dans toutes leurs propriétés [...], un point où le liquide et sa vapeur ne font qu'un selon une loi de continuité.

C'est finalement Andrews qui forge l'expression *température critique* et, dans une étude expérimentale sur l'opalescence critique dont van der Waals empruntera le titre pour sa propre thèse, il écrit (1869) (*) :

Les états gazeux et liquide ordinaires ne sont que des formes éloignées d'une même condition de la matière et on peut les transformer l'un dans l'autre par une série de gradations si douces que le passage ne présentera nulle part d'interruption ou de solution de continuité.

On trouve la première interprétation théorique de la transition liquide-gaz au point critique dans la thèse de van der Waals (1873) (*) où il établit la célèbre équation d'état qui porte son nom. C'est encore lui qui introduit en 1880 (*) le *principe des états correspondants* qui constitue la première manifestation de ce que l'on appelle aujourd'hui l'*universalité*. L'importance en est reconnue par Curie (CURIE 1891) :

La méthode donnée par M van der Waals pour comprendre dans une formule unique les propriétés fondamentales de tous les fluides nous semble pouvoir être généralisée et devenir, appliquée à des propriétés très diverses de la matière, une méthode féconde.

Les progrès de la fin du XIX^e siècle ont élargi le champ d'application des phénomènes critiques, établissant l'existence de points critiques associés à des

systèmes fort différents de la transition liquide-vapeur. C'est le cas des mélanges binaires de liquides ou de la transition ferromagnétique-paramagnétique reconnue dès 1889 par Hopkinson (*) :

La température à laquelle le magnétisme disparaît peut être appelée température critique.

Cette transition fait aussi l'objet de la thèse de Curie (CURIE 1895) :

Un corps ferromagnétique se transforme progressivement, quand on le chauffe, en corps faiblement magnétique, et l'on peut donner une image générale des phénomènes en remarquant que la façon dont l'intensité d'aimantation varie sous l'influence de la température et de l'intensité du champ magnétisant rappelle la façon dont la densité d'un fluide varie sous l'influence de la température et de la pression.

Le début du XX^e siècle voit l'émergence des théories de champ moyen avec les tentatives d'interprétation de l'opalescence critique en termes de fluctuations locales de densité (Smoluchowski 1908, Einstein 1910) (*) et avec la théorie de Weiss du magnétisme (1907) (*). Les méthodes de champ moyen sont améliorées dans les années 1930 et appliquées sur réseau à l'étude des transformations ordre-désordre dans les alliages (BRAGG et WILLIAMS 1934, BETHE 1935, PEIERLS 1936a, NIX et SHOCKLEY 1938). Les propriétés thermodynamiques sont alors correctement décrites si l'on exclut le voisinage immédiat du point critique.

Ces théories sont synthétisées par Landau en 1937 dans le cadre d'une approche phénoménologique qui marque le point de départ de "l'ère moderne des phénomènes critiques" (LANDAU 1936, 1937). Cette approche est fondée sur l'hypothèse qu'un potentiel thermodynamique convenable ψ peut être développé en loi de puissance de l'écart au point critique représenté par un paramètre d'ordre η . Elle conduit à une description des singularités des grandeurs thermodynamiques au point de transition par un ensemble d'exposants critiques. L'idée d'*universalité* est sous-jacente dans les travaux de Landau qui impliquent que les singularités sont uniquement déterminées par la forme de ψ et indépendantes de la nature physique du paramètre d'ordre η . De nombreux résultats expérimentaux avaient déjà mis en évidence que certains exposants critiques semblaient coïncider pour des systèmes différents, suggérant que les détails microscopiques avaient peu d'influence sur la

forme des singularités critiques. L'application spectaculaire de la théorie de Landau à la supraconductivité (GINZBURG et LANDAU 1950) mesure l'efficacité de la méthode. Il a suffi (!) aux auteurs de supposer l'existence d'un paramètre d'ordre complexe et d'ajouter un terme dans le développement du potentiel ψ pour interpréter certains faits connus à l'époque et pour en prévoir de nouveaux (DE GENNES 1966).

Les premières étapes dans la recherche d'une solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel remontent à 1936 : Peierls démontre que, contrairement au modèle d'Ising unidimensionnel, les modèles à deux et à trois dimensions présentent une aimantation spontanée à température non nulle (PEIERLS 1936b). Kramers et Wannier déterminent en 1941 la température critique du modèle planaire en reliant par dualité les phases de haute et de basse température (KRAMERS et WANNIER 1941). En 1944, Onsager publie la première détermination analytique de l'énergie libre d'un modèle non trivial en physique statistique, le *modèle d'Ising bidimensionnel sans champ magnétique* (ONSAGER 1944). Il expose publiquement le calcul de l'aimantation spontanée en 1948 à Cornell, puis la même année à Florence. Mais, Onsager n'ayant jamais publié sa solution, il faut attendre 1952 pour qu'un article de Yang en donne les détails (YANG 1952). Les anecdotes qui entourent la publication de ce résultat sont rapportées par Brush (1967). La susceptibilité est ensuite calculée par Fisher (1959). Les singularités obtenues diffèrent de celles que prévoit la théorie de Landau mais aussi des résultats expérimentaux de l'époque. Ces différents types de comportements critiques constituent ce que l'on appelle des *classes d'universalité*, regroupant au sein de mêmes catégories, des systèmes physiques ainsi que des modèles théoriques présentant des singularités analogues (FISHER 1966, GRIFFITHS 1970). L'extrême richesse des comportements critiques susceptibles d'être rencontrés dans la nature est ainsi structurée et les considérables progrès accomplis grâce aux développements récents dans le domaine des phénomènes critiques contribuent à identifier un grand nombre de *classes d'universalité*.

Si des solutions exactes ont été obtenues pour quelques modèles bidimensionnels (le volume 1 de la série éditée par C Domb et MS Green (DOMB et GREEN 1972) est consacré à ces résultats exacts), les modèles tridimensionnels sont restés le plus souvent irrésolus. Des techniques approchées ont néanmoins permis d'aboutir à

une évaluation assez précise des propriétés critiques de certains de ces modèles. Les développements en série, qui sont au nombre de ces méthodes (DOMB 1960, FISHER 1963, DOMB et GREEN 1974), ont fourni des résultats parmi les plus précis à l'heure actuelle. L'estimation des exposants du modèle d'Ising tridimensionnel repose notamment sur le calcul de quarante termes ! (SYKES, ESSAM et GAUNT 1965, SYKES, GAUNT, ESSAM et ELLIOTT 1973).

Au début des années 1960, les résultats accumulés pour de nombreux modèles amènent certains auteurs à conjecturer l'existence de relations entre exposants critiques, tout d'abord sous la forme d'inégalités fondées sur des arguments thermodynamiques (STANLEY 1971). A ces relations maintenant établies comme égalités et connues sous l'appellation de *lois d'échelle* sont attachés les noms de Fisher, Essam, Widom, Rushbrooke, Josephson. L'idée qui émerge alors à cette époque est résumée ainsi par Rowlinson (*) :

Vers 1965, il y avait de fortes présomptions pour que l'énergie libre, bien qu'étant non analytique au point critique, y manifeste cependant une très grande régularité.

Une hypothèse est formulée indépendamment par Widom (1965), par Domb et Hunter (1965) et par Patashinskii et Prokovskii (1966) : elle permet de démontrer les lois d'échelle (VICENTINI-MISSONI 1972). Cette hypothèse, dite d'*homogénéité*, consiste à écrire la partie singulière de l'énergie libre sous la forme d'une fonction homogène généralisée de variables réduites. Kadanoff donne l'année suivante une justification à l'hypothèse d'*homogénéité* en suggérant une nouvelle méthode d'analyse du modèle d'Ising au voisinage du point critique. Il divise le réseau en *blocs* de dimension grande devant le pas du réseau mais petite devant la longueur de corrélation et suppose que chaque bloc se comporte alors comme un spin unique, les interactions initiales entre spins étant *renormalisées* au cours du processus. Cette hypothèse de *similarité* conduit à l'homogénéité de la partie singulière de l'énergie libre, mais également à celle de la fonction de corrélation (KADANOFF 1966, KADANOFF 1976). A ces hypothèses s'ajoute celle d'*universalité* qui complète la vision que l'on peut avoir des phénomènes critiques en 1970. Il semble en effet acquis à cette date que les exposants critiques dépendent de la dimension d'espace d , de la dimension n du paramètre d'ordre, de

la portée des interactions et des symétries de l'hamiltonien considéré, mais qu'ils ne dépendent ni de la nature ou de la forme des interactions microscopiques, ni de la structure du réseau (STANLEY 1974, STANLEY, CHANG, HARBUS et LIU 1976). La théorie des transitions de phase du second ordre forme alors un ensemble cohérent construit sur des bases suffisamment solides pour que C Domb et MS Green décident la publication d'une série en quatre volumes qui ferait le point sur la question. La série en comporte aujourd'hui quatorze, ce qui mesure l'étendue des travaux accomplis depuis.

La construction de Kadanoff correspond à la vision "moderne" de fluctuations formant des structures *auto-similaires* (ou *fractales*) au point critique. Elle constitue un point de départ pour la notion de *groupe de renormalisation*, introduite dans le domaine des phénomènes critiques par Wilson en 1971. Cette nouvelle technique, issue de théorie quantique des champs, apporte des méthodes perturbatives efficaces pour déterminer les exposants critiques par des développements au voisinage de solutions exactes : développements en $\varepsilon = 4 - d$ (WILSON et KOGUT 1974, KADANOFF, HOUGHTON et YALABIK 1976) et développements en $1/n$ (MA 1976). C'est le cas des modèles proches de leur dimension critique supérieure d_c à partir de laquelle la théorie de Ginzburg-Landau devient exacte (GINZBURG 1961, FISHER 1966). Le *groupe de renormalisation* constitue aussi le cadre d'une discussion générale sur les différents types de comportements critiques, à travers des notions telles que l'*espace des paramètres* ou les *flots de renormalisation* et les *points fixes* (DOMB et GREEN 1976). A cette approche issue de théorie des champs et principalement appliquée aux systèmes tridimensionnels, il faut ajouter le développement des méthodes d'*effets de taille finie* (BARBER 1983) qui concernent plutôt les modèles bidimensionnels ainsi que l'étude des comportements critiques de surface (BINDER 1983, DIEHL 1986).

Les résultats exacts acquis dans le même temps à propos des modèles bidimensionnels font apparaître des observations supplémentaires restées inexpliquées jusque-là :

- Les exposants critiques des modèles "simples" (Ising, Potts, ...) s'expriment

sous forme de rapports de nombres entiers.

– Les amplitudes des longueurs de corrélation sont des quantités universelles directement reliées aux exposants critiques (relation *gap-exposant*).

Un apport important de la théorie des cordes en physique des particules élémentaires fournit une explication aux observations mentionnées plus haut. Il réside dans l'utilisation de l'hypothèse d'invariance conforme et constitue le fait marquant de ces dernières années. Si, dès 1970, Polyakov remarque que les fluctuations critiques auto-similaires sont aussi invariantes par dilatation locale (POLYAKOV 1970), ce n'est que très récemment que l'*invariance conforme* a été pleinement exploitée en dimension deux (BELAVIN, POLYAKOV et ZAMOLODCHIKOV 1984a). La notion d'*invariance conforme* constitue un véritable avènement dans ce domaine, puisque la plupart des comportements critiques bidimensionnels possibles sont connus indépendamment de tout modèle microscopique. Elle apporte en même temps une réponse au mystère jusqu'alors irrésolu de la valeur fractionnaire des exposants critiques à $2d$ (FRIEDAN, QIU et SHENKER 1987), elle donne une justification à la relation *gap-exposant* et fournit de nouvelles méthodes performantes d'investigation des comportements critiques bidimensionnels.

Cette thèse s'inscrit dans ce domaine passionnant, très en vogue actuellement. Elle est consacrée à l'étude de modèles bidimensionnels perturbés, au calcul de leurs exposants critiques et à l'application de certaines méthodes issues de l'invariance conforme afin d'en explorer les limites de validité. Que les fluctuations critiques soient conformément covariantes n'a été rigoureusement établi que pour quelques modèles homogènes (Ising, Potts). L'hypothèse de validité de l'invariance conforme pour certains systèmes perturbés constitue donc la clé de ce travail. Etayée par des résultats antérieurs, elle est testée sur de nouveaux modèles.

Le premier chapitre présente les résultats essentiels liés à l'utilisation des méthodes dites d'effets de taille finie ainsi qu'à celle de l'invariance conforme.

Dans le deuxième chapitre, deux types de perturbations homogènes sont

envisagés sur le modèle d'Ising bidimensionnel et leurs propriétés critiques sont déterminées et comparées à celles que l'on peut déduire en supposant que l'invariance conforme est préservée.

La même démarche est appliquée dans le dernier chapitre où sont étudiées des perturbations inhomogènes.

1

Généralités sur les phénomènes critiques, modèle d'Ising et invariance conforme

1. Introduction

Les transitions de phase du second ordre résultent d'une brisure spontanée de symétrie (LANDAU 1937, LANDAU et LIFSHITZ 1984). Le système physique passe d'une phase désordonnée symétrique (en général celle de plus haute température) à une phase ordonnée de symétrie moindre. Il est décrit par une densité d'énergie qui est une fonction de variables locales $\phi(r)$ dont la moyenne $m = \langle \phi(r) \rangle$ constitue le paramètre d'ordre. $\phi(r)$ est une variable scalaire, vectorielle ou tensorielle. L'invariance de la fonction de partition par certaines transformations, comme le changement de signe $\phi(r) \longrightarrow -\phi(r)$ dans le cas du modèle d'Ising, conduit à un paramètre d'ordre nul dans la phase symétrique, alors que celui-ci choisit l'une des deux orientations autorisées dans la phase ordonnée (Figure 1.1). C'est une brisure spontanée de symétrie résultant de fluctuations accidentelles.

Le paramètre d'ordre varie continûment au point critique. Son comportement est généralement décrit par une loi de puissance qui définit l'exposant critique β :

$$m(T) = A_m |T - T_c|^\beta \quad T < T_c, \quad H = 0 \quad (1.1)$$

La fonction de corrélation réduite

$$G(r, T) = \langle \phi(0)\phi(r) \rangle - \langle \phi(0) \rangle^2 \quad (1.2)$$

mesure les fluctuations. En dehors du point critique, elle définit l'échelle des longueurs physiques $\xi(T)$:

$$G(r, T) \sim \exp(-r/\xi(T)) \quad H = 0, \quad T \neq T_c \quad (1.3)$$

et décroît algébriquement au point critique :

$$G(r, T_c) = C r^{-d+2-\eta} \quad H = 0, \quad T = T_c \quad (1.4)$$

La longueur de corrélation $\xi(T)$ diverge au point critique :

$$\xi(T) = A_\xi^\pm |T - T_c|^{-\nu} \quad H = 0 \quad (1.5)$$

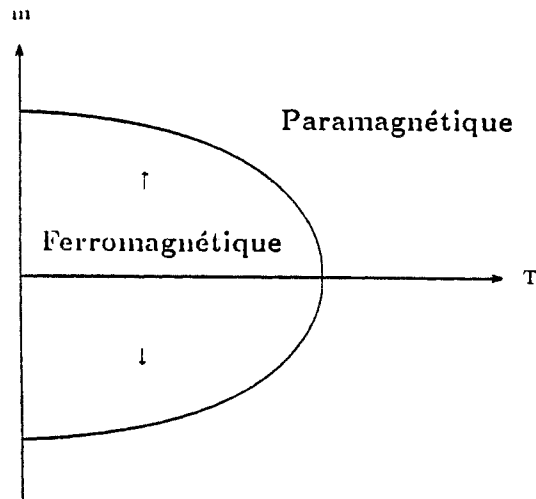


Figure 1.1

Diagramme de phase du modèle d'Ising.

De même, les autres grandeurs thermodynamiques présentent des singularités au point de transition. Pour une transition de type magnétique, les comportements au voisinage de la singularité sont donnés par les lois de puissance suivantes :

- isotherme critique :

$$m(H) = B_m |H - H_c|^{1/\delta} \quad T = T_c \quad (1.6)$$

- susceptibilité :

$$\chi(T) = A_{\chi}^{\pm} |T - T_c|^{-\gamma} \quad H = 0 \quad (1.7)$$

- chaleur spécifique :

$$C(T) = A_C^{\pm} |T - T_c|^{-\alpha} \quad H = 0 \quad (1.8)$$

La notation A_{χ}^+ (respectivement A_{χ}^-) dans (1.5), (1.7) et (1.8) pour l'amplitude des singularités se réfère à $T > T_c$ (respectivement $T < T_c$).

Parmi les paramètres associés à une transition de phase, la température critique T_c dépend des détails du modèle. Ce n'est en revanche pas le cas des exposants critiques définis par les relations (1.1) à (1.8), ni de certaines combinaisons d'amplitudes (PRIVMAN, HOHENBERG et AHARONY 1990). Cette propriété d'universalité s'avère plus remarquable encore puisque certains modèles théoriques (ou systèmes physiques) différents peuvent présenter des comportements critiques analogues décrits par des exposants identiques. Ils appartiennent alors à la même classe d'universalité (FISHER 1966, KADANOFF et al 1967).

L'un des buts de la physique des transitions de phase est d'établir un inventaire des comportements critiques. Cela passe naturellement par la détermination des exposants critiques. Les solutions exactes sont rares, aussi de nombreuses techniques ont-elles été développées pour obtenir des résultats approchés. C'est le cas des méthodes d'effets de taille finie (*finite-size scaling*, FISHER 1971, BARBER 1983) qui permettent de déduire le comportement singulier d'un système infini à son point critique des propriétés régulières du système fini correspondant. Ces méthodes se sont développées dans le cadre des hypothèses d'homogénéité et ont été appliquées à de nombreux modèles théoriques (CARDY 1988a, PRIVMAN 1990). En dimension deux, les propriétés de covariance conforme au point critique, exploitées ces dernières années, ont fourni des solutions analytiques ou numériques à un grand nombre de problèmes (ITZYKSON, SALEUR et ZUBER 1988).

L'objet de ce premier chapitre étant de retracer quelques généralités sur les phénomènes critiques, on montre, après l'avoir rapidement présenté, que le modèle d'Ising bidimensionnel est équivalent dans la limite anisotrope extrême (limite hamiltonienne, HENKEL 1990) à un modèle quantique unidimensionnel (le modèle d'Ising dans un champ transverse). On aborde ensuite la notion de groupe de renormalisation et celle d'homogénéité qui est exploitée pour déduire les effets de taille finie, puis l'invariance conforme en dimension deux et son application aux modèles définis sur rubans. Ces méthodes sont enfin illustrées par l'étude du comportement critique du modèle d'Ising bidimensionnel homogène.

2. Le modèle d'Ising

2.1 Le modèle d'Ising bidimensionnel

Le modèle de Lenz-Ising (LENZ 1920) a été introduit comme une description du ferromagnétisme. Il consiste en une assemblée de moments magnétiques (variables réelles $s_{\alpha,\ell}$ pouvant prendre les valeurs ± 1) situés aux nœuds d'un réseau et correspondants à des spins $1/2$ avec anisotropie axiale extrême. Le modèle a été résolu à une dimension par Ising (1925) et à deux dimensions par Onsager (1944).

Dans le cas d'un modèle anisotrope bidimensionnel et pour des couplages de type ferromagnétique limités aux premiers voisins, l'énergie d'une configuration $\{s\}$ s'écrit :

$$H'\{s\} = - \sum_{\alpha=1}^{n_t} \sum_{\ell=1}^L \left(J_t s_{\alpha,\ell} s_{\alpha+1,\ell} + J_s s_{\alpha,\ell} s_{\alpha,\ell+1} \right) \quad J_t > 0, \quad J_s > 0 \quad (1.9)$$

où J_t et J_s sont les couplages dans les deux directions (temporelle t et spatiale s) (Figure 1.2). On utilise des conditions aux limites périodiques dans la direction temporelle.

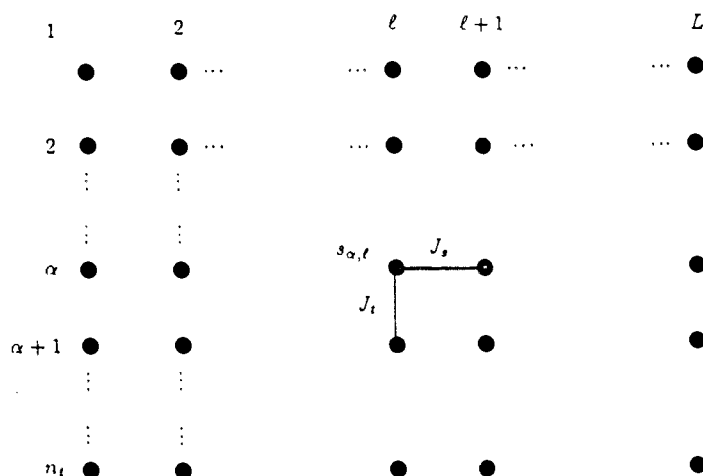


Figure 1.2

Modèle de Lenz-Ising à 2d.

Le modèle présente une transition de phase à température finie. Le point critique peut être localisé par des arguments de dualité (KRAMERS et WANNIER 1941, SAVIT 1980). On obtient ainsi l'équation de la ligne critique :

$$\sinh(2\beta_t^c) \sinh(2\beta_s^c) = 1 \quad (1.10a)$$

$$\beta_t = J_t/k_B T \quad , \quad \beta_s = J_s/k_B T \quad (1.10b)$$

qui sépare les phases paramagnétique et ferromagnétique dans l'espace des paramètres (Figure 1.3).

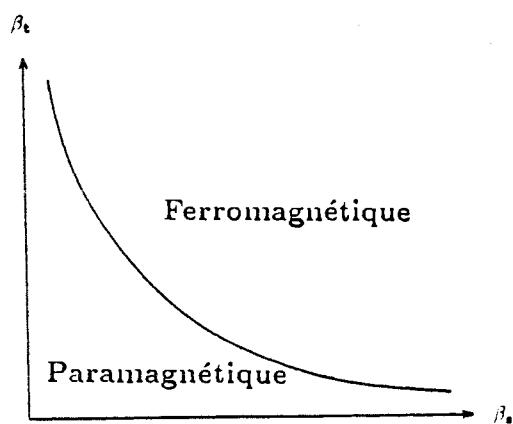


Figure 1.3

Diagramme de phase du modèle d'Ising 2d dans l'espace des paramètres β_s, β_t .

Les exposants critiques sont indépendants de la symétrie du réseau ou de l'anisotropie des interactions (Mc COY et WU 1973) :

$$\alpha = 0, \beta = 1/8, \gamma = 7/4, \delta = 15, \eta = 1/4, \nu = 1 \quad (1.11)$$

2.2 Limite hamiltonienne et modèle d'Ising dans un champ transverse

La formulation de Feynman (1948) de la mécanique quantique permet d'établir une équivalence entre un modèle classique à d dimensions et un modèle quantique à $d - 1$ dimensions. Le modèle d'Ising bidimensionnel peut ainsi être reformulé dans la limite anisotrope extrême en un modèle quantique à une dimension présentant une transition de phase à $T = 0$ et appartenant à la classe d'universalité d'Ising (SUZUKI 1971 et 1976, FRADKIN et SUSSKIND 1978, KOGUT 1979, JULLIEN 1981, POLYAKOV 1987).

Pour cela, on écrit l'énergie d'une configuration (1.9) en modifiant le zéro des énergies et en incluant la température dans les couplages :

$$H\{s\} = \sum_{\alpha=1}^{n_t} \sum_{\ell=1}^L \left(\frac{1}{2} \beta_t (s_{\alpha,\ell} - s_{\alpha+1,\ell})^2 - \beta_s s_{\alpha,\ell} s_{\alpha,\ell+1} \right) \quad (1.12)$$

Cette expression est une somme sur les lignes α du réseau :

$$H\{s\} = \sum_{\alpha=1}^{n_t} \mathcal{L}(\alpha, \alpha + 1) \quad (1.13a)$$

$$\mathcal{L}(\alpha, \alpha + 1) = \frac{1}{2} \beta_t \sum_{\ell=1}^L \left(s_{\alpha,\ell} - s_{\alpha+1,\ell} \right)^2 - \beta_s \sum_{\ell=1}^L s_{\alpha,\ell} s_{\alpha,\ell+1} \quad (1.13b)$$

On définit alors la matrice de transfert $\mathbf{T}(\alpha, \alpha + 1)$ par ses éléments de matrice dans la base des configurations de spins :

$$\langle \{\alpha\} | \mathbf{T}(\alpha, \alpha + 1) | \{\alpha + 1\} \rangle = \exp(-\mathcal{L}(\alpha, \alpha + 1)) \quad (1.14)$$

où $|\{\alpha\}\rangle$ représente une configuration de la rangée α . La matrice de transfert de dimension $2^L \times 2^L$, interprétée comme l'opérateur de transition d'une rangée α à la rangée suivante $\alpha + 1$, est identifiée à l'opérateur d'évolution d'un système quantique dans la direction temporelle :

$$e^{-\tau \mathcal{H}}$$

où $\tau = +it$ est le pas du réseau dans la direction temporelle, $\mathcal{H}$ un hamiltonien à définir et $\hbar = 1$. L'amplitude de transition de la rangée α à la rangée $\alpha + 1$ présentant n spins inversés par rapport à la précédente s'écrit sous la forme :

$$\langle \{\alpha\} | \mathbf{T}(\alpha, \alpha + 1) | \{\alpha + 1\} \rangle_n = \exp(-2n\beta_t) \exp\left(\beta_s \sum_{\ell=1}^L s_{\alpha, \ell} s_{\alpha, \ell+1}\right) \quad (1.15)$$

où la somme sur ℓ se réfère à la configuration $\{\alpha\}$.

Dans la limite anisotrope extrême

$$\beta_s \longrightarrow 0, \quad \beta_t \longrightarrow \infty$$

on pose

$$\beta_s = \lambda e^{-2\beta_t}$$

ce qui conduit à écrire les amplitudes de transition à 0, 1, ..., n spins inversés :

$$\langle \{\alpha\} | \mathbf{T}(\alpha, \alpha + 1) | \{\alpha + 1\} \rangle_0 = 1 + \lambda e^{-2\beta_t} \sum_{\ell=1}^L s_{\alpha, \ell} s_{\alpha, \ell+1} \quad (1.16a)$$

$$\langle \{\alpha\} | \mathbf{T}(\alpha, \alpha + 1) | \{\alpha + 1\} \rangle_1 = e^{-2\beta_t} + O(e^{-4\beta_t}) \quad (1.16b)$$

$$\langle \{\alpha\} | \mathbf{T}(\alpha, \alpha + 1) | \{\alpha + 1\} \rangle_n = e^{-2n\beta_t} + O(e^{-2(n+1)\beta_t}) \quad (1.16c)$$

L'utilisation des matrices de Pauli $\sigma_x(\ell)$, $\sigma_z(\ell)$ définies sur chaque site ($1 \leq \ell \leq L$) permet d'identifier facilement les éléments de matrice (1.16). En travaillant dans la base des états propres de σ_x , l'élément diagonal (1.16a) s'écrit en effet :

$$\langle \{\alpha\} | \mathbb{1} + \lambda e^{-2\beta_t} \sum_{\ell=1}^L \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell + 1) | \{\alpha + 1\} \rangle_0 \quad (1.17)$$

De même, (1.16b) fait intervenir un opérateur σ_z inversant un spin entre les deux configurations $\{\alpha\}$ et $\{\alpha + 1\}$:

$$\langle \{\alpha\} | e^{-2\beta_t} \sum_{\ell=1}^L \sigma_z(\ell) | \{\alpha + 1\} \rangle_1 \quad (1.18)$$

On en déduit simplement la matrice de transfert

$$\mathbf{T}(\alpha, \alpha + 1) = \mathbb{1} + e^{-2\beta_t} \left(\lambda \sum_{\ell=1}^L \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell + 1) + \sum_{\ell=1}^L \sigma_z(\ell) \right) + e^{-4\beta_t} \sum_{\substack{\ell, m=1 \\ \ell \neq m}}^L \sigma_z(\ell) \sigma_z(m) + \dots \quad (1.19)$$

La limite anisotrope extrême permet de se limiter aux deux premiers termes et, lorsque le continuum est restauré dans la direction temporelle $\tau \rightarrow 0$, on a :

$$e^{-\tau \mathcal{H}} = \mathbb{1} - \tau \mathcal{H} + O(\tau^2) \quad (1.20)$$

de sorte qu'en posant

$$\tau = e^{-2\beta_t}$$

l'hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = -\lambda \sum_{\ell=1}^L \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) - \sum_{\ell=1}^L \sigma_z(\ell) \quad (1.21)$$

C'est l'hamiltonien du modèle d'Ising dans un champ transverse. On peut mettre en évidence de façon explicite la relation entre (1.21) et les couplages initiaux du modèle classique β_t et β_s , en notant que $\mathcal{H}$ est proportionnel à l'hamiltonien

$$-\beta_s \sum_{\ell=1}^L \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) - \tilde{\beta}_t \sum_{\ell=1}^L \sigma_z(\ell) \quad (1.22)$$

où $\tilde{\beta}_t$ est le couplage dual de β_t dans la limite hamiltonienne (KRAMERS et WANNIER 1941) :

$$\tilde{\beta}_t \simeq \tanh \beta_t = e^{-2\beta_t} \quad (1.23)$$

Le point critique du modèle défini par l'hamiltonien (1.21) s'obtient en remarquant que, dans la limite anisotrope extrême, la courbe $\beta_s = e^{-2\beta_t}$ est asymptote à la ligne critique (1.10a) (Figure 1.4).

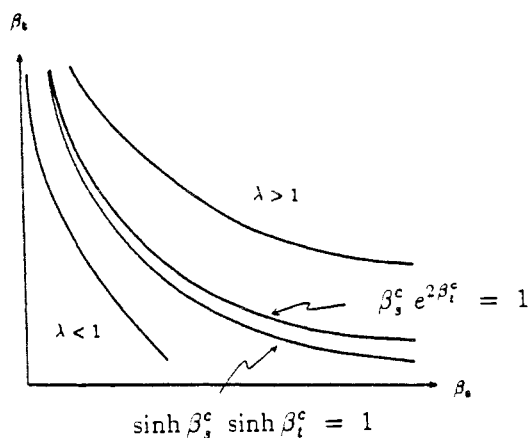


Figure 1.4

Diagramme de phase et limite hamiltonienne.

On a donc

- $\lambda = 1$ au point critique
- $\lambda > 1$ dans la phase ordonnée
- $\lambda < 1$ dans la phase désordonnée

le rôle de la température étant joué par λ^{-1} :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\tilde{\beta}_t}{\beta}, \quad (1.24)$$

2.3 Energie libre et fonction de corrélation dans la limite hamiltonienne

Avec des conditions aux limites périodiques dans la direction temporelle, la fonction de partition $\mathcal{Z}$ est donnée par :

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} (\mathbf{T}^{n_t}) \quad (1.25)$$

Dans la limite $n_t \rightarrow \infty$, en introduisant la relation de fermeture, $\mathbf{T}^{n_t}$ se réduit à :

$$\mathbf{T}^{n_t} = \sum_{\beta} |\beta\rangle e^{-n_t \tau \mathcal{H}} \langle \beta| \simeq |0\rangle e^{-n_t \tau E_0} \langle 0| \quad (1.26)$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental de $\mathcal{H}$ d'énergie E_0 et $|\beta\rangle$ un état excité d'énergie E_{β} . L'énergie libre F s'écrit alors :

$$\frac{F}{k_B T} = - \lim_{n_t \rightarrow \infty} \ln \text{Tr} e^{-n_t \tau \mathcal{H}} = +n_t \tau E_0 \quad (1.27)$$

ce qui établit une correspondance entre la densité d'énergie libre du modèle bidimensionnel f et la densité d'énergie dans l'état fondamental ω_0 du modèle quantique (KOGUT 1979).

L'analogie peut être poursuivie : pour tout opérateur local ϕ , la fonction de corrélation évaluée dans la direction temporelle s'écrit (BOCCARA et SARMA 1974, KOGUT 1979) :

$$G_{\phi}(n, \ell) = \langle \phi(n, \ell) \phi(0, 0) \rangle - \langle \phi(0, 0) \rangle^2 \quad (1.28)$$

où n et ℓ sont respectivement les coordonnées dans les directions temporelle et spatiale de la chaîne de spins. L'opérateur d'évolution permet d'écrire les corrélations sous la forme :

$$\langle \phi(n, \ell) \phi(0, 0) \rangle = \lim_{n_t \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr } e^{-(n_t - n)\tau \mathcal{H}} \phi(0, \ell) e^{-n\tau \mathcal{H}} \phi(0, 0)}{\text{Tr } e^{-n_t \tau \mathcal{H}}} \quad (1.29)$$

La limite $n_t \rightarrow \infty$ sélectionne l'état fondamental et, avec la relation de fermeture, on obtient :

$$\langle \phi(n, \ell) \phi(0, 0) \rangle = \sum_{\beta} \langle 0 | \phi(0, \ell) | \beta \rangle \langle \beta | \phi(0, 0) | 0 \rangle \exp[-n\tau(E_{\beta} - E_0)] \quad (1.30)$$

avec $\mathcal{H} | \beta \rangle = E_{\beta} | \beta \rangle$. Cette expression est analogue à la moyenne du produit $\phi(n, \ell) \phi(0, 0)$ dans l'état fondamental, $\phi(n, \ell)$ étant écrit en représentation de Heisenberg (LAJZEROWICZ et PFEUTY 1975, SHENKER 1982, LE BELLAC 1988) :

$$\phi(n, \ell) = e^{n\tau \mathcal{H}} \phi(0, \ell) e^{-n\tau \mathcal{H}} \quad (1.31a)$$

On peut ensuite exploiter l'invariance par translation et définir un opérateur unitaire à partir de l'impulsion $\mathcal{P}$, $\mathcal{U}_t = \exp(i\ell a \mathcal{P})$, pour écrire (SCHIFF 1968) :

$$\phi(0, \ell) = e^{-i\ell a \mathcal{P}} \phi(0, 0) e^{i\ell a \mathcal{P}} \quad (1.31b)$$

où a est le paramètre du réseau dans la direction spatiale. Les opérateurs $\mathcal{H}$ et $\mathcal{P}$ commutant, l'expression (1.30) s'écrit dans la base des états propres communs $\{| \beta \rangle\}$:

$$\langle \phi(n, \ell) \phi(0, 0) \rangle = \sum_{\beta} \langle 0 | \phi(0, 0) e^{i\ell a \mathcal{P}_{\beta}} | \beta \rangle \langle \beta | \phi(0, 0) | 0 \rangle \exp[-n\tau(E_{\beta} - E_0)] \quad (1.32)$$

avec $\mathcal{P} | \beta \rangle = P_{\beta} | \beta \rangle$ et l'impulsion dans l'état fondamental $P_0 = 0$. Quand $n \rightarrow \infty$, et après avoir soustrait la contribution $\langle \phi(0, 0) \rangle^2$, la somme (1.32) est dominée par le premier état excité $| \alpha \rangle$ tel que l'élément de matrice $\langle 0 | \phi(0, 0) | \alpha \rangle$ soit non nul :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} G_{\phi}(n, 0) \sim |\langle 0 | \phi(0, 0) | \alpha \rangle|^2 \exp[-n\tau(E_{\alpha} - E_0)] \quad (1.33)$$

Cette expression présente la forme caractéristique d'une fonction de corrélation en dehors du point critique (1.3). L'argument de l'exponentielle, comparé à (1.3), conduit à la longueur de corrélation ξ_ϕ :

$$\frac{1}{\xi_\phi} \sim E_\alpha - E_0$$

Cette relation n'est cependant pas homogène (les distances sont évaluées en unités de temps), ce qui nous amène à introduire une grandeur ζ ayant les dimensions d'une vitesse (avec $\hbar = 1$) :

$$\frac{1}{\xi_\phi} = \frac{1}{\zeta}(E_\alpha - E_0) \quad (1.34)$$

Dans le cas où il existe une relation de dispersion linéaire aux grandes longueurs d'onde, les énergies d'excitation s'écrivent :

$$\Lambda_k \simeq \zeta |k|, \quad |k| \rightarrow 0$$

ζ , appelée vitesse du son, est la vitesse de propagation des excitations le long de la chaîne quantique et l'on peut normer convenablement l'hamiltonien afin d'obtenir $\zeta = 1$.

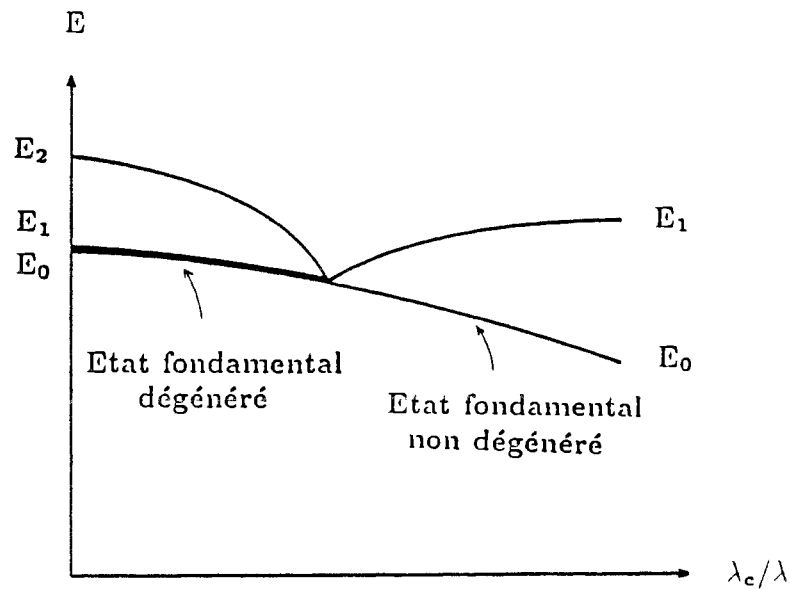


Figure 1.5

Fermeture des gaps au point critique.

La relation (1.34) est à la base de nombreux calculs sur les modèles quantiques et sera très utilisée dans la suite de ce travail. Qualitativement, on en déduit que pour un système infini au point critique pour lequel ξ_ϕ diverge avec L , les gaps correspondants $E_\alpha - E_0$ dans le spectre de $\mathcal{H}$ s'annulent (Figure 1.5) (PFEUTY 1976). La dégénérescence de l'état fondamental caractérise l'apparition d'ordre à grande distance dans le système.

3. Homogénéité, effets de taille finie

3.1 Groupe de renormalisation et homogénéité

Un système au voisinage d'une transition du second ordre est le siège de fluctuations critiques auto-similaires dont la taille varie entre le paramètre du réseau a et la longueur de corrélation ξ . Au point critique, ξ diverge et, dans la limite continue, le système a le même aspect à toutes les échelles : il est invariant par changement d'échelle (Figure 1.6).

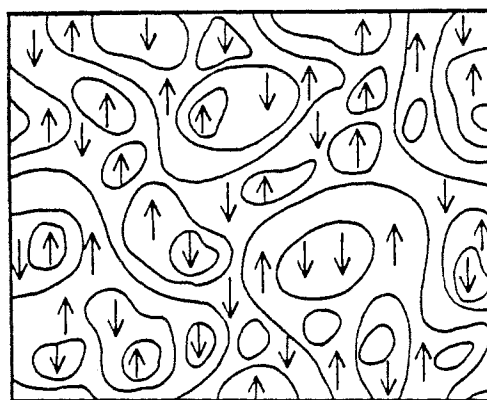


Figure 1.6

Auto-similarité d'un système à son point critique.

L'auto-similarité des fluctuations critiques à l'intérieur du volume de corrélation ξ^d entraîne l'homogénéité des parties singulières des fonctions thermodynamiques (WIDOM 1965, KADANOFF 1966, PATASHINSKII et PROKOVSKII 1966, FISK et WIDOM 1969) à l'origine des lois d'échelle reliant les exposants critiques

(FISHER 1967, STANLEY 1971, KADANOFF 1971). Cette homogénéité se démontre par les méthodes du groupe de renormalisation (KADANOFF 1966, WILSON 1971, MA 1973, FISHER 1974, WILSON et KOGUT 1974). Le comportement critique résultant des fluctuations à toutes les échelles de longueur inférieures à ξ , il met en jeu un nombre considérable de degrés de liberté. La technique de renormalisation consiste à les éliminer progressivement en intégrant dans la fonction de partition sur toutes les fluctuations dont la longueur d'onde est comprise entre a et ba ($b > 1$).

Pour un système d'hamiltonien :

$$-\beta H = \sum_{\vec{n}} \sum_{\alpha} K_{\alpha} \phi_{\alpha}(\vec{n}) \quad (1.35)$$

où les K_{α} sont les couplages associés aux variables locales $\phi(\vec{n})$ sur un réseau de paramètre a , on obtient après intégration un hamiltonien effectif :

$$-\beta H' = \sum_{\vec{n}'} \sum_{\alpha} K'_{\alpha} \phi'_{\alpha}(\vec{n}') \quad (1.36)$$

où les $\phi'_{\alpha}(\vec{n}')$ sont aux nœuds d'un réseau de paramètre $a' = ba$. En ramenant le paramètre du réseau à sa valeur initiale, on retrouve le système de départ avec des couplages modifiés (renormalisés) (Figure 1.7) :

$$\mathbf{K}' = \mathcal{R}_b[\mathbf{K}] \quad , \quad \mathbf{K} = \{K_{\alpha}\} \quad (1.37)$$

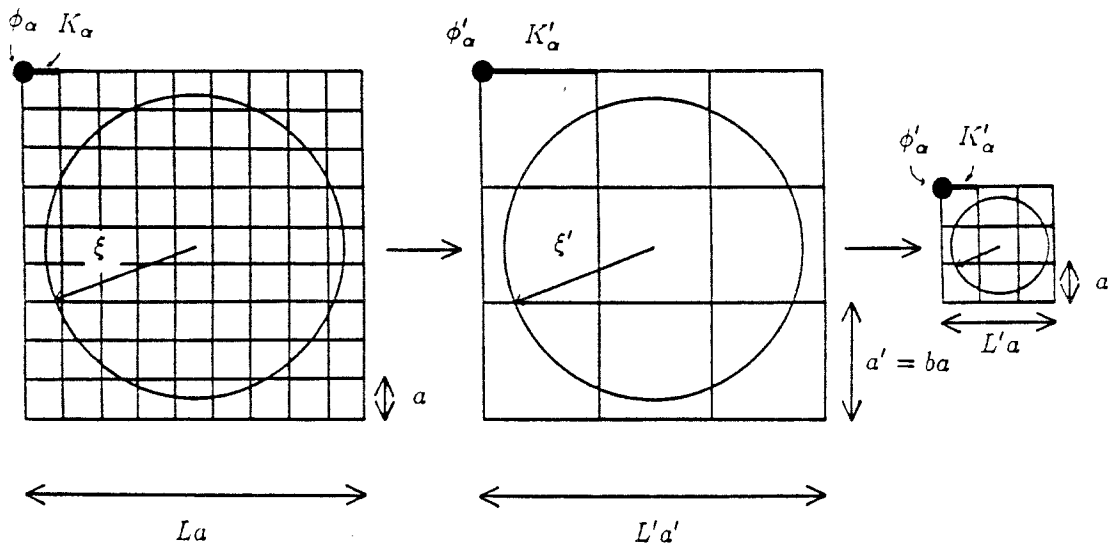


Figure 1.7

Transformations de renormalisation.

Lorsque de nouveaux types de couplages apparaissent, il est nécessaire d'étendre l'espace des paramètres en les incluant dans H .

Au cours de ces opérations, les longueurs sont divisées par b :

$$\xi' = \xi/b \quad (1.38)$$

et, la transformation conservant la fonction de partition

$$\mathcal{Z}(K_\alpha, \phi_\alpha) = \mathcal{Z}(K'_\alpha, \phi'_\alpha) \quad (1.39)$$

la densité d'énergie libre est multipliée par b^d .

On réalise ainsi une transformation d'échelle du système que l'on peut itérer. Cette transformation admet un (ou plusieurs) point fixe dans l'espace des paramètres :

$$\mathbf{K}^* = \mathcal{R}_b[\mathbf{K}^*] \quad (1.40)$$

vers lequel est éventuellement attiré par renormalisation tout système dont les couplages $K_{\alpha c}$ sont critiques (Figure 1.8).

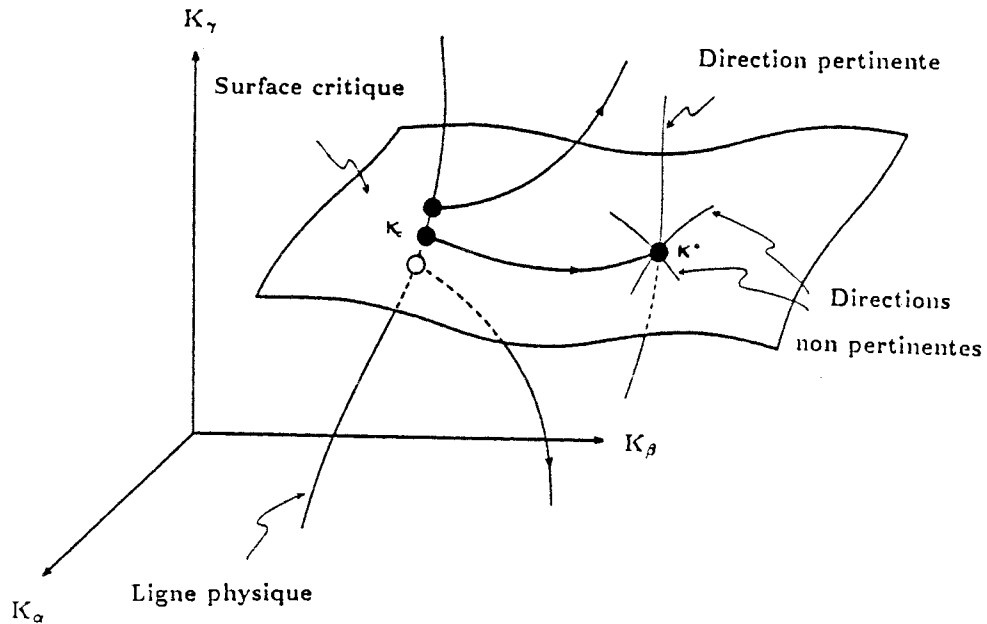


Figure 1.8

Renormalisation vers un point fixe stable.

La relation de renormalisation des couplages (1.37), linéarisée au voisinage du point fixe (TOULOUSE et PFEUTY 1975, NIEMEIJER et VAN LEEUWEN 1976, MA 1976, LE BELLAC 1988), conduit à une relation matricielle :

$$K'_\alpha - K_\alpha^* = \sum_\beta \left(\frac{\partial \mathcal{R}_{b\alpha}}{\partial K_\beta} \right)_{K_\beta^*} (K_\beta - K_\beta^*) \quad (1.41)$$

On définit les champs d'échelle

$$g_i = \sum_\alpha \varphi_\alpha^i (K_\alpha - K_\alpha^*) \quad (1.42)$$

où les φ_α^i sont les vecteurs propres à gauche de la matrice

$$T_{\alpha\beta}^*(b) = \left(\frac{\partial \mathcal{R}_{b\alpha}}{\partial K_\beta} \right)_{K_\beta^*} \quad (1.43)$$

satisfaisant à

$$\sum_\alpha \varphi_\alpha^i T_{\alpha\beta}^*(b) = \lambda_i(b) \varphi_\beta^i \quad (1.44)$$

de sorte que

$$g'_i = \lambda_i(b) g_i \quad (1.45)$$

Deux changements d'échelle successifs de facteurs de dilatation b_1 et b_2 étant équivalents à un changement d'échelle unique de facteur de dilatation $b_1 b_2$, on doit avoir la relation fonctionnelle :

$$\lambda_i(b_1) \lambda_i(b_2) = \lambda_i(b_1 b_2) \quad (1.46)$$

qui impose

$$\lambda_i(b) = b^{y_i} \quad (1.47)$$

où y_i est la dimension anormale du champ d'échelle g_i . Au point fixe, tous les g_i sont nuls.

La trajectoire d'un système dans l'espace des paramètres dépend du signe des dimensions anormales.

- Quand $y_i > 0$, le champ d'échelle g_i augmente par renormalisation (d'après (1.45)). C'est un champ pertinent. Lorsqu'un tel champ est non nul, le point représentatif s'éloigne de la surface critique (Figure 1.8).

- Quand $y_i < 0$, le champ d'échelle diminue et il est dit non pertinent.
- Le cas $y_i = 0$ correspond à un champ d'échelle marginal.

Sur la surface critique, les champs pertinents sont nuls et le point représentatif du système est attiré vers le point fixe, les champs non pertinents diminuant par renormalisation. En présence d'un champ marginal, le système présente sur la surface critique une ligne de points fixes vers laquelle il est attiré. Les propriétés critiques (exposants) dépendent alors de la valeur du champ marginal qui reste inchangée par renormalisation (Figure 1.9).

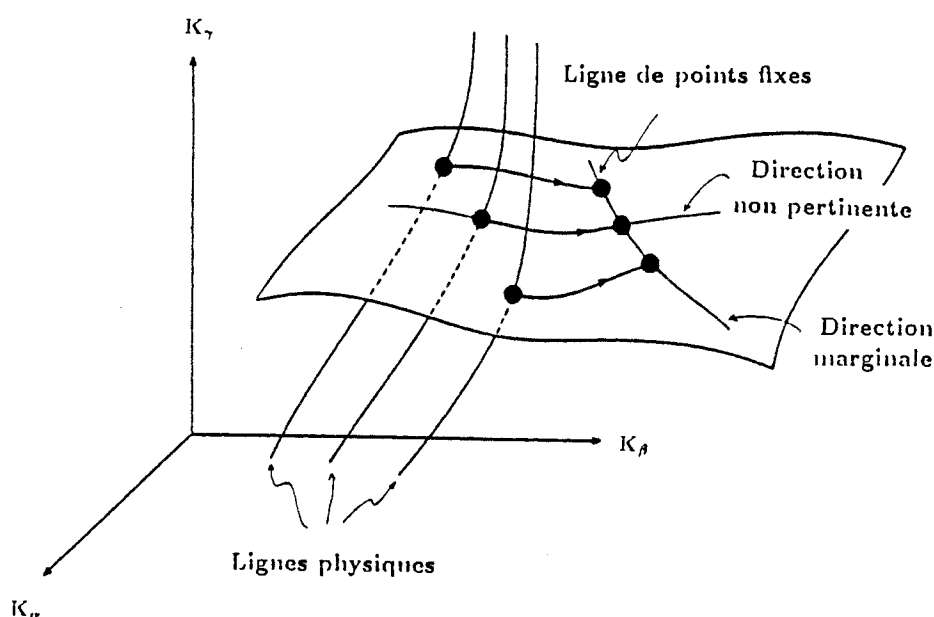


Figure 1.9

Renormalisation vers une ligne de points fixes stables.

Les propriétés critiques de tous les systèmes qui appartiennent au bassin attracteur d'un point fixe sur la surface critique sont gouvernées par ce point fixe : c'est la traduction de l'universalité dans le langage du groupe de renormalisation. Au voisinage d'un point fixe, l'hamiltonien s'écrit :

$$-\beta H = -\beta H^* + \sum_{\vec{n}} \sum_i g_i \phi_i(\vec{n}) \quad (1.48)$$

où les $\phi_i(\vec{n})$, opérateurs conjugués aux champs d'échelle g_i , se transforment suivant :

$$\phi'_i = b^{x_i} \phi_i \quad (1.49)$$

Le produit $g_i \phi_i$ étant une densité d'énergie, on a :

$$\phi'_i g'_i = b^d \phi_i g_i \quad (1.50)$$

de sorte que

$$x_i + y_i = d \quad (1.51)$$

On montre que, dans un changement d'échelle, la partie singulière de la densité d'énergie libre se transforme suivant :

$$f'_s = f_s\{g'_i\} = b^d f_s\{g_i\} \quad (1.52)$$

C'est donc une fonction homogène généralisée des champs d'échelle :

$$f_s\{g_i\} = b^{-d} f_s\{b^{y_i} g_i\} \quad (1.53)$$

Par dérivation, on obtient des relations analogues pour les autres grandeurs thermodynamiques. Pour une grandeur F de dimension x_F , on aura :

$$F\{g_i\} = b^{-x_F} F\{b^{y_i} g_i\} \quad (1.54)$$

Cette propriété d'homogénéité s'étend également aux fonctions de corrélation pour lesquelles :

$$G_{\phi_1 \phi_2 \dots}(\{\vec{r}_i\}, \{g_i\}) = b^{-(x_1 + x_2 + \dots)} G_{\phi_1 \phi_2 \dots}(\{\frac{\vec{r}_i}{b}\}, \{b^{y_i} g_i\}) \quad (1.55)$$

Les exposants critiques s'expriment en fonction de d et des dimensions y_i des champs d'échelle pertinents en nombre restreint, ce qui conduit aux lois d'échelle. Pour un modèle de spins par exemple, les champs d'échelle et leurs opérateurs conjugués sont respectivement le champ magnétique h et l'aimantation σ d'une part, la température réduite

$$t = \frac{|T - T_c|}{T_c}$$

et la densité d'énergie ε d'autre part. L'expression (1.53) s'écrit alors :

$$f_s(t, h) = b^{-d} f(b^{y_t} t, b^{y_h} h) \quad (1.56)$$

Puisque b est un paramètre libre, le choix

$$b = t^{-1/y_t}$$

à champ nul, conduit à l'exposant α de la chaleur spécifique :

$$f_s(t, 0) = t^{d/y_t} f_s(1, 0) \sim t^{2-\alpha} \quad (1.57)$$

d'où

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} \quad (1.58)$$

Dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel, les exposants (1.11) sont compatibles avec les valeurs suivantes des dimensions anormales :

$$y_t = 1 \quad \text{et} \quad x_e = 1 \quad (1.59a)$$

$$y_h = \frac{15}{8} \quad \text{et} \quad x_m = \frac{1}{8} \quad (1.59b)$$

3.2 Les effets de taille finie

Les études numériques sont effectuées sur des modèles finis, soit dans toutes les directions (L^d), soit dans $d-1$ directions ($L^{d-1} \times \infty$), comme c'est le cas pour des systèmes définis sur ruban. Pour des interactions à courte portée, de tels systèmes ne peuvent pas donner lieu à des transitions de phase et les singularités n'apparaissent que dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$. Il est néanmoins possible de déduire les propriétés d'un système infini en étudiant le développement des singularités avec la taille L du système fini (FISHER et FERDINAND 1967, FERDINAND et FISHER 1969, FISHER 1971 et 1973a, WATSON 1972, NIGHTINGALE 1976, HAMER et BARBER 1980 et 1981, BARBER 1983, BINDER 1987, CABRERA 1990).

Les lois d'homogénéité (1.54) sont utilisées en traitant $1/L$ comme un champ d'échelle de dimension 1. Au point critique, les g_i sont nuls et (1.54) s'écrit :

$$F(\{g_i = 0\}, \frac{1}{L}) = b^{-x_F} F(\{g'_i = 0\}, \frac{b}{L}) \quad (1.60)$$

soit, en choisissant $b = L$:

$$F_L = F(\{g_i = 0\}, \frac{1}{L}) \sim L^{-x_F} \quad (1.61)$$

Dans le cas de l'aimantation ou de la susceptibilité par exemple, on obtient :

$$m_L \sim L^{-x_m} \sim L^{-\beta/\nu} \quad (1.62a)$$

$$\chi_L \sim L^{-2x_m+d} \sim L^{\gamma/\nu} \quad (1.62b)$$

et, dans la limite thermodynamique, la susceptibilité diverge ($\gamma > 0$) alors que l'aimantation s'annule ($-\beta < 0$).

4. Invariance conforme

4.1 Aperçu bibliographique

De considérables progrès ont été réalisés dans l'étude des phénomènes critiques au cours des deux dernières décennies grâce à l'utilisation des méthodes de théorie quantique des champs (BREZIN, LE GUILLOU et ZINN-JUSTIN 1976, PARISI 1980, SHENKER 1982, ZINN-JUSTIN 1989). Les techniques du groupe de renormalisation que nous venons de présenter ont été largement utilisées dans les années 1970 puis, au cours des années 1980, l'invariance conforme a permis de résoudre de nombreux problèmes bidimensionnels, abordant même une classification des phénomènes critiques (CARDY 1986a, 1987a et 1988b, SAINT-AUBIN 1987, GINSBURG 1988, ITZYKSON et DROUFFE 1989).

Les premières applications de l'invariance conforme aux phénomènes critiques sont dues à Polyakov (POLYAKOV 1970, FISHER 1973b, WEGNER 1976, PATASHINSKII et PROKOVSKII 1979) qui montre comment l'hypothèse d'invariance par transformation conforme pour un système à son point critique détermine la forme des fonctions de corrélation à deux et à trois points.

C'est cependant en dimension deux que cette hypothèse s'avère la plus fructueuse, puisque le groupe conforme est alors isomorphe au groupe des transformations analytiques du plan complexe, de dimension infinie. Les articles fondamentaux de Belavin, Polyakov et Zamolodchikov (1984a et b) explorent les conséquences de la covariance conforme d'une théorie quantique des champs associée à des particules de masse nulle (ou, de manière équivalente, d'un système à son point critique) en dimension deux. Ils montrent qu'à chaque opérateur "primaire" de la théorie est associée une représentation de l'algèbre conforme (algèbre de Virasoro). Dans certaines conditions, la théorie est "minimale" : elle contient alors un nombre fini de champs primaires, les exposants critiques sont déterminés exactement (par la formule de Kac) et les fonctions de corrélation multipoints obéissent à des équations différentielles linéaires. Ces théories minimales sont indexées par un entier $m = 3, 4, \dots$ et le modèle d'Ising est identifié à la théorie $m = 3$.

Dotsenko et Fateev appliquent ce formalisme à divers modèles et calculent en particulier des fonctions de corrélation à quatre points (DOTSENKO 1984a et b, DOTSENKO et FATEEV 1984 et 1985).

Cardy (1984a) adapte cette technique au cas de systèmes critiques bidimensionnels semi-infinis en restreignant l'hypothèse d'invariance aux transformations qui préservent les conditions aux limites.

Friedan, Qiu et Shenker (1984, 1985 et 1986) montrent que l'hypothèse d'unitarité impose de sévères contraintes à une quantité caractérisant la théorie, appelée charge centrale, ainsi qu'aux valeurs permises pour les exposants critiques incluant les valeurs correspondant aux théories minimales. Cette hypothèse d'unitarité, nécessaire en théorie quantique des champs, correspond en physique statistique à l'existence d'une matrice de transfert hermitienne, ce qui est en effet généralement le cas. Friedan, Qiu et Shenker ébauchent ainsi une classification des comportements critiques bidimensionnels améliorée plus tard par la condition d'invariance modulaire de la fonction de partition d'un modèle défini sur un tore (CARDY 1986b et 1988b, ITZYKSON et ZUBER 1986, CAPELLI, ITZYKSON et ZUBER 1987).

Parallèlement à ces développements formels, un autre champ d'étude couvert par l'invariance conforme concerne les effets de taille finie, programme largement réalisé par Cardy (CARDY 1984b et c, 1987a, AFFLECK 1986, BLÖTE, CARDY et NIGHTINGALE 1986) à partir de la transformation conforme qui projette le plan complexe sur un ruban infini. La structure du spectre de la matrice de transfert entre rangées est ainsi déterminée.

Peschel et Truong envisagent le cas des matrices de transfert de coin, qui sont le pendant angulaire des matrices de transfert entre rangées (BAXTER 1982), et considèrent la projection du plan complexe sur un ruban ayant la forme d'un escalier en colimaçon (*winding staircase*) pour en déduire la structure du spectre des matrices de transfert de coin (PESCHEL et TRUONG 1987, PESCHEL 1988, TRUONG et PESCHEL 1988 et 1989, DAVIES et PEARCE 1990). Ce domaine se prête remarquablement aux études tant numériques qu'analytiques, puisqu'il relie certaines quantités évaluées sur des systèmes finis aux grandeurs universelles telles que les exposants critiques.

L'application systématique de ces méthodes, notamment au cas des systèmes quantiques, est due à von Gehlen, Rittenberg et Ruegg (1985). Par la suite, ces techniques ont été largement utilisées soit dans le cas de systèmes solubles par ailleurs afin de tester les prédictions de l'invariance conforme (ALCARAZ, BARBER et BATCHELOR 1987 et 1988), soit pour étudier de nouveaux modèles comme les systèmes à interactions multispins (KOLB et PENSON 1986, ALCARAZ et BARBER 1987, IGLÓI 1987, WITTLICH 1990).

L'effet des conditions aux limites a été envisagé (CARDY 1984c, 1986c, BURKHARDT et GUIM 1985a et b, BURKHARDT et EISENRIEGLER 1986, BURKHARDT et XUE 1990). Les comportements de surface en particulier ont été étudiés par invariance conforme (BURKHARDT et CARDY 1987, BURKHARDT et EISENRIEGLER 1985).

Enfin, l'application de ces méthodes à des systèmes avec défauts (TURBAN 1985a) a été développée systématiquement (HENKEL et PATKÓS 1987a et b, BAAKE, CHASELON et SCHLOTTMANN 1989, HINRINCHSEN 1990, GRIMM 1990).

4.2 Invariance conforme à deux dimensions, algèbre de Virasoro

Les développements qui viennent d'être mentionnés ont été réalisés par des spécialistes de théorie quantique des champs. Une approche rigoureuse de l'invariance conforme exige des compétences qui débordent largement du cadre des phénomènes critiques. Notre ambition est donc simplement ici de présenter les résultats essentiels.

Dans un modèle avec interactions à courte portée, invariant par translation et par rotation, l'invariance par dilatation au point critique implique aussi l'invariance par toutes les transformations qui se décomposent localement en translations, rotations et dilatations. Ces transformations, qui conservent les angles mais pas les longueurs, sont celles du groupe conforme (COLEMAN 1971, FELSAGER 1981).

A deux dimensions, le groupe conforme est de dimension infinie, puisque toute fonction analytique du plan complexe

$$z \longrightarrow z' = f(z)$$

est une transformation conforme. Ceci suggère l'utilisation des coordonnées complexes $(z, \bar{z})$ pour repérer un point (x, y) du plan :

$$z = x + iy$$

$$\bar{z} = x - iy$$

La théorie conforme des champs suppose l'existence de champs primaires $\phi_i(z, \bar{z})$ qui ne sont autres que les opérateurs d'échelle d'un système critique. Par dilatation homogène, la loi de transformation (1.49) des opérateurs d'échelle peut être réécrite

$$\phi_i(z, \bar{z}) \longrightarrow \phi_i(z', \bar{z}') = b^{x_i} \phi_i(z, \bar{z}) \quad (1.63)$$

et généralisée aux transformations conformes où le facteur de dilatation b est maintenant une fonction de la position définie par :

$$b^2(z) = (f'(z) \overline{f'(z)})^{-1} \quad (1.64)$$

soit

$$\phi_i(z, \bar{z}) \longrightarrow \phi_i(z', \bar{z}') = f'(z)^{-h_i} \overline{f'(z)}^{-\bar{h}_i} \phi_i(z, \bar{z}) \quad (1.65)$$

où h_i et $\bar{h}_i$ sont appelées les dimensions complexes (ce sont des nombres réels !) de l'opérateur ϕ_i . Les dimensions complexes sont reliées à la dimension critique de ϕ_i :

$$h_i + \bar{h}_i = x_i \quad (1.66)$$

La loi de covariance des fonctions de corrélation par transformation conforme généralise de la même façon la loi de transformation par dilatation et devient :

$$\begin{aligned} & \langle \phi_1(z_1, \bar{z}_1) \phi_2(z_2, \bar{z}_2) \dots \phi_n(z_n, \bar{z}_n) \rangle \longrightarrow \langle \phi_1(z'_1, \bar{z}'_1) \phi_2(z'_2, \bar{z}'_2) \dots \phi_n(z'_n, \bar{z}'_n) \rangle \\ & = \prod_{j=1}^n f'(z_j)^{-h_j} \overline{f'(z_j)}^{-\bar{h}_j} \langle \phi_1(z_1, \bar{z}_1) \phi_2(z_2, \bar{z}_2) \dots \phi_n(z_n, \bar{z}_n) \rangle \end{aligned} \quad (1.67)$$

L'algèbre conforme en dimension deux est une extension centrale d'une algèbre de Lie infinie déjà rencontrée en physique dans le cadre de la théorie des cordes (VIRASORO 1970) :

$$[L_m, L_n] = (m - n)L_{m+n} + \frac{c}{12}(m^3 - m) \delta_{m+n,0} \quad (1.68a)$$

$$[L_m, \bar{L}_n] = 0 \quad (1.68b)$$

$$[\bar{L}_m, \bar{L}_n] = (m - n)\bar{L}_{m+n} + \frac{c}{12}(m^3 - m) \delta_{m+n,0} \quad (1.68c)$$

Le dernier terme dans ces relations de commutation fait intervenir la charge centrale c (ou anomalie conforme) qui caractérise la théorie. Les deux algèbres commutent entre elles et ont même charge centrale. L'algèbre de Virasoro admet des représentations avec vecteur de plus haut poids (*highest weight vector*) analogues à celles de l'algèbre de Lie des moments cinétiques où les états $|j, m\rangle$ sont vecteurs propres de l'opérateur J_z :

$$J_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle$$

et les opérateurs échelle $J_{\pm}$ permettent la construction des autres états de base à partir d'un vecteur de plus haut poids $|j, j\rangle$:

$$J_+ |j, j\rangle = 0$$

$$J_- |j, j\rangle = |j, j-1\rangle$$

$$J_-^2 |j, j\rangle = |j, j-2\rangle$$

...

A chaque opérateur primaire $\phi(z, \bar{z})$ d'une théorie conformément covariante, on peut associer une représentation irréductible de l'algèbre de Virasoro. Le vecteur de plus haut poids est défini par l'action de $\phi(0,0)$ sur l'état du vide $|0\rangle$:

$$\phi(0,0) |0\rangle = |\phi\rangle \quad (1.69)$$

Il est état propre de L_0 ($\bar{L}_0$) avec une valeur propre h ($\bar{h}$) :

$$L_0 |\phi\rangle = h |\phi\rangle \quad (1.70a)$$

$$\bar{L}_0 |\phi\rangle = \bar{h} |\phi\rangle \quad (1.70b)$$

Les opérateurs échelle (*raising operators*) L_n ($\bar{L}_n$), $n \geq 1$, annihilent le vecteur de plus haut poids $|\phi\rangle$:

$$L_n |\phi\rangle = \bar{L}_n |\phi\rangle = 0, \quad n \geq 1 \quad (1.71)$$

Les autres vecteurs de base $|\psi\rangle$ sont engendrés par les opérateurs échelle L_{-n} ($\bar{L}_{-n}$) (*lowering operators*), $n \geq 1$:

$$|\psi\rangle = L_{-n_1} L_{-n_2} \dots L_{-n_k} |\phi\rangle, \quad n_1 \leq n_2 \leq \dots \leq n_k \quad (1.72)$$

avec

$$L_0 |\psi\rangle = (k + N) |\psi\rangle \quad (1.73a)$$

$$N = n_1 + n_2 + \dots + n_k \quad (1.73b)$$

N est le niveau de l'état $|\psi\rangle$. A chaque niveau N , le nombre de vecteurs de base est égal au nombre de partitions $P(N)$ de l'entier N (Tableau 1.1).

Niveau	Vecteurs de base	Valeurs propres de L_0	$P(N)$
0	$ \phi\rangle$	h	1
1	$L_{-1} \phi\rangle$	$h + 1$	1
2	$L_{-1}^2 \phi\rangle, L_{-2} \phi\rangle$	$h + 2$	2
3	$L_{-1}^3 \phi\rangle, L_{-1} L_{-2} \phi\rangle, L_{-3} \phi\rangle$	$h + 3$	3
...	...	...	...

Tableau 1.1

Vecteurs de base aux niveaux 0,1,2,3.

Belavin, Polyakov et Zamolodchikov ont montré que si une théorie conformément covariante est minimale, il existe alors un nombre fini d'opérateurs primaires (et donc de représentations irréductibles de l'algèbre) dont les dimensions complexes sont alors connues et dont les corrélations peuvent être calculées à partir d'équations différentielles linéaires (CARDY 1984a, DOTSENKO 1984a et b, DOTSENKO et FATEEV 1984, BURKHARDT et GUIM 1987, BURKHARDT, EISENRIEGLER et GUIM 1989). Friedan, Qiu et Shenker réalisent dans un travail complété ensuite (GODDARD et OLIVE 1985, GODDARD, KENT et OLIVE 1986) que la condition d'unitarité $L_n^+ = L_{-n}$ garantit qu'une théorie est minimale si la charge centrale est inférieure à 1. De plus, elle impose alors des contraintes pour les valeurs possibles des exposants critiques. De la même façon que la condition d'hermiticité $(J_+)^+ = J_-$ dans le groupe des rotations assure que les représentations sont unitaires et impose aux valeurs propres de J_z des valeurs entières ou demi-entières, les seules représentations unitaires de l'algèbre de Virasoro sont telles que

$$i) \quad c \geq 1 \quad , \quad h \geq 0 \quad (1.74)$$

$$ii) \quad c = 1 - \frac{6}{m(m+1)} < 1 \quad m = 2, 3, 4, \dots \quad (1.75a)$$

$$h = h_{p,q} = \frac{[p(m+1) - qm]^2 - 1}{4m(m+1)} \quad 1 \leq q \leq p \leq m-1 \quad (1.75b)$$

La seconde catégorie constitue la série discrète des représentations unitaires. Toutes les représentations de cette série discrète ont été identifiées à des modèles théoriques existants (FRIEDAN, QIU et SHENKER 1984, HUSE 1984, FISHER 1986). La classification des comportements critiques ainsi réalisée n'est cependant pas complète, puisqu'une valeur donnée de m (donc de c) peut décrire plusieurs classes d'universalité (DOTSENKO 1984a).

Deux algèbres de Virasoro $\mathcal{V}$ et $\bar{\mathcal{V}}$ (relations (1.68)) sont nécessaires à la description des propriétés critiques de volume d'un système conformément covariant. Le groupe conforme est un produit direct $\mathcal{G} = \mathcal{V} \otimes \bar{\mathcal{V}}$ (BELAVIN, POLYAKOV et ZAMOLODCHIKOV 1984a) et les champs primaires notés $\phi_{p,q}(z, \bar{z})$ se décomposent ainsi sur les deux algèbres :

$$\phi_{p,q}(z, \bar{z}) = \phi_{p,q}(z) \bar{\phi}_{p,q}(\bar{z})$$

On les note plus simplement ϕ_{pq} et $h, \bar{h}$ les poids conformes associés. Le modèle d'Ising à deux dimensions par exemple correspond à $m = 3$, soit $c = 1/2$. Il existe ainsi trois champs primaires correspondant aux valeurs $h = 0, 1/2, 1/16$, soit :

$$\phi_{11} : (0, \bar{0}) \quad (1.76a)$$

$$\phi_{21} : \left(\frac{1}{2}, \bar{\frac{1}{2}}\right) \quad (1.76b)$$

$$\phi_{12} : \left(\frac{1}{16}, \bar{\frac{1}{16}}\right) \quad (1.76c)$$

ϕ_{11} correspond à l'opérateur identité présent dans toute théorie. ϕ_{21} et ϕ_{12} , qui sont respectivement de dimensions critiques

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 = x_e \quad (1.77a)$$

$$\frac{1}{16} + \frac{1}{16} = \frac{1}{8} = x_m \quad (1.77b)$$

correspondent aux opérateurs densité d'énergie ε et aimantation σ .

4.3 Invariance conforme et effets de taille finie

On se propose ici d'étudier les implications de l'invariance conforme pour un modèle défini sur un cylindre, c'est-à-dire sur un ruban de largeur L avec conditions périodiques et de longueur infinie (*). L'hamiltonien d'Ising en champ transverse avec conditions périodiques dans la direction spatiale correspond précisément à cette topologie.

La projection conforme (CARDY 1984b)

$$z' = f(z) = \frac{L}{2\pi} \ln z \quad (1.78)$$

occupe une place privilégiée puisqu'elle réalise la transformation du plan complexe infini sur le cylindre. Notons :

$$z = x + iy = \rho e^{i\vartheta} \quad (1.79a)$$

$$z' = u + iv = \frac{L}{2\pi} (\ln \rho + i\vartheta) \quad (1.79b)$$

(*) Le cas d'un système avec conditions de bords libres sera traité à la fin du paragraphe.

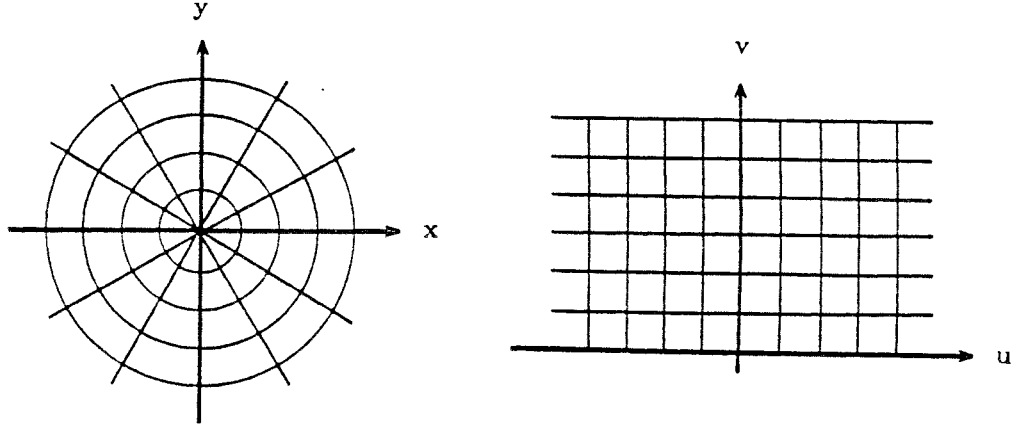


Figure 1.10

Projection du plan complexe sur un cylindre.

Lorsque ρ varie de 0 à l'infini, u varie de $-\infty$ à $+\infty$ et lorsque ϑ varie de 0 à 2π , v varie périodiquement de 0 à L , ce qui correspond bien à la topologie du cylindre (Figure 1.10).

La loi de covariance (1.67) relie les corrélations évaluées dans ces deux géométries :

$$\langle \phi(z'_1, \bar{z}'_1) \phi(z'_2, \bar{z}'_2) \rangle_{\text{ruban}} = f'(z_1)^{-h_\phi} \overline{f'(z_1)^{-h_\phi}} f'(z_2)^{-h_\phi} \overline{f'(z_2)^{-h_\phi}} \langle \phi(z_1, \bar{z}_1) \phi(z_2, \bar{z}_2) \rangle_{\text{plan}} \quad (1.80)$$

Or, on sait que l'invariance par dilatation fixe la forme des corrélations à deux points dans le plan :

$$\langle \phi(z_1, \bar{z}_1) \phi(z_2, \bar{z}_2) \rangle_{\text{plan}} = (z_1 - z_2)^{-2h_\phi} (\bar{z}_1 - \bar{z}_2)^{-2\bar{h}_\phi} \quad (1.81)$$

d'où l'on déduit l'expression de la fonction de corrélation sur le ruban (CARDY 1984a, PRIVMAN 1985) :

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle_{\text{ruban}} = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{2x_\phi} \left[2 \cosh \left[\frac{2\pi}{L} (u_1 - u_2) \right] - 2 \cos \left[\frac{2\pi}{L} (v_1 - v_2) \right] \right]^{-x_\phi} \quad (1.82)$$

Dans la limite $u_1 - u_2 \gg L$, le comportement unidimensionnel se manifeste et (1.82) devient :

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle_{\text{ruban}} \sim \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{2x_\phi} e^{-\frac{2\pi}{L} (u_1 - u_2) x_\phi} \quad (1.83)$$

ce qui conduit à l'amplitude universelle A_ξ de la longueur de corrélation ($\xi_\phi = A_\xi L$) (CARDY 1984b) :

$$\xi_\phi = \frac{L}{2\pi x_\phi} \quad (1.84)$$

En utilisant (1.34), on déduit la relation gap-exposant :

$$E_\phi - E_0 = \frac{2\pi\zeta}{L} x_\phi \quad (1.85)$$

Cette relation avait été conjecturée avant l'introduction de l'invariance conforme (PICHARD et SARMA 1981, DERRIDA et DE SEZE 1982, LUCK 1982, NIGHTINGALE et BLÖTE 1983, PENSON et KOLB 1984). Elle a été utilisée très fréquemment depuis pour déterminer numériquement les exposants critiques x_ϕ , la convergence étant plus rapide qu'avec les méthodes habituelles d'effets de taille finie.

La relation gap-exposant est une première information sur le spectre d'un modèle conformément covariant que l'on peut compléter par une étude plus détaillée de la structure de la matrice de transfert (CARDY 1986b). L'expression (1.82) est pour cela développée pour $u_1 > u_2$:

$$\begin{aligned} \langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle_{ruban} &= \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{x_\phi} \sum_{N, \bar{N}=0}^{\infty} a_N a_{\bar{N}} \exp \left[-2\pi(x_\phi + N + \bar{N})(u_1 - u_2)/L \right] \\ &\times \exp \left[2\pi i(s_\phi + N - \bar{N})(v_1 - v_2)/L \right] \end{aligned} \quad (1.86)$$

où

$$s_\phi = h_\phi - \bar{h}_\phi \quad (1.87)$$

est le spin de ϕ (*) (nul pour un champ scalaire) et

$$a_N = \frac{\Gamma(x_\phi + N)}{\Gamma(x_\phi) N!}$$

Cette expression doit naturellement être identifiée à la fonction de corrélation écrite dans le formalisme hamiltonien (1.32) :

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle_{ruban} = \langle 0 | \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) | 0 \rangle \quad (1.88)$$

avec

$$u_1 - u_2 = n\tau$$

$$v_1 - v_2 = \ell a$$

(*) En posant $z_1 - z_2 = \rho e^{i\vartheta}$, (1.81) s'écrit (FRIEDAN, QIU et SHENKER 1985) : $\langle \phi(\rho e^{i\vartheta}) \phi(0) \rangle = \rho^{-2(h_\phi + \bar{h}_\phi)} e^{-2i\vartheta(h_\phi - \bar{h}_\phi)}$.

soit

$$\begin{aligned} \langle \phi(u_1 v_1) \phi(u_2 v_2) \rangle_{\text{ruban}} &= \sum_{\alpha \neq 0} |\langle 0 | \phi(0,0) | \alpha \rangle|^2 \exp \left[- (E_\alpha - E_0)(u_1 - u_2) \right] \\ &\times \exp \left[i P_\alpha (v_1 - v_2) \right] \end{aligned} \quad (1.89)$$

La comparaison entre (1.86) et (1.89) montre qu'à chaque opérateur d'échelle ϕ défini sur ruban, il correspond une infinité d'états propres de $\mathcal{H}$ (et de $\mathcal{P}$), notés $(N, \bar{N})$ d'énergie et d'impulsion égales à $E_{N, \bar{N}}$ et $P_{N, \bar{N}}$ telles que (BOGOLYUBOV, IZERGIN et RESHETIKHIN 1986, CARDY 1987b) :

$$E_{N, \bar{N}} - E_0 = \frac{2\pi}{L} (x_\phi + N + \bar{N}) \quad (1.90a)$$

$$P_{N, \bar{N}} = \frac{2\pi}{L} (s_\phi + N - \bar{N}) \quad (1.90b)$$

Les niveaux d'énergie $E_{N, \bar{N}}$ régulièrement espacés forment la tour conforme de l'opérateur ϕ (*). Dans le cas d'un système fini, il existe bien sûr un nombre fini d'états et ces relations ne se rapportent qu'à ceux dont les gaps $E_{N, \bar{N}} - E_0$ s'annulent dans la limite thermodynamique avec un comportement en $\frac{1}{L}$. L'expression (1.86) permet également de déterminer le comportement de l'élément de matrice $\langle 0 | \phi | \phi \rangle$ où $|\phi\rangle$ est le premier état excité de la tour conforme ($N, \bar{N} = 0$). On obtient :

$$\langle 0 | \phi | \phi \rangle = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{x_\phi} \quad (1.91)$$

en accord avec les effets de taille finie.

L'état fondamental enfin contient une information précieuse sur la théorie. Pour un système avec conditions périodiques, E_0 prend la forme

$$\frac{E_0}{L} = a_0 - a_2 L^{-2} + \dots \quad (1.92a)$$

où a_0 est l'énergie libre de volume par site au point critique et où la partie singulière qui varie en L^{-d} d'après (1.61) a une amplitude universelle (PRIVMAN et FISHER 1984) reliée à la charge centrale (AFFLECK 1986, BLÖTE, CARDY et NIGHTINGALE 1986, CARDY et PESCHEL 1988) :

$$a_2 = \frac{\pi c}{6} \quad (1.92b)$$

(*) Dans les relations (1.90), la vitesse du son a été omise.

L'ensemble des relations (1.85), (1.90), (1.92a) et (1.92b) se déduit des expressions de l'hamiltonien et de l'impulsion sur ruban (FRIEDAN, QIU et SHENKER 1986, ITZYKSON et DROUFFE 1989). L'opérateur $L_0 + \bar{L}_0$ génère les dilatations :

$$z \longrightarrow bz, \quad b \in \mathbf{R}$$

dans le plan. Celles-ci correspondent aux translations dans la direction temporelle sur le ruban :

$$u \longrightarrow u + \ln b$$

qui sont engendrées par l'hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \frac{2\pi}{L} (L_0 + \bar{L}_0 - \frac{c}{12}) \quad (1.93)$$

De même, $L_0 - \bar{L}_0$ est associé aux rotations dans le plan :

$$z \longrightarrow bz, \quad b = e^{i\varphi}$$

qui conduisent, sur le ruban, aux translations dans la direction spatiale :

$$v \longrightarrow v + \varphi$$

elles-mêmes reliées à l'impulsion :

$$\mathcal{P} = \frac{2\pi}{L} (L_0 - \bar{L}_0) \quad (1.94)$$

On en déduit :

$$\mathcal{H} | 0 \rangle = E_0 | 0 \rangle = -\frac{\pi c}{6L} | 0 \rangle \quad (1.95a)$$

$$\mathcal{P} | 0 \rangle = P_0 | 0 \rangle = 0 \quad (1.95b)$$

$$\mathcal{H} | \alpha \rangle = E_\alpha | \alpha \rangle = \left(\frac{2\pi}{L} (x_\phi + N + \bar{N}) + E_0 \right) | \alpha \rangle \quad (1.95c)$$

$$\mathcal{P} | \alpha \rangle = P_\alpha | \alpha \rangle = \frac{2\pi}{L} (s_\phi + N - \bar{N}) | \alpha \rangle \quad (1.95d)$$

Pour un modèle avec conditions de bords libres, une seule algèbre de Virasoro intervient dans le formalisme de l'invariance conforme $\mathcal{G} = \mathcal{V}$ (CARDY 1984a, VON GEHLEN et RITTENBERG 1986). Les relations précédentes se trouvent modifiées. La transformation conforme

$$f(z) = \frac{L}{\pi} \ln z \quad (1.96)$$

projette le demi-plan (ϑ varie de 0 à π) sur un ruban de largeur L avec conditions de bords libres, ce qui conduit aux expressions suivantes pour la relation gap-exposant, les tours conformes et les éléments de matrice :

$$E_\phi - E_0 = \frac{\pi}{L} x_\phi^s \quad (1.97)$$

$$E_N = E_0 + \frac{\pi}{L} (x_\phi^s + N) \quad (1.98)$$

$$\langle 0 | \phi | \phi \rangle = \left(\frac{\pi}{L} \right)^{x_\phi^s} \quad (1.99)$$

où l'exposant x_ϕ^s est associé au comportement critique de surface de l'opérateur ϕ .

L'énergie de l'état fondamental E_0 contient l'énergie libre de surface en L^{-1} , avec une amplitude non universelle a_1 :

$$\frac{E_0}{L} = a_0 + a_1 L^{-1} - a_2 L^{-2} + \dots \quad (1.100a)$$

et l'amplitude de la partie singulière est cette fois :

$$a_2 = \frac{\pi c}{24} \quad (1.100b)$$

L'hamiltonien sur ruban s'écrit alors :

$$\mathcal{H} = \frac{\pi}{L} \left(L_0 - \frac{c}{24} \right) \quad (1.101)$$

5. Solution exacte du modèle d'Ising en champ transverse

Nous présentons ici la solution exacte du modèle d'Ising en champ transverse (PIKIN et TSUKERNIK 1965, PFEUTY 1970a et b) pour des systèmes avec conditions périodiques et de bords libres. Les valeurs des exposants critiques sont obtenues par effets de taille finie puis confirmées par application de l'invariance conforme.

5.1 Conditions périodiques

5.1.1 Diagonalisation de l'hamiltonien

Considérons un hamiltonien d'Ising en champ transverse avec des interactions arbitraires :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^L h(\ell) \sigma_z(\ell) - \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^L J(\ell) \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) \quad (1.102)$$

et des conditions aux limites périodiques :

$$\sigma_{x,z}(L+1) = \sigma_{x,z}(1)$$

Le facteur de normation dans (1.102) permet d'éliminer la vitesse du son dans la relation de dispersion et σ_z , σ_x sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.103)$$

$\mathcal{H}$ commute avec l'opérateur de charge $\mathcal{Q}$

$$\mathcal{Q} = \prod_{\ell=1}^L \sigma_z(\ell) \quad (1.104)$$

et peut donc être diagonalisé dans les deux secteurs de parité $q = 0, 1$ correspondant aux valeurs propres $(-1)^q$ de la charge $\mathcal{Q}$. La transformation de Jordan-Wigner (1928) définit des opérateurs obéissant aux relations d'anticommutation des fermions :

$$c(\ell) = \prod_{j=1}^{\ell-1} \exp[i\pi \sigma^+(j) \sigma^-(j)] \sigma^-(\ell) \quad (1.105a)$$

$$c^+(\ell) = \sigma^+(\ell) \prod_{j=1}^{\ell-1} \exp[-i\pi \sigma^+(j) \sigma^-(j)] \quad (1.105b)$$

avec

$$\{c^+(m), c(n)\} = \delta_{m,n} \text{ et } \{c^+(m), c^+(n)\} = \{c(m), c(n)\} = 0 \quad (1.106)$$

où les $\sigma^\pm(\ell)$ sont les opérateurs échelle habituels :

$$\sigma^\pm(\ell) = \frac{1}{2}(\sigma_x(\ell) \pm i\sigma_y(\ell))$$

L'hamiltonien s'écrit ainsi :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^L h(\ell) (\mathbb{1} - 2c^+(\ell)c(\ell)) - \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^{L-1} J(\ell) (c^+(\ell) - c(\ell)) (c^+(\ell+1) + c(\ell+1)) \\ & + \frac{1}{2} J(L) (c^+(L) - c(L)) (c^+(1) + c(1)) \exp[i\pi\mathcal{N}] \end{aligned} \quad (1.107)$$

où

$$\mathcal{N} = \sum_{\ell=1}^L c^+(\ell)c(\ell) \quad (1.108a)$$

est le nombre total de quasi-particules, relié à l'opérateur de charge :

$$\mathcal{Q} = (-1)^L \exp[i\pi\mathcal{N}] \quad (1.108b)$$

On considère dans la suite uniquement des chaînes de longueur L paire dans le but de simplifier (1.108b). L'hamiltonien (1.107), par la présence d'un terme non local, n'est pas une forme quadratique, ce qui interdit toute diagonalisation directe. Cependant, la définition d'un opérateur $\overline{\mathcal{H}}(q)$ conduit à un nouvel hamiltonien $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ diagonalisable (BAAKE, CHASELON et SCHLOTTMANN 1989, GRIMM 1990, HINRICHSSEN 1990). Soit :

$$\overline{\mathcal{H}}(q) = -\frac{1}{2} \left(\sum_{\ell=1}^L h(\ell) \sigma_z(\ell) + \sum_{\ell=1}^{L-1} J(\ell) \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) + (-1)^q J(L) \sigma_x(L) \sigma_x(1) \right) \quad (1.109)$$

$\overline{\mathcal{H}}(1)$ correspond à un système avec conditions antipériodiques, alors que $\overline{\mathcal{H}}(0)$ est l'hamiltonien initial (1.102). Définissons alors l'opérateur (*)

$$\tilde{\mathcal{H}}(q) = \overline{\mathcal{H}}(q) P_0 + \overline{\mathcal{H}}(1-q) P_1 \quad (1.110)$$

où P_0 et P_1 sont respectivement les projecteurs sur les secteurs de charge $q = 0$ et $q = 1$. On a par définition :

$$\mathcal{H} = \overline{\mathcal{H}}(0) (P_0 + P_1) \quad (1.111a)$$

qui conduit à :

$$\mathcal{H} = \tilde{\mathcal{H}}(0) P_0 + \tilde{\mathcal{H}}(1) P_1 \quad (1.111b)$$

(*) $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ correspond à l'hamiltonien initial (1.107) dans lequel on a remplacé l'opérateur de charge $\mathcal{Q}$ dans le terme cyclique par sa valeur propre $(-1)^q$.

Par transformation de Jordan-Wigner, $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ est une forme quadratique :

$$\tilde{\mathcal{H}}(q) = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^L h(\ell) + \sum_{i,j=1}^L \left[c^+(i) A_{ij} c(j) + \frac{1}{2} c^+(i) B_{ij} c^+(j) + \frac{1}{2} c(i) B_{ji}^* c(j) \right] \quad (1.112)$$

où **A** et **B** sont deux matrices réelles, respectivement symétrique et antisymétrique :

$$\mathbf{A} = - \begin{pmatrix} h(1) & \frac{1}{2}J(1) & 0 & \dots & 0 & -\frac{1}{2}(-1)^q J(L) \\ \frac{1}{2}J(1) & h(2) & \frac{1}{2}J(2) & 0 & & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}J(2) & h(3) & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \frac{1}{2}J(L-2) & 0 \\ 0 & & \ddots & \frac{1}{2}J(L-2) & h(L-1) & \frac{1}{2}J(L-1) \\ -\frac{1}{2}(-1)^q J(L) & 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2}J(L-1) & h(L) \end{pmatrix} \quad (1.113a)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}J(1) & 0 & \dots & 0 & -\frac{1}{2}(-1)^q J(L) \\ \frac{1}{2}J(1) & 0 & -\frac{1}{2}J(2) & 0 & & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}J(2) & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & -\frac{1}{2}J(L-2) & 0 \\ 0 & & \ddots & \frac{1}{2}J(L-2) & 0 & -\frac{1}{2}J(L-1) \\ \frac{1}{2}(-1)^q J(L) & 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2}J(L-1) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.113b)$$

$\tilde{\mathcal{H}}(q)$ est diagonalisé par transformation de Bogoliubov (BOGOLIUBOV 1958, LIEB, SCHULTZ et MATTIS 1961) :

$$\eta_\alpha = \sum_i [g_{\alpha i} c(i) + h_{\alpha i} c^+(i)] \quad (1.114a)$$

$$\eta_\alpha^+ = \sum_i [g_{\alpha i} c^+(i) + h_{\alpha i} c(i)] \quad (1.114b)$$

soit

$$\tilde{\mathcal{H}}(q) = \sum_\alpha \Lambda_\alpha(q) \left(\eta_\alpha^+ \eta_\alpha - \frac{1}{2} \right) \quad (1.115)$$

où les excitations $\Lambda_\alpha(q)$ sont solutions des équations matricielles

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \Phi_\alpha = \Lambda_\alpha(q) \Psi_\alpha \quad (1.116a)$$

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B}) \Psi_\alpha = \Lambda_\alpha(q) \Phi_\alpha \quad (1.116b)$$

avec

$$\phi_\alpha(i) = g_{\alpha i} + h_{\alpha i} \quad (1.117a)$$

$$\psi_\alpha(i) = g_{\alpha i} - h_{\alpha i} \quad (1.117b)$$

Ceci conduit à diagonaliser l'une des deux matrices des excitations Λ_ϕ ou Λ_ψ :

$$\Lambda_\phi = (\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \quad ; \quad \Lambda_\phi \Phi_\alpha = \Lambda_\alpha^2(q) \Phi_\alpha \quad (1.118a)$$

$$\Lambda_\psi = (\mathbf{A} + \mathbf{B})(\mathbf{A} - \mathbf{B}) \quad ; \quad \Lambda_\psi \Psi_\alpha = \Lambda_\alpha^2(q) \Psi_\alpha \quad (1.118b)$$

On travaille habituellement avec Λ_ϕ , donnée par :

$$\Lambda_\phi = \begin{pmatrix} h^2(1) + J^2(L) & h(1)J(1) & 0 & \dots & -(-1)^q h(L)J(L) \\ h(1)J(1) & h^2(2) + J^2(1) & h(2)J(2) & \ddots & 0 \\ 0 & h(2)J(2) & h^2(3) + J^2(2) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & h(L-1)J(L-1) \\ -(-1)^q h(L)J(L) & 0 & \dots & h(L-1)J(L-1) & h^2(L) + J^2(L-1) \end{pmatrix} \quad (1.119)$$

Dans le cas d'un modèle homogène :

$$\forall \ell, \quad h(\ell) = h \quad , \quad J(\ell) = J$$

l'équation aux valeurs propres (1.118a) devient :

$$hJ\phi(\ell-1) + (h^2 + J^2 - \Lambda^2(q))\phi(\ell) + hJ\phi(\ell+1) = 0 \quad (1.120)$$

pour $2 \leq \ell \leq L-1$. Cette équation admet

$$A(-1)^\ell e^{ik\ell} \quad \text{et} \quad B(-1)^\ell e^{-ik\ell}$$

pour solutions particulières avec les valeurs propres (Figure 1.11) (*) :

$$\Lambda_k^2(q) = h^2 + J^2 - 2hJ \cos k \quad (1.121)$$

(*) La première excitation du secteur impair ($\Lambda_{k=0}$) est négative dans la phase de basse température ($J/h = 1.5$), ce qui est à l'origine de l'instabilité provoquant la transition de phase.

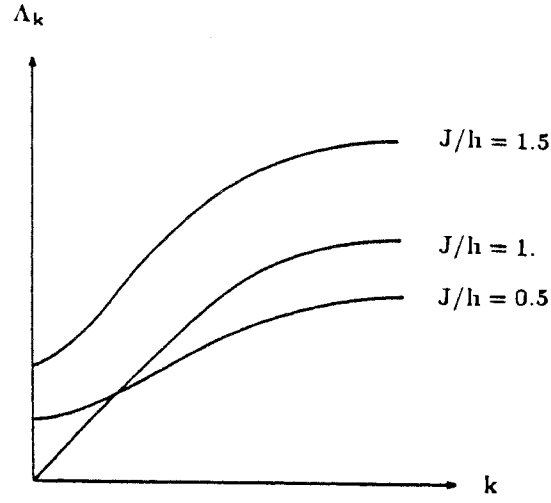


Figure 1.11

Excitations du modèle d'Ising homogène.

La solution générale s'écrit :

$$\phi(\ell) = (-1)^\ell (Ae^{ik\ell} + Be^{-ik\ell}) \quad (1.122)$$

Les conditions aux limites ($\ell = 1$ et $\ell = L$) deviennent en utilisant (1.120) :

$$hJ\phi(0) + hJ(-1)^q\phi(L) = 0 \quad (1.123a)$$

$$hJ(-1)^q\phi(1) + hJ\phi(L+1) = 0 \quad (1.123b)$$

et conduisent à un déterminant (2×2) que l'on annule pour éviter la solution triviale $A = B = 0$ dans (1.122). On en déduit la condition de quantification du vecteur d'onde :

- secteur pair, $q = 0$:

$$\cos \frac{kL}{2} = 0$$

soit

$$k = (2p+1)\frac{\pi}{L}, \quad p = 0, 1, \dots, L-1 \quad (1.124a)$$

- secteur impair, $q = 1$:

$$\sin \frac{kL}{2} = 0$$

soit

$$k = 2p\frac{\pi}{L}, \quad p = 0, 1, \dots, L-1 \quad (1.124b)$$

Les excitations $\Lambda_k(q)$ sont doublement dégénérées à cause de l'invariance par translation. Les vecteurs propres normés s'écrivent (PFEUTY 1970a) :

$$\phi_k(\ell) = \begin{cases} (-1)^\ell \sqrt{2/L} \cos k\ell & \text{si } k < \pi \\ (-1)^\ell \sqrt{2/L} \sin k\ell & \text{si } k \geq \pi \end{cases} \quad (1.125)$$

et Ψ_k s'en déduit par (1.116a) :

$$\psi_k(\ell) = -\frac{1}{\Lambda_k} (h\phi_k(\ell) + J\phi_k(\ell+1)) \quad (1.126)$$

Au point critique du modèle homogène $h = J = 1$, la relation de dispersion devient linéaire aux grandes longueurs d'ondes (Figure 1.11) en accord avec l'invariance conforme (VON GEHLEN, RITTENBERG et RUEGG 1985) :

$$\Lambda_k(q) = 2 \sin \frac{k}{2} \simeq k$$

Dans la limite continue, on obtient donc :

$$\Lambda_k(0) = \frac{\pi}{L} \left(1 + 2E\left(\frac{k}{2}\right) \right) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.127a)$$

$$\Lambda_k(1) = \frac{2\pi}{L} E\left(\frac{k+1}{2}\right) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.127b)$$

où $E(x)$ désigne la partie entière de x . L'énergie de l'état fondamental $|0(q)\rangle$ de $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ s'écrit :

$$E_0(q) = -\frac{1}{2} \sum_k |\Lambda_k(q)| \quad (1.128)$$

et les niveaux excités $|\alpha(q)\rangle$ sont obtenus en ajoutant des fermions à l'état fondamental, avec un changement de parité lorsque le nombre d'excitations ajoutées est impair.

- Dans le secteur $q = 0$, $|0(0)\rangle$ ne contient aucune excitation et $\tilde{\mathcal{H}}(0)P_0$ dans (1.110) sélectionne les niveaux à nombre pair d'excitations :

$$E_0(0), E_0(0) + \Lambda_\alpha(0) + \Lambda_\beta(0), \dots$$

- Dans le secteur $q = 1$, il existe une excitation négative (cf note de bas de page précédente et PFEUTY 1970b) $\Lambda_0(1) < 0$ si $J/h > 1$ (phase de basse température) et l'état fondamental $|0(1)\rangle$ d'énergie $E_0(1)$ contient alors un fermion, $|\Lambda_0(1)|$ devant être réinterprétée comme l'énergie d'excitation d'un trou. On peut en effet écrire :

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{H}}(1) &= \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}(1) \left(\eta_{\alpha}^+ \eta_{\alpha} - \frac{1}{2} \right) \\
&= \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}(1) \eta_{\alpha}^+ \eta_{\alpha} + E_{vide}
\end{aligned} \tag{1.129}$$

où l'énergie du vide, qui par définition ne contient aucun fermion, est donnée par :

$$E_{vide} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}(1) \tag{1.130}$$

En particulierisant l'excitation négative $\Lambda_0(1)$ et en utilisant la relation d'anticommution

$\eta_0^+ \eta_0 = 1 - \eta_0 \eta_0^+$, on obtient l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{H}}(1) &= \sum_{\alpha \neq 0} \Lambda_{\alpha}(1) \eta_{\alpha}^+ \eta_{\alpha} + |\Lambda_0(1)| \eta_0 \eta_0^+ + E_{vide} + \Lambda_0(1) \\
&= \sum_{\alpha \neq 0} \Lambda_{\alpha}(1) \eta_{\alpha}^+ \eta_{\alpha} + |\Lambda_0(1)| \eta_0 \eta_0^+ - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} |\Lambda_{\alpha}(1)|
\end{aligned}$$

dans laquelle on reconnaît l'énergie $E_0(1)$ de l'état fondamental de $\tilde{\mathcal{H}}(1)$:

$$E_0(1) = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} |\Lambda_{\alpha}(1)| \tag{1.131}$$

qui est inférieure à celle du vide :

$$E_0(1) = E_{vide} - |\Lambda_0(1)| = E_{vide} + \Lambda_0(1) \tag{1.132}$$

Lorsqu'une excitation négative existe, l'état fondamental est effectivement impair et

$\tilde{\mathcal{H}}(1)P_1$ sélectionne les niveaux suivants (Figure 1.12) :

$$E_0(1), E_0(1) + \Lambda_{\alpha}(1) + \Lambda_{\beta}(1), \dots \quad J/h > 1$$

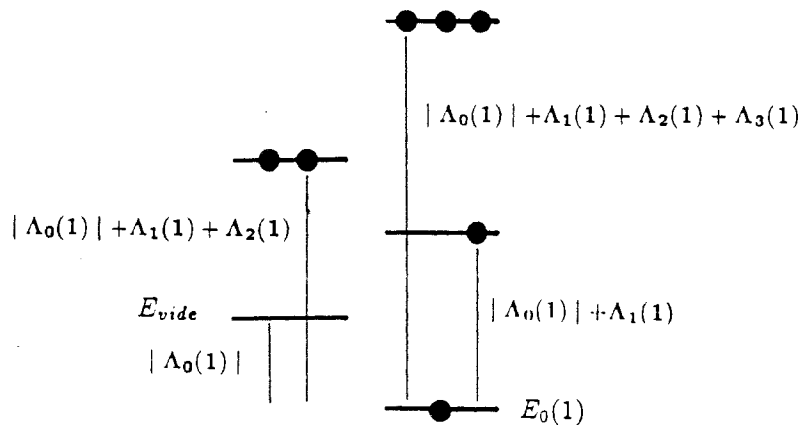


Figure 1.12

Etat fondamental $E_0(1)$ et état du vide E_{vide}

dans la phase de basse température du modèle d'Ising périodique homogène.

Dans la phase de haute température ($J/h < 1$), l'état fondamental d'énergie $E_0(1)$ coïncide avec l'état du vide et les niveaux impairs sélectionnés par $\tilde{\mathcal{H}}(1)P_1$ contiennent un nombre impair d'excitations :

$$E_0(1) + \Lambda_\alpha(1), E_0(1) + \Lambda_\alpha(1) + \Lambda_\beta(1) + \Lambda_\gamma(1), \dots \quad J/h < 1$$

La construction des états propres de $\mathcal{H}$ dans les phases de haute et de basse températures est schématisée par les figures (1.13) et (1.14).

Les énergies des états fondamentaux de chaque secteur sont exponentiellement dégénérées (PFEUTY 1970b) dans la phase basse température :

$$E_0(1) - E_0(0) \sim e^{-L} \quad (1.133)$$

Ainsi, dans la limite thermodynamique, l'annulation de $\Lambda_0(1)$ coïncide avec la disparition du gap dans le spectre de $\mathcal{H}$ et l'apparition de l'ordre à grande distance.

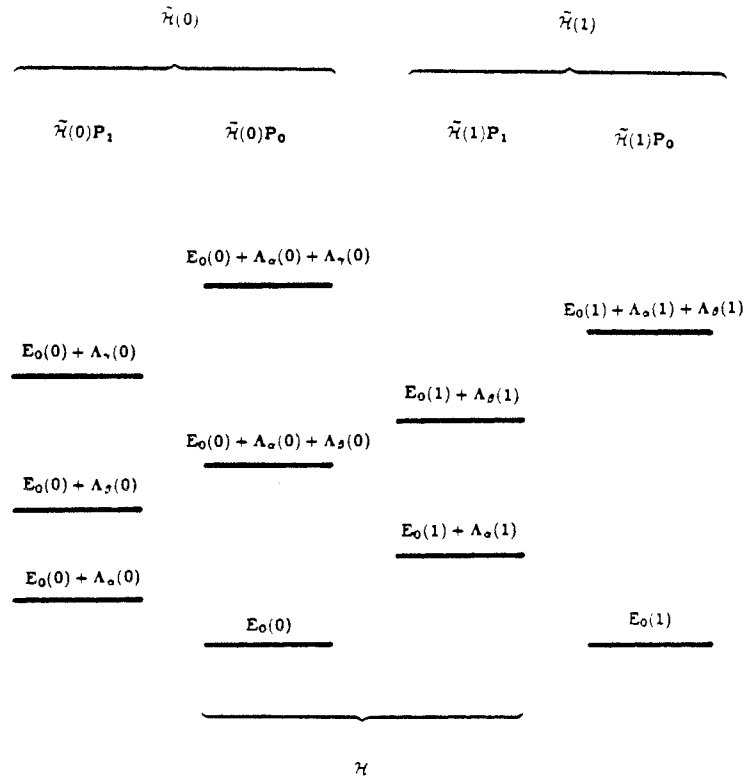


Figure 1.13

Construction des états propres de $\mathcal{H}$

à partir de ceux de $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ dans la phase de haute température.

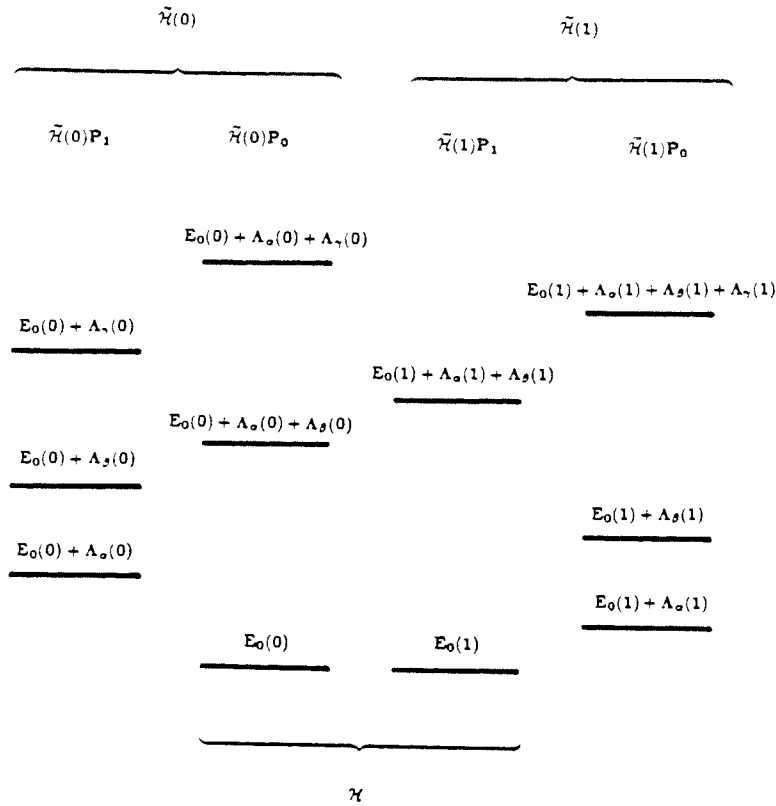


Figure 1.14

Construction des états propres de $\mathcal{H}$

à partir de ceux de $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ dans la phase de basse température.

5.1.2 Effets de taille finie

L'invariance conforme a permis d'établir le comportement dominant des éléments de matrice d'un opérateur ϕ

$$\langle 0 | \phi | \phi \rangle \sim L^{-x_\phi} \quad (1.134)$$

en accord avec les effets de taille finie.

Dans le cas du modèle d'Ising, les exposants x_m et x_e du paramètre d'ordre $\sigma_x(i)$ et de la densité d'énergie $\sigma_z(i)$ (ou $\sigma_x(i)\sigma_x(i+1)$) peuvent être déduits du comportement des éléments de matrice :

$$m_x(i) = \langle 0 | \sigma_x(i) | \sigma \rangle \quad (1.135a)$$

$$e_z(i) = \langle 0 | \sigma_z(i) | \varepsilon \rangle \quad (1.135b)$$

L'état fondamental $|0\rangle$ étant associé à la valeur propre de l'opérateur de charge $+1$ ($Q|0\rangle = |0\rangle$) et, puisque σ_x anticommute avec Q ($Q\sigma_x = -\sigma_x Q$), les éléments de matrice (1.135a) ne sont non nuls que si $|\sigma\rangle$ est un état propre impair de $\mathcal{H}$ (*). Dans (1.135), l'état propre $|\sigma\rangle$ représente alors le premier état excité impair de l'hamiltonien. De même, comme σ_z commute avec Q ($Q\sigma_z = \sigma_z Q$) dans l'élément de matrice (1.135b), $|\varepsilon\rangle$ est le premier état excité pair. Notons que si $\langle 0 | \sigma_z | 0 \rangle$ n'est pas nul, il contient une contribution régulière que l'on élimine en calculant un terme non diagonal.

L'aimantation ainsi définie couple les deux secteurs de parité de l'hamiltonien ; elle ne peut donc pas s'exprimer dans le formalisme des opérateurs fermions $\eta_\alpha^+, \eta_\alpha$ pour un système avec conditions aux limites périodiques. Ce n'est pas le cas de l'énergie qui fait uniquement intervenir les états propres de l'hamiltonien $\tilde{\mathcal{H}}(0)$. L'énergie s'exprime alors en fonction des vecteurs propres Φ_k et Ψ_k (1.116) à (1.118). En effet, en utilisant (1.105), $\sigma_z(\ell)$ s'écrit sous la forme :

$$\sigma_z(\ell) = 2c^+(\ell)c(\ell) - \mathbb{1} \quad (1.136)$$

En inversant les relations (1.114a) et (1.114b)

$$c(\ell) = \sum_{\alpha} g_{\alpha\ell} \eta_{\alpha} + h_{\alpha\ell} \eta_{\alpha}^+ \quad (1.137a)$$

$$c^+(\ell) = \sum_{\alpha} g_{\alpha\ell} \eta_{\alpha}^+ + h_{\alpha\ell} \eta_{\alpha} \quad (1.137b)$$

et, en écrivant l'état excité $|\varepsilon\rangle$ sous la forme

$$|\varepsilon\rangle = \eta_k^+ \eta_{k'}^+ |0\rangle, \quad k < k' \quad (1.138)$$

on obtient l'énergie :

$$\begin{aligned} e_z(\ell) &= 2 \langle 0 | c^+(\ell)c(\ell) | \varepsilon \rangle \\ &= 2 \sum_{\alpha\beta} \langle 0 | g_{\alpha\ell} h_{\beta\ell} \eta_{\alpha} \eta_{\beta} \eta_k^+ \eta_{k'}^+ | 0 \rangle \end{aligned}$$

(*) En particulier, la valeur nulle de $\langle 0 | \sigma_x | 0 \rangle$ pour un système fini est reliée à la symétrie $\sigma_x \rightarrow -\sigma_x$ (HAMER 1982, TAKANO et SAITO 1985).

L'utilisation des règles d'anticommutation des opérateurs fermions conduit alors à :

$$\langle 0 | \eta_\alpha \eta_\beta \eta_k^+ \eta_{k'}^+ | 0 \rangle = \delta_{\alpha k'} \delta_{\beta k} - \delta_{\alpha k} \delta_{\beta k'}$$

d'où finalement :

$$e_z(\ell) = \phi_k(\ell) \psi_{k'}(\ell) - \phi_{k'}(\ell) \psi_k(\ell) \quad (1.139)$$

Avec (1.125) et en écrivant (1.126) sous la forme explicite :

$$\psi_k(\ell) = -\frac{1}{\Lambda_k} \sqrt{\frac{2}{L}} \left[(1 + \cos k) \sin k\ell + \sin k \cos k\ell \right] \quad (1.140)$$

le calcul de l'énergie sur le premier site donne ainsi :

$$e_z(1) \sim L^{-1} \quad (1.141)$$

Si cette méthode n'est pas applicable au calcul de l'aimantation dans le cas présent (*), on peut cependant obtenir les fonctions de corrélation réduites (PFEUTY 1970a) qui, évaluées au point critique, où

$$G_\phi(\ell) \sim \ell^{-\eta_\phi} \quad (1.142)$$

conduisent aux exposants critiques $x_\phi = \eta_\phi/2$. On obtient pour l'énergie et l'aimantation les comportements suivants :

$$G_\varepsilon(\ell) \sim \ell^{-2} \quad (1.143a)$$

$$G_\sigma(\ell) \sim \ell^{-1/4} \quad (1.143b)$$

Ces résultats sont compatibles avec les valeurs

$$x_e = 1 \quad (1.144a)$$

$$x_m = 1/8 \quad (1.144b)$$

(*) $m_x(\ell)$ fait en effet intervenir des états propres de deux opérateurs distincts $\tilde{\mathcal{H}}(0)$ et $\tilde{\mathcal{H}}(1)$.

5.1.3 Invariance conforme

La détermination des exposants critiques par les méthodes d'effets de taille finie doit être effectuée sur le système bidimensionnel initial. Dans la limite thermodynamique $L \longrightarrow \infty$, le ruban redonne bien le système infini en question, ce qui légitime les calculs du paragraphe précédent. L'étude des propriétés critiques par invariance conforme doit en revanche être réalisée sur le modèle projeté par transformation conforme, *i.e.* sur le ruban. Les deux techniques peuvent ainsi être menées à bien conjointement sur le même système (le ruban) lorsque, dans la limite thermodynamique, le modèle initial et celui qui lui correspond par projection conforme sont asymptotiquement confondus.

Au point critique, la relation gap-exposant pour les exposants x_e et x_m s'écrit :

$$E_\epsilon - E_0 = \frac{2\pi}{L} x_e \quad (1.145a)$$

$$E_\sigma - E_0 = \frac{2\pi}{L} x_m \quad (1.145b)$$

avec (Figure 1.15) :

$$E_\epsilon = E_0(0) + \Lambda_0(0) + \Lambda_1(0) \quad (1.146a)$$

$$E_\sigma = E_0(1) + \Lambda_0(1) \quad (1.146b)$$

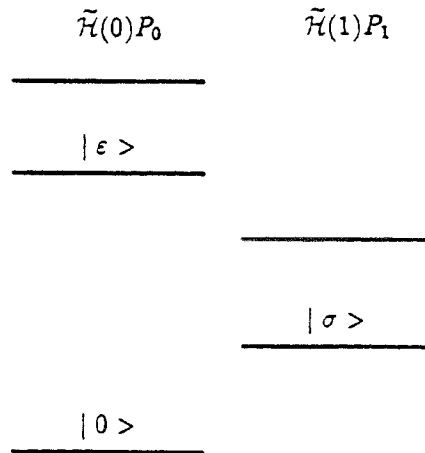


Figure 1.15

Etats $|0\rangle$, $|\sigma\rangle$ et $|\epsilon\rangle$.

L'état fondamental E_0 est toujours celui du secteur pair

$$E_0 = E_0(0)$$

et $\Lambda_0(0)$, $\Lambda_1(0)$ sont deux excitations dégénérées correspondant dans (1.124a) à $k = \pi/L$ et $k = 2\pi - \pi/L$. On obtient ainsi (BURKHARDT et GUIM 1985b) :

$$E_\epsilon - E_0 = 4 \sin(\pi/2L) = \frac{2\pi}{L} \times 1 + O(L^{-3}) \quad (1.147a)$$

$$E_\sigma - E_0 = \tan(\pi/4L) = \frac{2\pi}{L} \times \frac{1}{8} + O(L^{-3}) \quad (1.147b)$$

en accord avec (1.144a et b). La charge centrale de l'algèbre de Virasoro est déduite du comportement de l'énergie de l'état fondamental (BURKHARDT et GUIM 1985b) :

$$E_0(0) = -\frac{1}{\sin(\pi/2L)} \quad (1.148a)$$

soit

$$\frac{E_0}{L} = -\frac{2}{\pi} - \frac{\pi}{12}L^{-2} + \dots \quad (1.148b)$$

d'où

$$c = 1/2 \quad (1.149)$$

La construction complète du spectre (tours conformes et dégénérescences des états excités) est elle aussi donnée par l'invariance conforme. En particulier, les dégénérescences s'obtiennent à partir des expressions des caractères des représentations de l'algèbre de Virasoro (HENKEL 1987a et b, 1990, RITTENBERG 1988). Dans une représentation de charge centrale c et de poids conforme h_ϕ , les caractères permettent de calculer le nombre d'états linéairement indépendants au niveau N , noté $d(h_\phi, N)$ (ROCHA-CARIDI 1984, ITZYKSON et DROUFFE 1989). Au niveau 3 par exemple, on peut en principe, à partir des deux algèbres $\mathcal{V}$ et $\bar{\mathcal{V}}$, construire neuf états de base $L_{-3} | \phi \rangle$, $L_{-1}L_{-2} | \phi \rangle$, $L_{-1}\bar{L}_{-2} | \phi \rangle$, $\bar{L}_{-1}L_{-2} | \phi \rangle$, $\bar{L}_{-1}\bar{L}_{-2} | \phi \rangle$, $L_{-1}^3 | \phi \rangle$, $L_{-1}^2\bar{L}_{-1} | \phi \rangle$, $L_{-1}\bar{L}_{-1}^2 | \phi \rangle$ et $\bar{L}_{-1}^3 | \phi \rangle$, alors que, dans le cas du modèle d'Ising, il n'y en a que six dans la tour conforme de σ et cinq dans celle de ε (Tableau 1.2).

Niveau	Tour conforme de σ	$d(N)$	Tour conforme de ε	$d(N)$
0	$E_0(1) + 0$	(1)	$E_0(0)$	(1)
1	$E_0(1) + \frac{2\pi}{L}$ $E_0(1) + \frac{2\pi}{L}$	(2)	$E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{\pi}{L}$	(1)
2	$E_0(1) + \frac{4\pi}{L}$ $E_0(1) + \frac{4\pi}{L}$ $E_0(1) + 0 + \frac{2\pi}{L} + \frac{2\pi}{L}$	(3)	$E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{3\pi}{L}$ $E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{3\pi}{L}$ $E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{3\pi}{L}$ $E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{3\pi}{L}$	(4)
3	$E_0(1) + \frac{6\pi}{L}$ $E_0(1) + \frac{6\pi}{L}$ $E_0(1) + 0 + \frac{2\pi}{L} + \frac{4\pi}{L}$ $E_0(0) + 0 + \frac{2\pi}{L} + \frac{4\pi}{L}$ $E_0(1) + 0 + \frac{2\pi}{L} + \frac{4\pi}{L}$ $E_0(1) + 0 + \frac{2\pi}{L} + \frac{4\pi}{L}$	(6)	$E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{5\pi}{L}$ $E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{5\pi}{L}$ $E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{5\pi}{L}$ $E_0(0) + \frac{\pi}{L} + \frac{5\pi}{L}$ $E_0(0) + \frac{3\pi}{L} + \frac{3\pi}{L}$	(5)

Tableau 1.2

Tours conformes des opérateurs σ et ε construites à partir des excitations $\Lambda_k(q)$.

Indiquons à titre d'exemple la construction de ces états. Le tableau (1.3) donne les dégénérescences $d(h_\phi, N)$ des trois représentations de charge centrale $c = 1/2$.

$d(h_\phi, N)$	N								
h_ϕ	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	1	0	1	1	2	2	3	3	5
1/2	1	1	1	1	2	2	3	4	5
1/16	1	1	1	2	2	3	4	5	6

Tableau 1.3

Dégénérescences des représentations irréductibles de charge centrale $c = 1/2$.

Les états de base $|\psi\rangle$ sont construits à partir de deux représentations correspondant aux deux algèbres $\mathcal{V}$ et $\bar{\mathcal{V}}$ et sont notés $[h_\phi + N] + [\bar{h}_\phi + \bar{N}]$. Ils sont tels que

$$\frac{L}{2\pi}(\mathcal{H} - E_0) |\psi\rangle = (L_0 + \bar{L}_0) |\psi\rangle = (h_\phi + \bar{h}_\phi + N + \bar{N}) |\psi\rangle \quad (1.150a)$$

$$\frac{L}{2\pi}\mathcal{P} |\psi\rangle = (L_0 - \bar{L}_0) |\psi\rangle = (h_\phi - \bar{h}_\phi + N - \bar{N}) |\psi\rangle \quad (1.150b)$$

- Dans le secteur impair, l'opérateur σ , de dimension critique égale à $1/8$ correspond à $[\frac{1}{16} + 0] + [\frac{1}{16} + \bar{0}]$. Il est non dégénéré ($d(\frac{1}{16}, 0) = d(\frac{1}{16}, \bar{0}) = 1$). Les états excités au niveau 3 dans la tour du champ primaire σ correspondent à :

$$\frac{L}{2\pi}(E - E_0) = \frac{1}{8} + 3 \quad (1.151)$$

de dégénérescence 6 (Tableau 1.4).

- Dans le secteur pair, l'opérateur ε correspond à $[\frac{1}{2} + 0] + [\frac{1}{2} + \bar{0}]$. Il ne suffit pourtant pas à lui seul à générer le spectre et il faut lui adjoindre l'opérateur identité $\mathbb{1}$ correspondant à $[0 + 0] + [\bar{0} + \bar{0}]$ et qui représente l'état fondamental du modèle. Le secteur pair est ainsi engendré par les deux opérateurs primaires $(0, \bar{0})$ et $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Les états excités du niveau 3 correspondent à

$$\frac{L}{2\pi}(E - E_0) = 3 + 0 \quad (1.152)$$

et sont cinq fois dégénérés (Tableau 1.5).

Une représentation commode consiste à situer ces états sur un système d'axes $E - E_0$ en fonction de P (HENKEL 1987a et b, CARDY 1987a) (Figures 1.16 et 1.17).

<i>Notation</i>	$L_0 + \bar{L}_0$	$L_0 - \bar{L}_0$	Dégénérescence $d(\frac{1}{16}, N) \times d(\frac{\bar{1}}{16}, \bar{N})$	<i>Etat</i>
$\left[\frac{1}{16} + 3\right] + \left[\frac{\bar{1}}{16} + \bar{0}\right]$	$\frac{1}{8} + 3$	3	2	$\left\{ \begin{array}{l} L_{-3} \sigma > \\ L_{-1} \bar{L}_{-2} \sigma > \end{array} \right.$
$\left[\frac{1}{16} + 2\right] + \left[\frac{\bar{1}}{16} + \bar{1}\right]$	$\frac{1}{8} + 3$	1	1	$\bar{L}_{-1} L_{-2} \sigma >$
$\left[\frac{1}{16} + 1\right] + \left[\frac{\bar{1}}{16} + \bar{2}\right]$	$\frac{1}{8} + 3$	-1	1	$L_{-1} \bar{L}_{-2} \sigma >$
$\left[\frac{1}{16} + 0\right] + \left[\frac{\bar{1}}{16} + \bar{3}\right]$	$\frac{1}{8} + 3$	-3	2	$\left\{ \begin{array}{l} \bar{L}_{-1} \bar{L}_{-2} \sigma > \\ \bar{L}_{-3} \sigma > \end{array} \right.$

Tableau 1.4

*Etats propres linéairement indépendants,
dégénérés au niveau $N = 3$ du secteur impair (conditions périodiques).*

<i>Notation</i>	$L_0 + \bar{L}_0$	$L_0 - \bar{L}_0$	Dégénérescence $d(h_\phi, N) \times d(\bar{h}_\phi, \bar{N})$	<i>Etat</i>
$[0 + 3] + [\bar{0} + \bar{0}]$	3	3	1	$L_{-3} \mathbb{1} >$
$\left[\frac{1}{2} + 2\right] + \left[\frac{\bar{1}}{2} + \bar{0}\right]$	3	2	1	$L_{-2} \varepsilon >$
$\left[\frac{1}{2} + 1\right] + \left[\frac{\bar{1}}{2} + \bar{1}\right]$	3	0	1	$L_{-1} \bar{L}_{-1} \varepsilon >$
$\left[\frac{1}{2} + 0\right] + \left[\frac{\bar{1}}{2} + \bar{2}\right]$	3	-2	1	$\bar{L}_{-2} \varepsilon >$
$[0 + 0] + [\bar{0} + \bar{3}]$	3	-3	1	$\bar{L}_{-3} \mathbb{1} >$

Tableau 1.5

*Etats propres linéairement indépendants,
dégénérés au niveau $N = 3$ du secteur pair (conditions périodiques).*

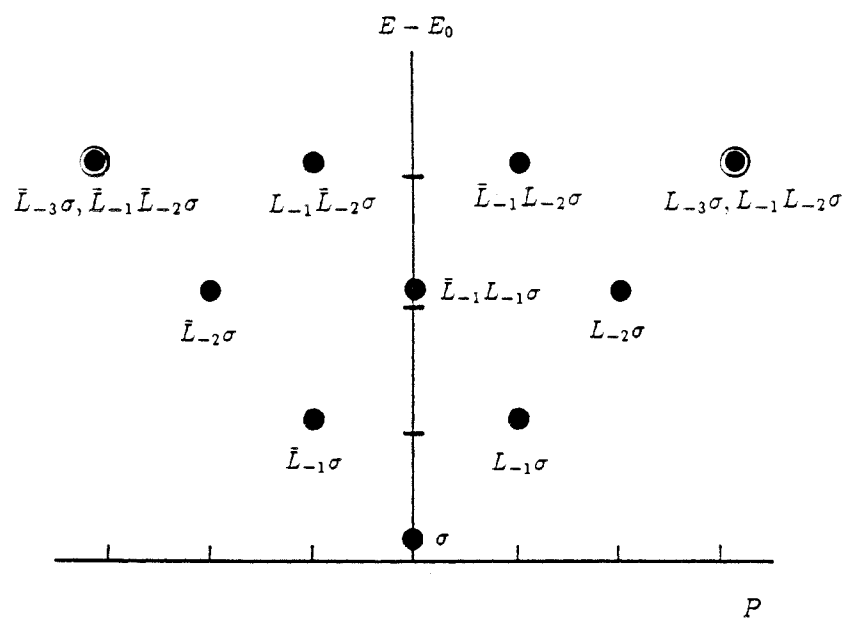


Figure 1.16

Etats propres du secteur impair construits par l'algèbre conforme.

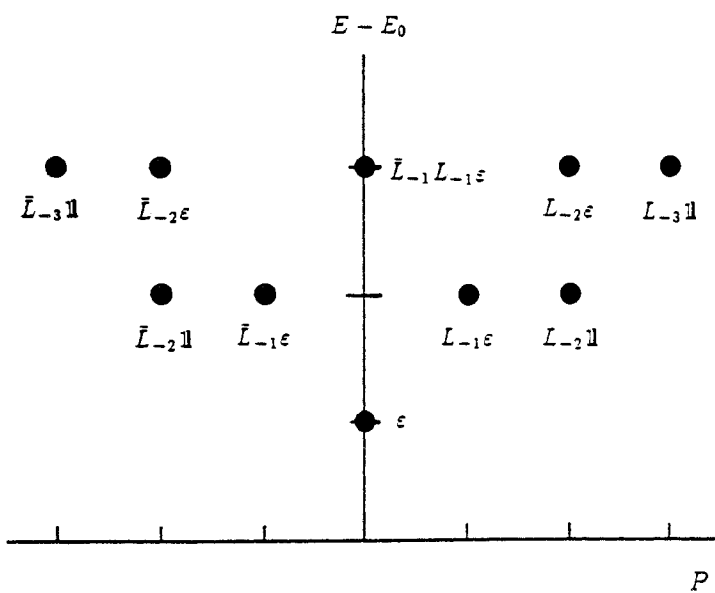


Figure 1.17

Etats propres du secteur pair construits par l'algèbre conforme.

5.2 Conditions de bords libres

Les propriétés de la chaîne quantique d'Ising avec conditions de bords libres sont étudiées ici avec les méthodes développées au paragraphe précédent.

L'hamiltonien a la forme (1.102) avec $J(L) = 0$, ce qui introduit de nombreuses simplifications. Après une transformation de Jordan-Wigner, on obtient en effet une forme quadratique immédiatement diagonalisable, car le terme non local dans (1.107) disparaît. Les deux secteurs de parité sont construits avec les mêmes excitations, un nombre pair (respectivement impair) d'excitations conduisant aux niveaux excités pairs (respectivement impairs) à partir de l'état fondamental.

L'équation aux valeurs propres (1.120) fournit les excitations du système homogène :

$$\Lambda_k^2 = h^2 + J^2 - 2hJ \cos k \quad (1.153)$$

et les conditions aux limites deviennent :

$$hJ\phi(0) + J^2\phi(1) = 0 \quad (1.154a)$$

$$hJ\phi(L+1) = 0 \quad (1.154b)$$

d'où l'on déduit la condition de quantification :

$$\frac{\sin(L+1)k}{\sin Lk} = \frac{J}{h} \quad (1.155)$$

soit

$$k = \frac{2p+1}{2L+1}\pi, \quad p = 0, 1, \dots, L-1 \quad (1.156)$$

Le calcul des exposants critiques par effets de taille finie peut être effectué à partir des éléments de matrice (1.135). Par un calcul analogue à celui qui conduit à $e_z(\ell)$, on obtient l'expression de l'aimantation sur le site de surface ;

$$m_x(1) = \langle 0 | \sigma_x(1) | \sigma \rangle = \phi_k(1) \quad (1.157)$$

où l'on a utilisé

$$| \sigma \rangle = \eta_k^+ | 0 \rangle \quad (1.158)$$

et

$$\sigma_x(1) = c^+(1) + c(1) \quad (1.159)$$

Au point critique, on obtient les comportements suivants :

$$m_x(1) \sim L^{-1/2} \quad (1.160a)$$

$$e_z(1) \sim L^{-2} \quad (1.160b)$$

d'où l'on déduit les valeurs des exposants (BURKHARDT et CARDY 1987) :

$$x_m^s = 1/2 \quad (1.161a)$$

$$x_e^s = 2 \quad (1.161b)$$

La relation gap-exposant confirme ces valeurs :

$$E_\varepsilon - E_0 = \frac{\pi}{L} x_e^s \quad (1.162a)$$

$$E_\sigma - E_0 = \frac{\pi}{L} x_m^s \quad (1.162b)$$

avec

$$E_\varepsilon - E_0 = \Lambda_0 + \Lambda_1 = \frac{2\pi}{L} \quad (1.163a)$$

$$E_\sigma - E_0 = \Lambda_0 = \frac{\pi}{2L} \quad (1.163b)$$

et l'on retrouve la valeur de la charge centrale :

$$E_0 = \frac{1}{2} \left[1 - \left(\sin \frac{\pi}{2(2L+1)} \right)^{-1} \right] \quad (1.164a)$$

$$\frac{E_0}{L} = -\frac{2}{\pi} + \frac{\pi-2}{2\pi} L^{-1} - \frac{\pi}{48} L^{-2} + o(L^{-3}) \quad (1.164b)$$

soit

$$c = 1/2 \quad (1.165)$$

La construction du spectre nécessite une seule algèbre de Virasoro. L'aimantation σ correspond au champ primaire $[\frac{1}{2} + 0]$ de dimension $x_m = \frac{1}{2}$ et la densité d'énergie doit être cherchée dans la ligne (0) du tableau (1.3). L'identité 11 correspond à $[0 + 0]$; l'état suivant $[0 + 1]$ n'existe pas, car il est de dégénérescence

nulle (cf. Tableau (1.3) : $d(0, 1) = 0$). Il reste $[0 + 2]$ que l'on identifie à ε (CARDY 1986c). Les états du niveau 3 sont construits comme précédemment (Tableau 1.6). Ils correspondent aux gaps

- dans le secteur pair :

$$\frac{L}{\pi}(E - E_0) = 3 \quad (1.166)$$

- dans le secteur impair :

$$\frac{L}{\pi}(E - E_0) = 3 + \frac{1}{2} \quad (1.167)$$

et sont non dégénérés (Tableau 1.6).

<i>Notation</i>	L_0	Dégénérescence	<i>Etat</i>
$[0 + 3]$	3	1	$L_{-1} \varepsilon >$
$\begin{bmatrix} 1 \\ - + 3 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2} + 3$	1	$L_{-3} \sigma >$

Tableau 1.6

Etats propres linéairement indépendants au niveau $N = 3$ (conditions de bords libres).

6. Conclusion

Ce premier chapitre a eu pour objectif de présenter des généralités sur les phénomènes critiques et, par là, de fournir le matériau nécessaire à la suite de ce travail.

Toutes les techniques qui seront utilisées y ont été détaillées, en particulier les effets de taille finie et l'invariance conforme dont on a vu qu'elle constitue une méthode puissante pour traiter les systèmes critiques homogènes. Le modèle d'Ising bidimensionnel que nous avons présenté dans sa version quantique a été diagonalisé par transformation de Jordan-Wigner puis par transformation canonique. Nous avons à cette occasion introduit les notations auxquelles nous nous référerons systématiquement dans les pages suivantes.

2

Transitions de surface dans le modèle d'Ising bidimensionnel. Surfaces - Interfaces

1. Introduction

Le comportement d'un système à son point critique est sensible aux conditions aux limites imposées par la présence de surfaces ou d'interfaces. Il en résulte un comportement critique modifié, caractérisé par des exposants spécifiques.

L'étude des comportements critiques de surface (BRAY et MOORE 1977a, BINDER 1983, ABRAHAM 1986, DIEHL 1986, STELLA et VANDERZANDE 1990) s'est tout d'abord développée dans le cadre des théories de champ moyen dans la lignée de Cahn et Hilliard (1958). Le groupe de renormalisation et les propriétés d'homogénéité ont ensuite permis de calculer les exposants de surface.

Dans le même temps, la généralisation à l'étude de défauts variés comme la présence de deux surfaces (AU-YANG et FISHER 1975 et 1980, FISHER et DE GENNES 1978, FISHER et AU-YANG 1980), de la ligne de défauts en surface (MC COY et WU 1967, AU-YANG 1973, BOCCARA et SARMA 1974) ou en volume (BARIEV 1979, MC COY et PERK 1980), a posé le problème de la pertinence des perturbations. Dans certains cas, la présence d'une perturbation entraîne en effet une modification du comportement critique. La discussion de la pertinence des défauts s'effectue logiquement dans le cadre du groupe de renormalisation.

Ces dernières années, l'invariance conforme a trouvé son application dans l'étude des comportements critiques de surface (CARDY 1984a et 1986c), mais son développement systématique dans le cas des défauts est encore embryonnaire.

L'objet de ce chapitre est donc, dans ce contexte, d'étudier deux types de perturbations dans le modèle d'Ising. Les comportements critiques de surface sont rapidement discutés dans le formalisme de Ginzburg-Landau pour aboutir à un diagramme de phase et à la définition des exposants critiques de surface. On s'intéresse ensuite à la pertinence des défauts présentée dans un cadre général, puis à des perturbations non pertinentes et pertinentes étudiées dans deux types de géométries. Les calculs sont effectués par effets de taille finie et les spectres étudiés en vue d'une application de l'invariance conforme. Seuls les résultats sont discutés directement dans le texte, les détails des calculs étant regroupés en annexe à la fin du chapitre.

2. Phénomènes critiques à la surface d'un système semi-infini

2.1 Diagramme de phase dans la théorie de Ginzburg-Landau

Au point critique, la longueur de corrélation devient infinie, les effets de bords peuvent alors devenir prépondérants et la surface d'un système semi-infini est susceptible de présenter des comportements variés. Une approche phénoménologique simple, généralisant celle de Ginzburg-Landau, permet de classer les comportements critiques éventuellement observés en surface (MILLS 1971, BINDER et HOHENBERG 1972, 1974 et 1976, KAGANOV et OMEL'YANCHUK 1972, KUMAR 1974, LUBENSKI et RUBIN 1975).

On suppose pour cela que l'énergie libre totale d'un système de volume Ω et de surface Σ est constituée d'une contribution de volume que l'on écrit comme une fonctionnelle de Ginzburg-Landau (GINZBURG et LANDAU 1950, GINZBURG et PITAEVSKII 1958) :

$$F_{\Omega}[\phi(\vec{r})] = \int_{\Omega} d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} a(T - T_c)\phi^2(\vec{r}) + \frac{1}{4} b\phi^4(\vec{r}) + \frac{1}{2} c \|\vec{\nabla}\phi(\vec{r})\|^2 \right] \quad (2.1)$$

et d'une contribution de surface ne dépendant que de la valeur du paramètre d'ordre

$\phi(\vec{\rho})$ en surface :

$$F_{\Sigma}[\phi(\vec{\rho})] = \int_{\Sigma} d^2 \vec{\rho} \left\{ \frac{1}{2} \frac{c}{\lambda} \phi^2(\vec{\rho}) \right\} \quad (2.2)$$

où $\vec{\rho}$ repère la position d'un point de la surface, a , b et c sont des constantes phénoménologiques positives et λ une grandeur homogène à une longueur, caractérisant l'énergie libre de surface et appelée longueur d'extrapolation (DE GENNES 1966, BINDER et HOHENBERG 1972, KUMAR 1974). Lorsque le système considéré est une plaque d'épaisseur L , perpendiculaire à l'axe Oz et infinie dans les deux autres directions, l'énergie libre totale s'écrit comme une fonctionnelle de $\phi(z)$ si l'on néglige les fluctuations du paramètre d'ordre dans les plans xOy :

$$F[\phi(z)] = \int_0^L dz \left[\frac{1}{2} a(T-T_c) \phi^2(z) + \frac{1}{4} b \phi^4(z) + \frac{1}{2} c \left(\frac{d\phi(z)}{dz} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} \frac{c}{\lambda} (\phi^2(0) + \phi^2(L)) \quad (2.3)$$

A la température T , le profil du paramètre d'ordre $\phi(z)$ dans l'approximation du champ moyen est celui qui minimise F . Il est solution de l'équation d'Euler-Lagrange :

$$a(T - T_c) \phi(z) + b \phi^3(z) - c \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = 0 \quad (2.4)$$

assortie des conditions aux limites suivantes :

$$\frac{d\phi(z)}{dz} - \frac{1}{\lambda} \phi(z) = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (2.5a)$$

$$\frac{d\phi(z)}{dz} + \frac{1}{\lambda} \phi(z) = 0 \quad \text{en } z = L \quad (2.5b)$$

Ces conditions aux limites donnent lieu à des comportements critiques en surface qui dépendent du signe du coefficient λ^{-1} .

- Si λ^{-1} est positif, le profil du paramètre d'ordre décroît au voisinage de la surface et sa valeur $\phi(0)$ y est inférieure à celle de volume ϕ_b . Ce comportement caractérise la transition ordinaire (Figure 2.1a), la mise en ordre de la surface étant induite par celle du volume.

- Si λ^{-1} est négatif en revanche, c'est en surface que le paramètre d'ordre prend sa valeur la plus élevée puisqu'il croît au voisinage des limites. La surface s'ordonne alors avant le volume lorsque la température diminue. L'apparition de l'ordre se fait donc en premier lieu en surface, à une température T_c^s , et constitue la transition

de surface (Figure 2.1c). Elle est suivie de la transition extraordinaire (Figure 2.1d) lorsque le volume s'ordonne à son tour à la température T_c (inférieure à T_c^* , la mise en ordre du volume induisant alors des singularités faibles dans les propriétés de surface).

- Les deux régimes que distingue le signe de λ^{-1} sont séparés par le cas $\lambda^{-1} = 0$ qui caractérise la transition spéciale. Dans ce cas, le paramètre d'ordre présente un profil uniforme (Figure 2.1b) et l'ordre apparaît simultanément en surface et en volume.

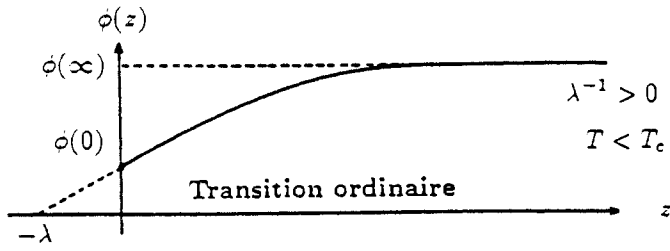


Figure 2.1a

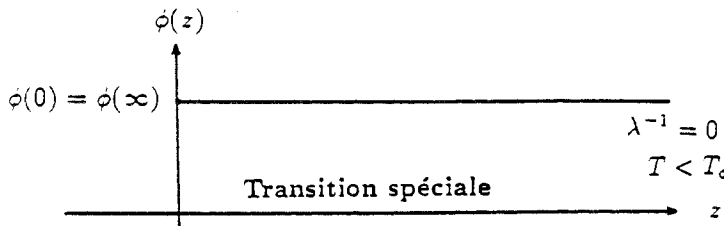


Figure 2.1b

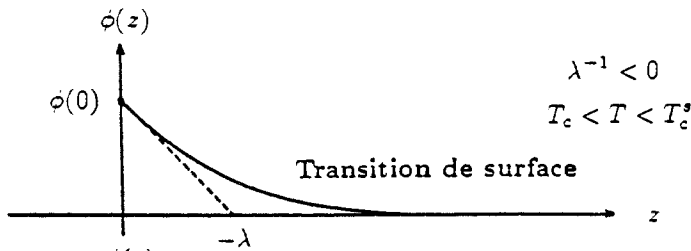


Figure 2.1c

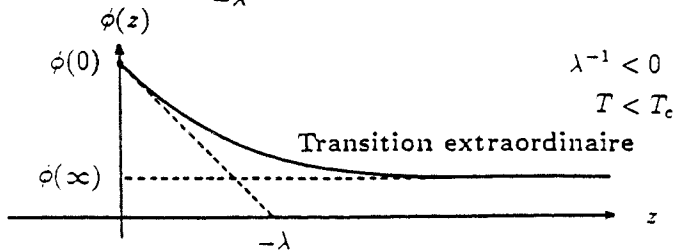


Figure 2.1d

Figure 2.1

Profils du paramètre d'ordre au voisinage d'une surface dans la théorie de Ginzburg-Landau.

Cette discussion qualitative est résumée par le diagramme de phase de champ moyen (Figure 2.2) (BINDER et HOHENBERG 1974, LUBENSKI et RUBIN 1975, BRAY et MOORE 1977a, BURKHARDT et EISENRIEGLER 1977, 1978 et 1981, DIEHL 1982, NAKANISHII et FISHER 1982, WORTIS et ŠVRAKIĆ 1982, BINDER et LANDAU 1984, PLASCAK 1984).

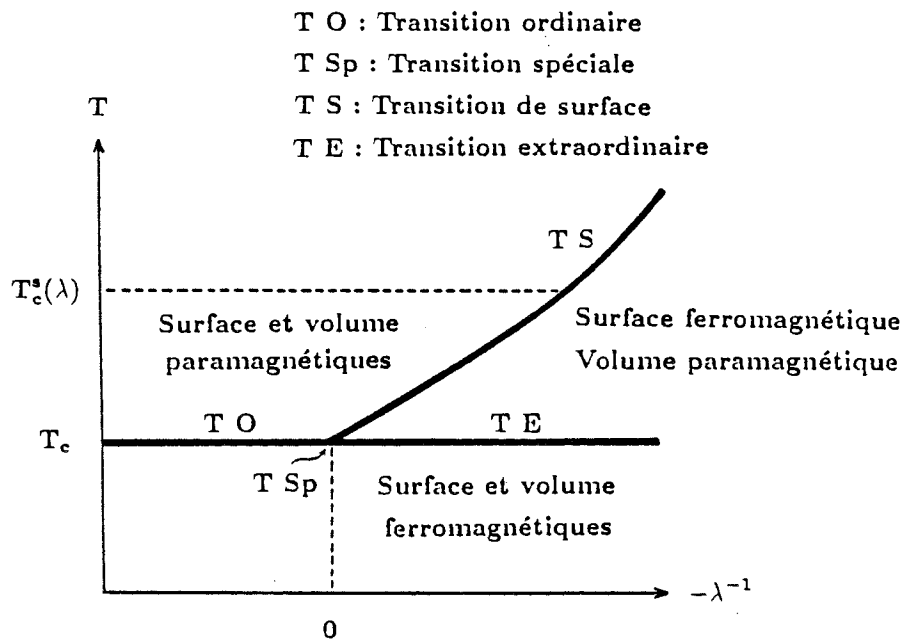


Figure 2.2

Diagramme de phase indiquant les comportements de surface en champ moyen.

L'expression du paramètre d'ordre en surface $\phi(0)$ est déterminée en considérant le cas d'un système semi-infini ($L \rightarrow \infty$). L'équation (2.4) est multipliée par $d\phi/dz$ et intégrée de zéro à l'infini pour donner l'équation d'état :

$$\frac{1}{2} a(T - T_c) (\phi^2(\infty) - \phi^2(0)) + \frac{1}{4} b (\phi^4(\infty) - \phi^4(0)) + \frac{1}{2} \frac{c}{\lambda^2} \phi^2(0) = 0 \quad (2.6)$$

où $\phi(\infty)$ est la valeur d'équilibre du paramètre d'ordre en volume (ϕ_b). Dans le cas de la transition ordinaire, $\lambda^{-1} > 0$ et $\phi(0) < \phi(\infty)$, on obtient :

$$\phi(\infty) = \phi(0) = 0 \quad \text{si } T > T_c$$

$$\left. \begin{aligned} \phi(\infty) &= \sqrt{\frac{a}{b}}(T_c - T)^{1/2} \\ \phi(0) &= \sqrt{\frac{\lambda^2 a^2}{2bc}}(T_c - T) \end{aligned} \right\} \text{ si } T < T_c$$

La transition de surface ($\lambda^{-1} < 0$) a lieu à une température $T_c^s(\lambda)$ telle que $\phi(\infty) = 0$ et $\phi(0) \neq 0$ dans l'intervalle $T_c < T < T_c^s(\lambda)$, soit :

$$\begin{aligned} T_c^s(\lambda) &= T_c + \frac{c}{a\lambda^2} \\ \phi(\infty) &= 0, \quad \phi(0) = \sqrt{\frac{2a}{b}}(T_c^s - T)^{1/2} \quad \text{si } T_c < T < T_c^s \\ \phi(0) &= 0 \quad \text{si } T > T_c^s \end{aligned}$$

On se place ensuite à $T < T_c$ pour exprimer le paramètre d'ordre en surface à la transition extraordinaire :

$$\left. \begin{aligned} \phi(\infty) &= \sqrt{\frac{a}{b}}(T_c - T)^{1/2} \\ \phi(0) &= \left(\frac{2c}{b\lambda^2} - \frac{2a}{b}(T - T_c) - \frac{a^2\lambda^2}{2bc}(T - T_c)^2 \right)^{1/2} \end{aligned} \right\} \text{ si } T < T_c$$

Dans le cas de la transition spéciale enfin ($\lambda^{-1} = 0$), on a simplement :

$$\begin{aligned} \phi(\infty) &= \phi(0) = \sqrt{\frac{a}{b}}(T_c - T)^{1/2} \quad T < T_c \\ \phi(\infty) &= \phi(0) = 0 \quad T > T_c \end{aligned}$$

On obtient également l'expression des profils $\phi(z)$ en champ moyen en résolvant (2.4) et (2.5) (BRAY et MOORE 1977a, DIEHL 1986). Ceux-ci sont représentés qualitativement sur la figure 2.1 (BINDER 1983, ZANGWILL 1988).

Les théories de champ moyen sont en défaut au-dessous de la dimension critique supérieure (soit $d_c = 4$ pour un système de spins) et la discussion qualitative qui précède n'est pas réaliste en dimension deux. Dans ce cas en effet, la surface, unidimensionnelle, ne peut pas être ordonnée au-dessus de la température critique du volume (FISHER 1968, GALLAVOTTI, MIRACLE-SOLE et RUELLE 1968, LAJZEROWICZ et PFEUTY 1971, LANDAU et LIFCHITZ 1974). Aussi un système avec conditions de bords libres conduit-il nécessairement à une transition ordinaire en surface. La transition extraordinaire peut néanmoins être induite par l'application d'un champ magnétique local sur les sites de surface (*), mais la transition de surface (et, par conséquent, la transition spéciale) n'existe pas en dimension deux.

(*) Ce sont les conditions de bords fixes où l'orientation des spins de bords est imposée.

2.2 Homogénéité et exposants critiques de surface

Afin de traiter convenablement les comportements critiques de surface, l'homogénéité des fonctions thermodynamiques que nous avons présentée dans la première partie de ce travail doit être révisée de manière à inclure de nouveaux champs d'échelle (BARBER 1973, OKABE et OHNO 1984). On définit pour cela un champ magnétique h_1 agissant uniquement sur les spins de surface et conjugué à l'aimantation locale m_1 , ainsi qu'une température réduite et une énergie locales conjuguées t_1 et e_1 . La partie singulière de la densité d'énergie libre de volume est donnée par (1.56) et l'on écrit la contribution singulière de surface sous la forme :

$$f_s^{(surf)}(t, h, t_1, h_1) = b^{-(d-1)} f_s^{(surf)}(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{y_{t_1}} t_1, b^{y_{h_1}} h_1) \quad (2.7)$$

Les lois d'échelle qui relient entre eux exposants critiques de volume et de surface s'en déduisent alors (BRAY et MOORE 1977a, b et c, KROEMER et PESCH 1979, REEVE et GUTTMANN 1980, DIETRICH et DIEHL 1981, DIEHL, DIETRICH et EISENRIEGLER 1983, OHNO et OKABE 1984). L'aimantation locale, par exemple, est définie par :

$$m_1 = \frac{\partial f_s^{(surf)}}{\partial h_1} \sim t^{\beta_1} \quad (2.8a)$$

d'où

$$\beta_1 = \frac{d-1-y_{h_1}}{y_t} \quad (2.8b)$$

La description complète des propriétés de surface d'un système exige la connaissance des dimensions anormales de tous les champs d'échelle (ou de celles des opérateurs conjugués). Ainsi, pour le modèle d'Ising en dimension deux, viennent s'ajouter aux valeurs (1.59) celles des exposants associés aux nouveaux champs d'échelle :

$$y_{t_1} = -1 \quad \text{soit} \quad x_e^s = 2 \quad (2.9a)$$

$$y_{h_1} = \frac{1}{2} \quad \text{soit} \quad x_m^s = \frac{1}{2} \quad (2.9b)$$

3. Perturbations pertinentes, marginales et non pertinentes

La théorie du groupe de renormalisation nous a permis de préciser les notions de champs d'échelle pertinents, marginaux et non pertinents. C'est dans le même cadre que nous allons maintenant discuter la pertinence de perturbations imposées à un système homogène (BURKHARDT 1984).

Considérons un système de dimension d dont certains champs d'échelle g_k sont perturbés par rapport à leur valeur au point critique dans une région de l'espace Δ de dimension $\bar{d}$:

$$g_k = g_k^c + \delta g_k \quad (2.10)$$

L'hamiltonien du système perturbé s'écrit :

$$-\beta H = -\beta H_c + \sum_{\vec{n} \in \Delta} \delta g_k \phi_k(\vec{n}) \quad (2.11)$$

où les opérateurs $\phi_k(\vec{n})$, localisés sur le défaut Δ , sont conjugués aux champs d'échelle g_k . Par renormalisation, (2.11) se transforme en :

$$-\beta H' = -\beta H'_c + \sum_{\vec{n} \in \Delta} \delta g'_k \phi'_k(\vec{n}) \quad (2.12)$$

avec

$$\delta g'_k = b^{y_{\delta g}} \delta g_k \quad (2.13)$$

En l'absence de perturbation, $-\beta H'_c$ évolue vers le point fixe $-\beta H^*$.

Dans l'expression (2.11), le produit $\delta g_k \phi_k(\vec{n})$ a la dimension d'une énergie par unité de volume du défaut ; il est donc globalement renormalisé par un facteur $b^{\bar{d}}$:

$$\delta g'_k \phi'_k(\vec{n}) = b^{\bar{d}} \delta g_k \phi_k(\vec{n}) \quad (2.14a)$$

soit

$$y_{\delta g} + x_k = \bar{d} \quad (2.14b)$$

d'où l'on déduit l'exposant $y_{\delta g}$:

$$y_{\delta g} = \bar{d} - x_k = \bar{d} - d + y_k \quad (2.15)$$

Si le système de départ est à son point critique comme nous l'avons supposé, c'est la perturbation δg_k qui gouverne le comportement du système.

- Si $y_{\delta g} < 0$, δg_k décroît par renormalisation. La perturbation est non pertinente et le point représentatif du système perturbé dans l'espace des paramètres étendu (*i.e.* incluant le nouveau champ d'échelle δg_k) est sur la surface critique. Le système perturbé évolue ainsi vers l'ancien point fixe, mais sa trajectoire sur la surface critique se trouve modifiée par la présence du défaut (Figure 2.3a). En particulier, si la perturbation est forte, la convergence vers le point fixe est ralentie.

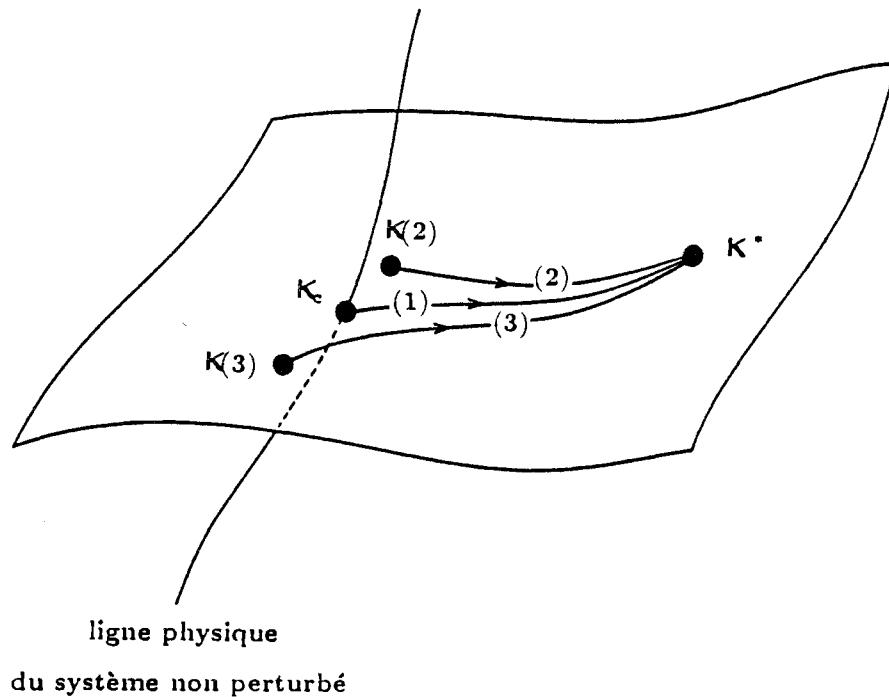


Figure 2.3a

Renormalisation d'un système perturbé localement par un défaut non pertinent.

- Si $y_{\delta g} > 0$, δg_k augmente par renormalisation et éloigne le système perturbé du point fixe K^* pour le conduire, par renormalisation, vers un nouveau point fixe $\bar{K}^*$ situé lui aussi dans la surface critique, mais caractérisé par de nouveaux exposants

critiques (*). C'est le cas d'une perturbation pertinente. Dans l'espace des paramètres, le point représentatif du système perturbé reste sur la surface critique mais, plus la perturbation est forte, plus la trajectoire s'éloigne rapidement de l'ancien point fixe pour évoluer vers le nouveau point fixe (Figure 2.3b).

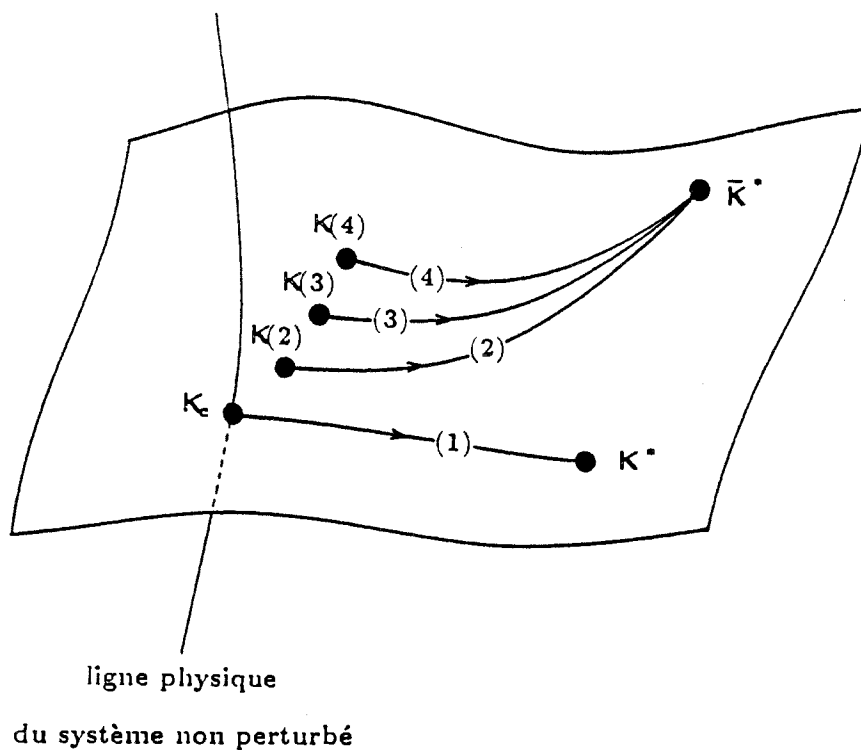


Figure 2.3b

Renormalisation d'un système perturbé localement par un défaut pertinent.

- Si $y_{\delta g} = 0$, la perturbation est marginale. Elle conduit le système vers une ligne de points fixes et les nouveaux exposants dépendent de la valeur initiale de la perturbation. Le point représentatif du système perturbé reste sur la surface critique (Figure 2.3c).

Cette dernière situation est illustrée par le cas d'un défaut linéaire en

(*) La perturbation ne détruisant pas la criticalité du volume, le système est toujours caractérisé par une longueur de corrélation infinie et est représenté par un point de la surface critique.

volume dans le modèle d'Ising à $2d$. Les couplages modifiés $K_1 = K + \Delta K$ sur la ligne ($\bar{d} = 1$) constituent une perturbation thermique au comportement de volume ($y_t = 1$). La dimension associée au défaut est donc $y_{\Delta K} = 0$.

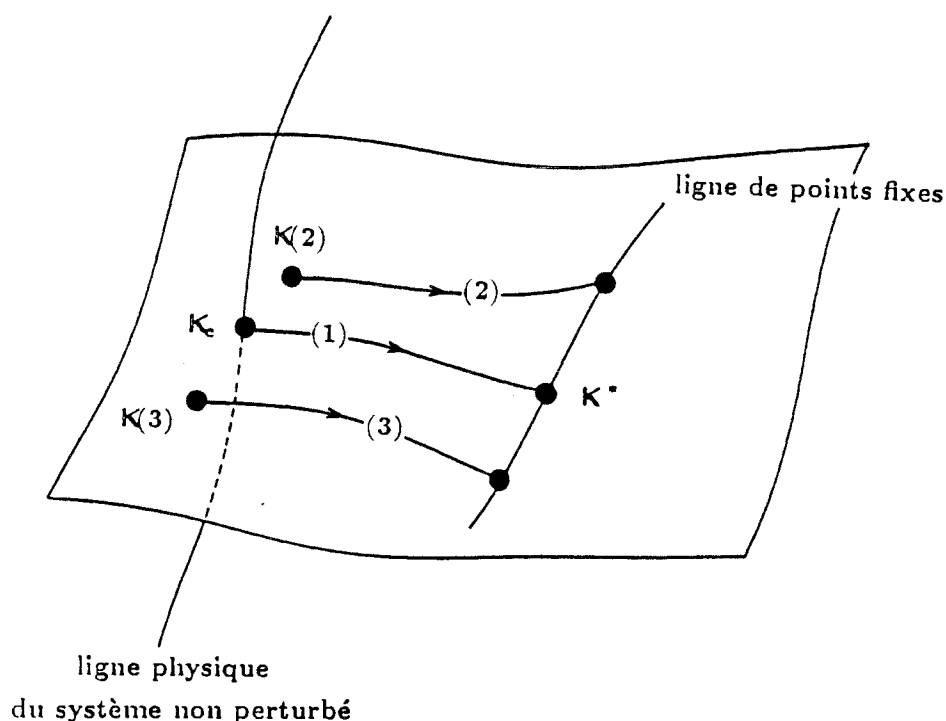


Figure 2.3c

Renormalisation d'un système perturbé localement par un défaut marginal.

4. Etude des surfaces et interfaces dans le modèle d'Ising bidimensionnel

4.1 Motivations

L'objection majeure à l'hypothèse de validité de l'invariance conforme dans le cas de systèmes perturbés réside dans la perte de certaines propriétés d'invariance consécutive à la présence d'un défaut.

Cardy (1984a) a néanmoins établi que l'invariance conforme pouvait être appliquée aux systèmes critiques semi-infinis pour lesquels la symétrie de translation est brisée. L'idée que certains résultats issus de l'invariance conforme soient préservés

pour d'autres systèmes perturbés semble alors naturelle. Des modifications peuvent s'avérer nécessaires pour adapter l'invariance conforme à un système perturbé ; c'est d'ailleurs le cas pour un système critique avec surface libre où l'algèbre conforme est constituée d'une seule algèbre de Virasoro.

Turban (1985a) a suggéré l'application de l'invariance conforme au cas du modèle d'Ising bidimensionnel avec un défaut linéaire. Ce type de perturbation correspond, comme on l'a vu, à un opérateur marginal et conduit à un exposant magnétique qui varie continûment avec la valeur du couplage sur le défaut (BARIÉV 1979, MC COY et PERK 1980). Le système infini avec une ligne de défauts est projeté par la transformation conforme

$$f(z) = \frac{L}{2\pi} \ln z \quad (2.16)$$

sur un ruban avec conditions périodiques présentant deux défauts linéaires équidistants. La relation gap-exposant (1.85) a été vérifiée numériquement sur le ruban bidimensionnel (TURBAN 1985a) puis, dans la limite hamiltonienne, sur le modèle quantique à une dimension (GUIMARAËS et DRUGOWICH DE FELICIO 1986). Le spectre complet a ensuite été étudié (HENKEL 1987b, HENKEL et PATKÓS 1987a) ainsi que l'algèbre conforme correspondante (HENKEL et PATKÓS 1987b). Le modèle a été généralisé sur la chaîne quantique au cas de plusieurs défauts équidistants, ce qui correspond dans le plan à des défauts linéaires en étoile (HENKEL et PATKÓS 1988, HENKEL, PATKÓS et SCHLOTTMANN 1989, BAAKE, CHASELON et SCHLOTTMANN 1989, IRVING, ÓDOR et PATKÓS 1989).

Ces travaux confirment la validité de l'invariance conforme, parfois sous certaines conditions telle que la commensurabilité des défauts. Aussi nous a-t-il semblé intéressant d'en envisager l'application à des perturbations non pertinentes et pertinentes.

4.2 Perturbations de surface dans le modèle d'Ising bidimensionnel

4.2.1 Spectre d'excitation, énergie et aimantation de surface

Le système que l'on se propose d'étudier consiste en un modèle d'Ising

bidimensionnel semi-infini dont les couplages sont modifiés en surface, les couplages de volume étant fixés à leur valeur critique.

Afin d'en étudier les propriétés par les méthodes de l'invariance conforme, on projette le demi-plan sur un ruban avec conditions de bords libres par la transformation

$$f(z) = \frac{L}{\pi} \ln z \quad (2.17)$$

La perturbation de surface ($\vartheta = 0$ et $\vartheta = \pi$) sur le système semi-infini correspond ainsi à une perturbation sur les deux bords du ruban (Figure 2.4).

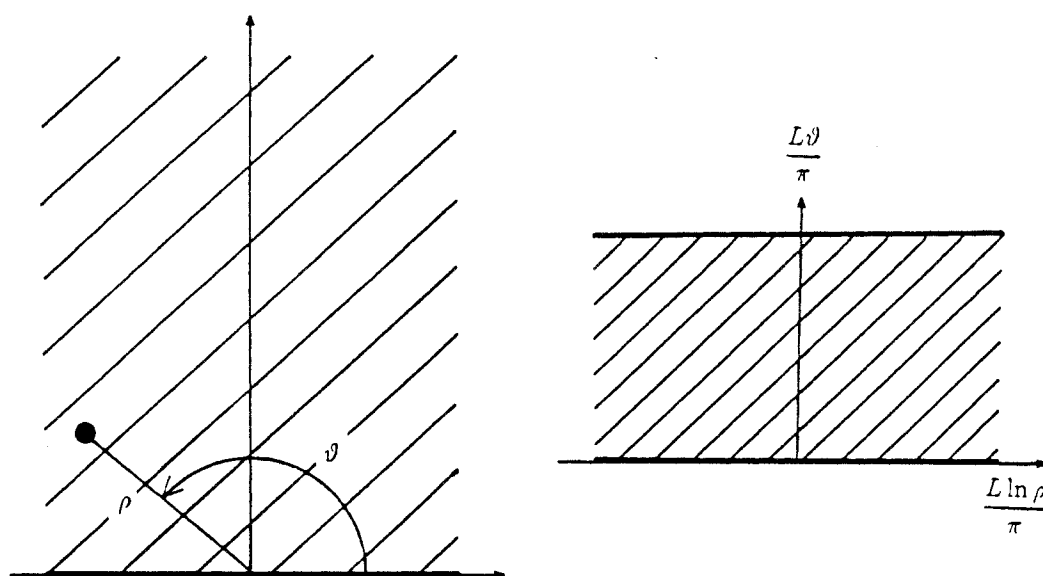


Figure 2.4

Projection sur un ruban d'un système semi-infini perturbé en surface.

Les propriétés locales en surface sur le ruban redonnent celles du système semi-infini dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, ce qui autorise une étude par effets de taille finie sur le ruban. Notons que le défaut, homogène sur les bords du ruban, correspond dans le demi-plan à un défaut inhomogène sur la surface libre. Dans la version quantique du système, le ruban perturbé est modélisé par une chaîne d'Ising en champ transverse avec des défauts sur les sites 1 et L (BERCHE et TURBAN

1989 et 1990a) (Figure 2.5). L'hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \left(\sum_{\ell=2}^{L-1} \sigma_z(\ell) + \sum_{\ell=2}^{L-2} \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) + h_s (\sigma_z(1) + \sigma_z(L)) \right. \\ \left. + J_s (\sigma_x(1) \sigma_x(2) + \sigma_x(L-1) \sigma_x(L)) \right) \quad (2.18)$$

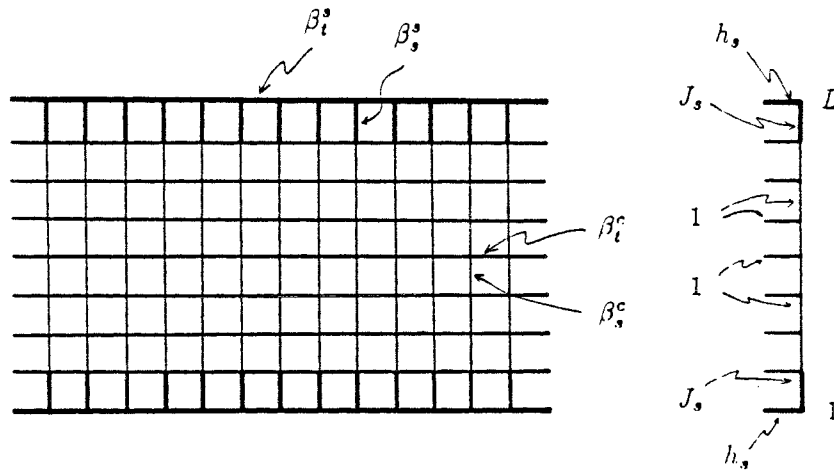


Figure 2.5

Ruban perturbé en surface dans la limite hamiltonienne.

Par transformation de Jordan-Wigner, l'hamiltonien (2.18) s'écrit sous forme quadratique. Il est diagonalisé en adoptant la démarche du paragraphe 5 du chapitre 1 :

$$\mathcal{H} = E_0 + \sum_k \Lambda_k \eta_k^+ \eta_k \quad (2.19)$$

où les excitations Λ_k , solutions de l'équation aux valeurs propres

$$\Lambda_\phi \Phi_k = \Lambda_k^2 \Phi_k \quad (2.20)$$

sont cherchées sous la forme

$$\Lambda_k = \frac{a_k}{L} \left(1 + \frac{b_k}{L} \right) + O(L^{-3}) \quad (2.21)$$

Les détails de calcul sont présentés dans l'annexe A.

Les résultats obtenus sont quantitativement différents dans les cas $h_s/J_s \neq 0$ et $h_s/J_s = 0$.

- Si h_s/J_s est non nul, on arrive à l'équation suivante :

$$\left(\frac{h_s}{J_s}\right)^3 \cos a_k + \left[\left(\frac{3}{2} - b_k\right)\left(\frac{h_s}{J_s}\right)^3 - 2\left(\frac{h_s}{J_s}\right)\right] \frac{a_k}{L} \sin a_k = O(L^{-2}) \quad (2.22)$$

dont le terme dominant impose la condition :

$$\cos a_k = 0 \quad \text{soit} \quad a_k = (2k+1)\frac{\pi}{2}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.23)$$

alors que le terme suivant détermine la correction au *scaling* :

$$b_k = \frac{3}{2} - 2\left(\frac{J_s}{h_s}\right)^2 \quad (2.24)$$

Les excitations les plus basses sont alors de la forme :

$$\Lambda_k = \frac{(2k+1)\pi}{2L} + \left[\frac{3}{4} - \left(\frac{J_s}{h_s}\right)^2\right] (2k+1) \frac{\pi}{L^2} + O(L^{-3}) \quad (2.25)$$

Dans l'expression (2.25), on reconnaît à l'ordre L^{-1} les excitations du modèle non perturbé.

Les vecteurs propres Φ_k et Ψ_k peuvent ensuite être déterminés. On obtient :

$$\phi_k(1) = \sqrt{2}\left(\frac{J_s}{h_s}\right) L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) \quad (2.26a)$$

$$\psi_k(1) = -\frac{(2k+1)\pi J_s}{\sqrt{2}h_s^2} L^{-3/2} + O(L^{-5/2}) \quad (2.26b)$$

d'où l'on déduit l'énergie et l'aimantation de surface.

Rappelons que ces quantités sont définies à partir des premiers états excités :

$$e_s^z(1) = \langle 0 | \sigma_z(1) | \varepsilon \rangle \sim L^{-x_\varepsilon^z} \quad (2.27a)$$

$$m_s(1) = \langle 0 | \sigma_x(1) | \sigma \rangle \sim L^{-x_m^s} \quad (2.27b)$$

où

$$| \varepsilon \rangle = \eta_0^+ \eta_1^+ | 0 \rangle \quad (2.28a)$$

$$| \sigma \rangle = \eta_0^+ | 0 \rangle \quad (2.28b)$$

et s'expriment par :

$$e_s^z(1) = \phi_1(1)\psi_0(1) - \phi_0(1)\psi_1(1) \quad (2.29a)$$

$$m_s(1) = \phi_0(1) \quad (2.29b)$$

soit

$$e_s^z(1) = \frac{2\pi}{h_s} \left(\frac{J_s}{h_s} \right)^2 L^{-2} + O(L^{-3}) \quad (2.30a)$$

$$m_s(1) = \sqrt{2} \left(\frac{J_s}{h_s} \right) L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) \quad (2.30b)$$

On en déduit les valeurs des exposants de surface du modèle perturbé dans le cas $h_s/J_s \neq 0$:

$$x_e^s = 2 \quad (2.31a)$$

$$x_m^s = 1/2 \quad (2.31b)$$

que l'on reconnaît comme étant celles de la transition ordinaire pour le modèle d'Ising (2.9). Ces valeurs ont été confirmées numériquement sur des chaînes atteignant 2000 spins.

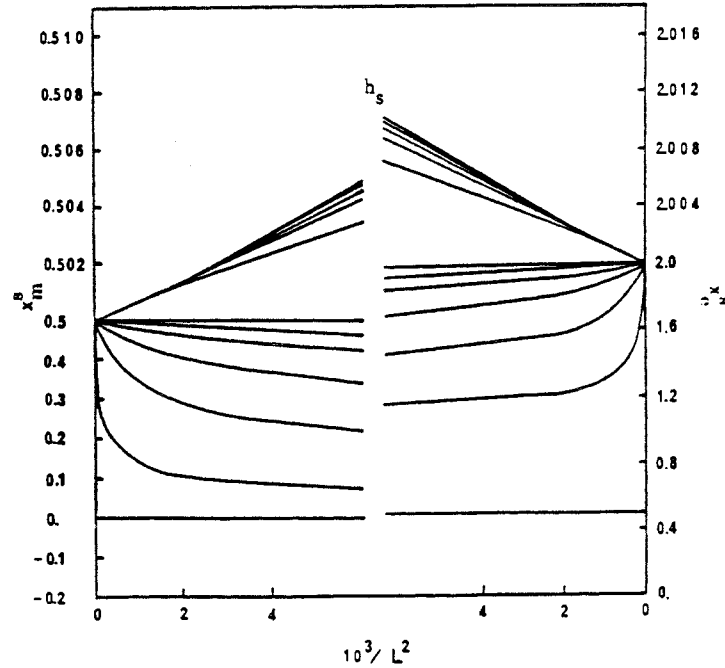


Figure 2.6a

Exposants magnétique et thermique du modèle d'Ising 2d perturbé par un champ transverse de surface (effets de taille finie).

La figure (2.6a) présente les exposants magnétique (x_m^*) et thermique (x_e^*) de surface obtenus par effets de taille finie sur des chaînes d'Ising en champ transverse de tailles $L = 30$ à 2000 spins perturbées par un champ transverse de surface $h_s = 5, 4, 3, 2, 1, 0.75, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1, 1 \times 10^{-5}$ de haut en bas sur les courbes. La méthode utilisée ne permet pas de traiter le cas $h_s = 0$ mais des résultats identiques sont obtenus avec $h_s = 1 \times 10^{-5}$ pour les tailles étudiées.

La figure (2.6b) présente les mêmes exposants pour des perturbations de liaison $J_s = 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 1, 1.5, 2, 3, 4, 5, 6$ de haut en bas sur les courbes.

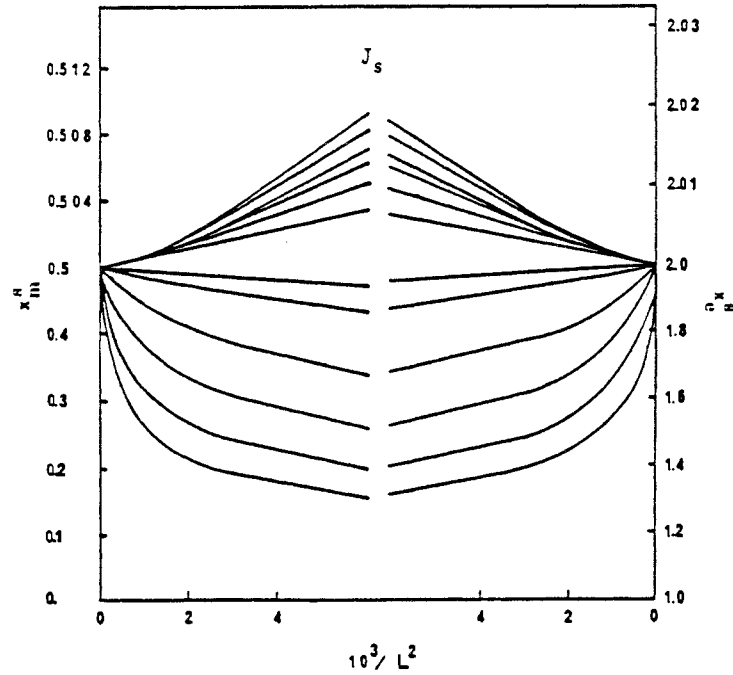


Figure 2.6b

Exposants magnétique et thermique du modèle d'Ising 2d perturbé par un couplage longitudinal de surface (effets de taille finie).

La connaissance des excitations (2.25) permet d'appliquer les méthodes de l'invariance conforme. En premier lieu, la relation gap-exposant confirme les valeurs des exposants critiques :

$$E_\epsilon - E_0 = \Lambda_0 + \Lambda_1 = \frac{\pi}{L} \times 2 + O(L^{-2}) \quad (2.32a)$$

$$E_\sigma - E_0 = \Lambda_0 = \frac{\pi}{L} \times \frac{1}{2} + O(L^{-2}) \quad (2.32b)$$

vérifiées numériquement pour les mêmes perturbations h_s, J_s .

La figure (2.7a) montre les exposants magnétique (x_m^s) et thermique (x_ε^s) de surface déduits de l'amplitude des gaps $E_\sigma - E_0$ et $E_\varepsilon - E_0$ pour des chaînes d'Ising de $L = 10$ à 2000 spins, avec des perturbations de champs transverses en surface $h_s = 5, 4, 3, 2, 1, 0.75, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1, 0$. Dans le cas où $h_s = 0$, les valeurs sont obtenues sur une chaîne non perturbée de $L - 1$ spins par l'intermédiaire d'une transformation de dualité (cf 4.2.2).

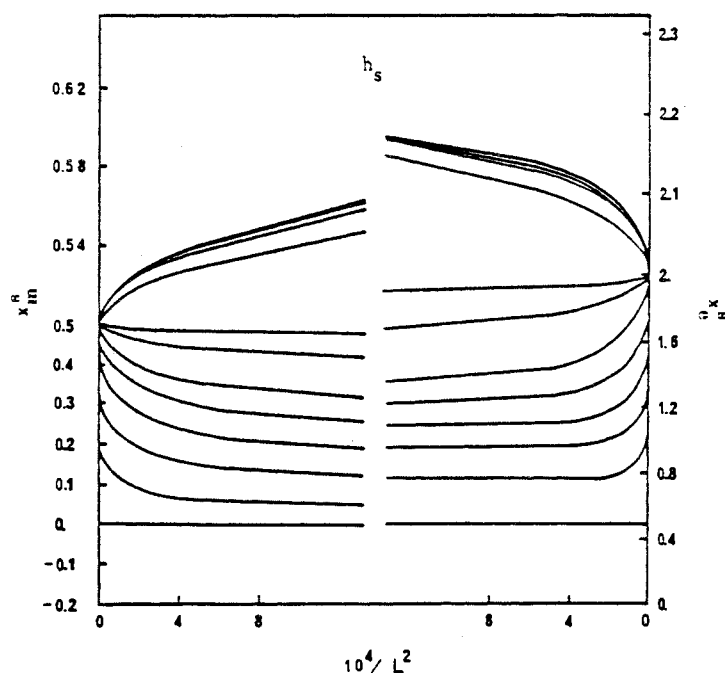


Figure 2.7a

Exposants magnétique et thermique du modèle d'Ising 2d perturbé par un champ transverse de surface (invariance conforme).

Sur la figure (2.7b) sont tracés les exposants magnétique et thermique de surface, x_m^s et x_ε^s , pour des perturbations de liaison $J_s = 0.7, 0.8, 0.9, 0.95, 1, 1.5, 2, 3, 4, 5, 6$ de haut en bas sur les courbes.

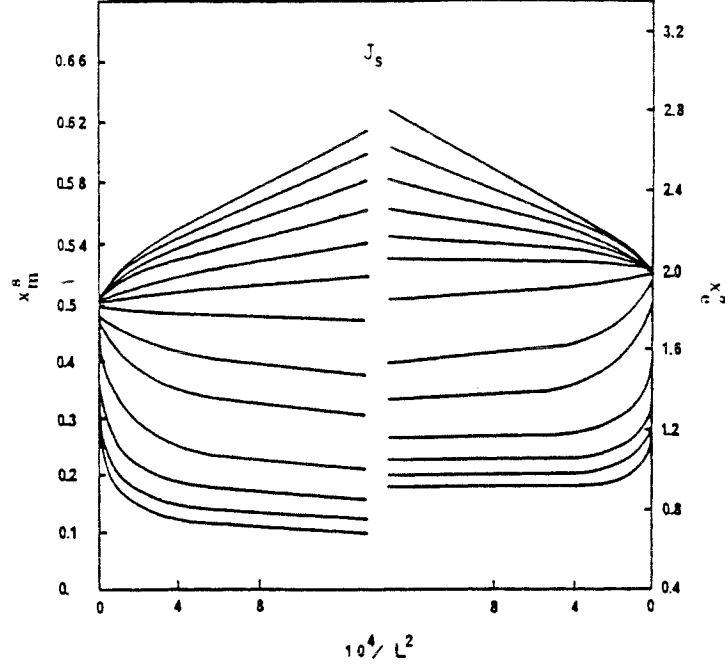


Figure 2.7b

*Exposants magnétique et thermique du modèle d'Ising 2d
perturbé par un couplage longitudinal de surface (invariance conforme).*

De plus, les spectres présentent des niveaux équidistants caractéristiques de l'invariance conforme. En effet, les secteurs pair et impair de l'hamiltonien étant respectivement obtenus en ajoutant à l'état fondamental E_0 des nombres pairs et impairs d'excitations, on a :

- secteur pair :

$$E_N^{(0)} - E_0 = \frac{\pi}{L}(0 + N) + O(L^{-2}) \quad N = 2, 3, 4, \dots \quad (2.33)$$

- secteur impair :

$$E_N^{(1)} - E_0 = \frac{\pi}{L}\left(\frac{1}{2} + N\right) + O(L^{-2}) \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (2.34)$$

L'existence de ces tours conformes est illustrée numériquement dans le cas d'une chaîne de 50 spins (Figure 2.8). Le spectre présente les tours conformes des secteurs pair et impair caractéristiques de la transition de surface ordinaire ($J_s = 1$,

$h_s = 2$ et 0.5). Les dégénérescences des niveaux sont indiquées entre parenthèses. On remarque un décalage dû à la correction d'ordre $O(L^{-2})$ dans (2.25).

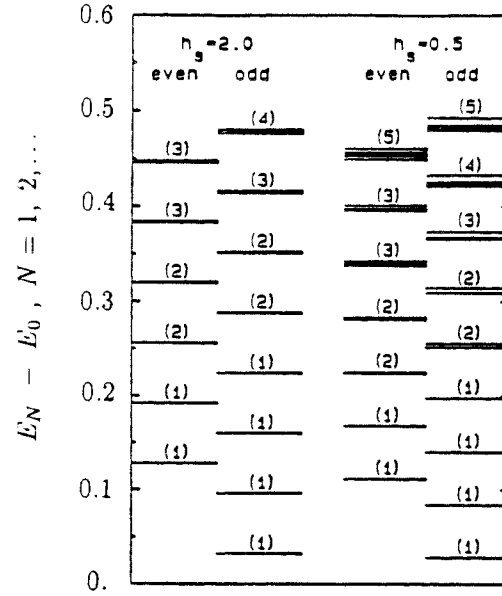


Figure 2.8

Spectre obtenu numériquement pour une chaîne de $L = 50$ spins ($h_s/J_s \neq 0$).

On peut reconnaître dans les dégénérescences indiquées sur la figure (2.8) les séries $d(h_\phi, N)$ des représentations irréductibles des champs primaires de la théorie minimale de charge centrale $c = 1/2$ (Tableau 1.3). La tour conforme du secteur pair (respectivement impair) coïncide avec celle de l'opérateur (0) (respectivement $(\frac{1}{2})$).

• Si h_s/J_s est nul en revanche, la matrice Λ_ϕ se réduit à une matrice de dimension $(L-1) \times (L-1)$. La première excitation est nulle :

$$\Lambda_0 = 0 \quad (2.35)$$

et les autres excitations, de la forme (2.21), s'obtiennent à partir de

$$-J_s^2 \cos a_k = O(L^{-1}) \quad (2.36)$$

d'où l'on déduit à l'ordre dominant :

$$\Lambda_k = \frac{(2k-1)\pi}{2L} + O(L^{-2}) \quad , \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.37)$$

Les vecteurs propres sont cette fois de la forme :

$$\phi_0(\ell) = \delta_{\ell,1} \quad (2.38a)$$

$$\psi_0(\ell) = \delta_{\ell,L} \quad (2.38b)$$

puis, pour les excitations suivantes :

$$\phi_k(1) = \delta_{k,0} \quad (2.39a)$$

$$\phi_k(2) = \frac{(2k-1)\pi}{\sqrt{2}J_s^2} L^{-3/2} + O(L^{-5/2}) \quad (2.39b)$$

$$\psi_k(1) = -\frac{\sqrt{2}}{J_s} L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) \quad (2.39c)$$

Les propriétés de surface s'en déduisent :

$$e_s^z(1) = \frac{\sqrt{2}}{J_s} L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) \quad (2.40a)$$

$$m_s(1) = 1 \quad (2.40b)$$

d'où

$$x_e^s = 1/2 \quad (2.41a)$$

$$x_m^s = 0 \quad (2.41b)$$

Les valeurs sont confirmées numériquement sur la figure (2.6a).

La valeur nulle de l'exposant magnétique caractérise une transition du premier ordre en surface (discontinuité de l'aimantation). Dans la version classique du modèle, $h_s = 0$ correspond à un couplage infini dans la direction temporelle qui fige les spins de surface dans une même orientation. Le comportement obtenu à partir des propriétés locales sur le premier site est particulier. En revanche, les exposants calculés en étudiant le second site sont ceux de la transition extraordinaire :

$$e_s^{xx}(1,2) = \langle 0 | \sigma_x(1) \sigma_x(2) | \varepsilon' \rangle \sim L^{-x_e^{xx}} \quad (2.42a)$$

$$m_s(2) = \langle 0 | \sigma_x(2) | \sigma' \rangle \sim L^{-x_m^{xx}} \quad (2.42b)$$

où, pour obtenir une contribution non nulle, il faut choisir :

$$| \varepsilon' \rangle = \eta_1^+ \eta_2^+ | 0 \rangle \quad (2.43a)$$

$$| \sigma' \rangle = \eta_0^+ \eta_1^+ \eta_2^+ | 0 \rangle \quad (2.43b)$$

de sorte que les expressions (2.42) s'écrivent :

$$e_s^{xx}(1,2) = \phi_2(2)\psi_1(1) - \phi_1(2)\psi_2(1) = -\frac{2\pi}{J_s^3}L^{-2} + O(L^{-3}) \quad (2.44a)$$

$$m_s(2) = 2\phi_1(2)\phi_2(2)\left(\frac{1}{\Lambda_2} - \frac{1}{\Lambda_1}\right) = -\frac{2\pi}{J_s^4}L^{-2} + O(L^{-3}) \quad (2.44b)$$

et sont en accord avec (BURKHARDT et CARDY 1987) :

$$x_e^{ext} = x_m^{ext} = 2 \quad (2.45)$$

Les exposants (2.41) et (2.45) sont confirmés par l'utilisation de la relation gap-exposant :

$$E_e - E_0 = \Lambda_0 + \Lambda_1 = \frac{\pi}{L} \times \frac{1}{2} + O(L^{-2}) \quad (2.46a)$$

$$E_\sigma - E_0 = \Lambda_0 = 0 \quad (2.46b)$$

$$E_{e'} - E_0 = \Lambda_1 + \Lambda_2 = \frac{\pi}{L} \times 2 + O(L^{-2}) \quad (2.46c)$$

$$E_{\sigma'} - E_0 = \Lambda_0 + \Lambda_1 + \Lambda_2 = \frac{\pi}{L} \times 2 + O(L^{-2}) \quad (2.46d)$$

et, comme dans le cas précédent, le spectre présente des tours conformes.

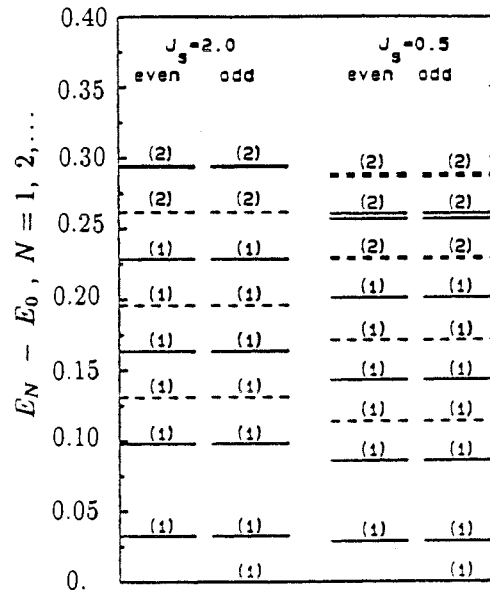


Figure 2.9

Spectre obtenu numériquement pour une chaîne de $L = 50$ spins ($h_s = 0$).

La figure (2.9) met en évidence les tours conformes des secteurs pair et impair caractéristiques de la transition de surface extraordinaire ($h_s = 0$, $J_s = 2$ et 0.5). Les dégénérescences des niveaux sont indiquées entre parenthèses. Cette fois cependant, les deux opérateurs primaires (0) et ($\frac{1}{2}$) sont présents simultanément dans chaque secteur de parité. La tour conforme caractérisant la transition extraordinaire provient de l'opérateur (0) et correspond à la série 1011... (traits pointillés sur la figure). Les niveaux restants (traits pleins) appartiennent à la tour conforme de l'opérateur ($\frac{1}{2}$), série 1111... (CARDY 1986c). On a donc dans chaque secteur les deux tours conformes :

$$E_N - E_0 = \frac{\pi}{L}(0 + N) \quad , \quad N = 2, 3, 4, \dots \quad (2.47a)$$

$$E_N - E_0 = \frac{\pi}{L}(\frac{1}{2} + N) \quad , \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (2.47b)$$

4.2.2 Transformation de dualité et transition extraordinaire

Dans le cas $h_s = 0$, la transformation de dualité permet de comprendre les résultats obtenus. Introduisons les opérateurs duaux

$$\mu_z(\ell) = \sigma_x(\ell)\sigma_x(\ell+1) \quad 1 \leq \ell < L \quad (2.48a)$$

$$\mu_z(L) = \sigma_x(L) \quad (2.48b)$$

$$\mu_x(\ell) = \prod_{j=1}^{\ell} \sigma_z(j) \quad 1 \leq \ell \leq L \quad (2.48c)$$

obéissant à l'algèbre de Pauli :

$$\left(\mu_x(\ell)\right)^2 = \left(\mu_z(\ell)\right)^2 = \mathbb{1} \quad (2.49a)$$

$$\mu_z(k)\mu_x(\ell) = \mu_x(\ell)\mu_z(k) \quad , \quad k \neq \ell \quad (2.49b)$$

$$\mu_z(k)\mu_x(k) = -\mu_x(k)\mu_z(k) \quad (2.49c)$$

L'hamiltonien (2.18) devient avec $h_s = 0$:

$$\mathcal{H}_D = -\frac{1}{2} \left(\sum_{\ell=2}^{L-1} \mu_x(\ell-1)\mu_x(\ell) + \sum_{\ell=2}^{L-2} \mu_z(\ell) + J_s \left(\mu_z(1) + \mu_z(L-1) \right) \right) \quad (2.50)$$

c'est-à-dire l'hamiltonien d'une chaîne constituée de $L-1$ spins avec conditions de bords libres et d'un spin libre $\mu(L)$ dans un champ transverse unité. La correspondance est schématisée sur la figure (2.10).

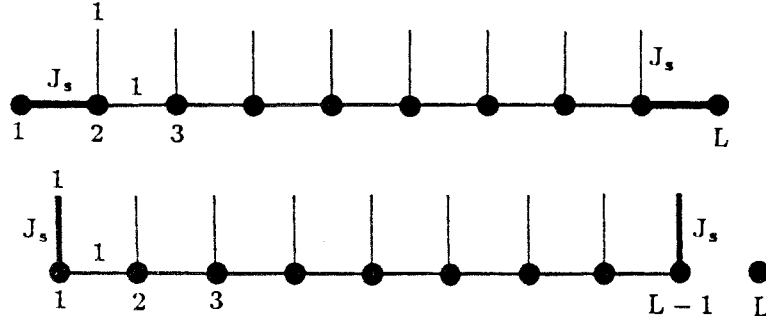


Figure 2.10

Illustration de la transformation de dualité.

Les transitions ordinaire et extraordinaire sont reliées par dualité (CARDY 1986c, BURKHARDT 1985). Ainsi, tant que J_s reste fini et non nul, le comportement de la chaîne duale est celui de la transition ordinaire, c'est-à-dire :

$$\langle \mu_x(1) \rangle = \langle \mu_x(L-1) \rangle \sim L^{-1/2} \quad (2.51a)$$

$$\langle \mu_z(1) \rangle = \langle \mu_z(L-1) \rangle \sim L^{-2} \quad (2.51b)$$

$$\langle \mu_x(1)\mu_x(2) \rangle = \langle \mu_x(L-2)\mu_x(L-1) \rangle \sim L^{-2} \quad (2.51c)$$

L'égalité $\sigma_z(1) = \mu_x(1)$ explique ainsi la valeur $1/2$ obtenue pour l'exposant x_e^s sur le premier site. De même, les opérateurs $\sigma_x(1)\sigma_x(2)$ et $\sigma_z(2)$ se transforment par dualité en $\mu_z(1)$ et $\mu_x(1)\mu_x(2)$, ce qui conduit bien à l'exposant $x_e^{ext} = 2$ de l'énergie pour la transition extraordinaire.

Les exposants magnétiques se déduisent d'arguments du même type : $\sigma_x(1)$ se transforme en l'opérateur de charge dual

$$Q_D = \prod_{\ell=1}^L \mu_z(\ell) \quad (2.52)$$

qui est indépendant de L , d'où la valeur nulle de l'exposant x_m^s . L'aimantation en second site $\sigma_x(L-1)$ devient $\mu_z(L-1)\mu_z(L)$ où $\mu_z(L)$ (le dual de $\sigma_x(L)$) est de dimension nulle et conduit bien à $x_m^{ext} = 2$.

La dualité provoque le découplage du dernier spin. A chaque configuration de la chaîne, il correspond donc à ce dernier deux orientations possibles, ce qui est à l'origine de la dégénérescence systématique des états propres de $\mathcal{H}$. Il en résulte l'existence d'une excitation nulle $\Lambda_0 = 0$ comme l'a montré le calcul.

4.3 Interface "critique-non critique" dans le modèle d'Ising bidimensionnel

4.3.1 Spectre d'excitation, énergie et aimantation à l'interface

L'invariance conforme peut être préservée, comme on l'a vu, dans le cas de systèmes critiques perturbés par la présence de défauts localisés. On n'a que peu d'information, en revanche, en ce qui concerne les perturbations étendues. C'est pourquoi l'on se propose d'étudier, dans le modèle d'Ising, l'interface entre un demi-espace au point critique et un demi-espace à $T \neq T_c$, constituant une perturbation de volume pour le système de départ, mais qui se ramène en fin de compte à une perturbation de surface pour la partie critique (*).

Par la transformation conforme

$$f(z) = \frac{L}{2\pi} \ln z \quad (2.53)$$

on obtient un ruban de largeur L avec conditions périodiques – dont une moitié dans la largeur est à $T \neq T_c$ – et présentant deux interfaces (Figure 2.11).

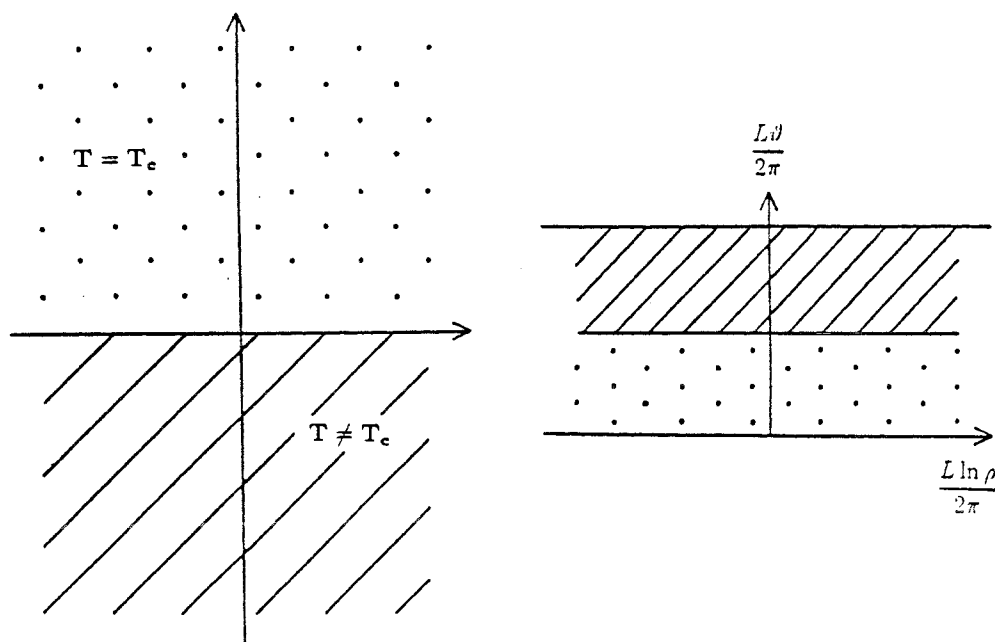


Figure 2.11

Projection sur ruban d'un système infini présentant un demi-espace perturbé.

(*) Ce type de système a été étudié par la théorie de Landau dans le cadre des transitions de mouillage (IGLÓI et INDEKEU 1990).

Le spectre est étudié sur le ruban et les effets de taille finie sont réalisés sur les propriétés locales calculées à l'interface. Dans la version quantique, l'hamiltonien est perturbé de façon uniforme sur la seconde partie de la chaîne (BERCHE et TURBAN 1990b), ce qui correspond à un système initial présentant un demi-plan au point critique et dans l'autre demi-plan un écart à la température critique inhomogène :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^M \left[\sigma_z(\ell) + \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) \right] - \frac{1}{2} \sum_{\ell=M+1}^L \left[h \sigma_z(\ell) + J \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) \right] \quad (2.54)$$

Les conditions aux limites sont périodiques :

$$\sigma_x(L+1) = \sigma_x(1) \quad (2.55)$$

et on se restreint, sans pour autant perdre en généralité, au cas de chaînes de longueur L paire.

Dans le cas $M = L/2$, l'interface séparant les deux domaines est linéaire (la correspondance classique $\longleftrightarrow$ quantique est représentée sur la figure 2.12), mais le modèle est simplement généralisé dans la limite continue à des interfaces présentant un angle $\vartheta = 2\pi M/L$ quelconque (Figure 2.13).

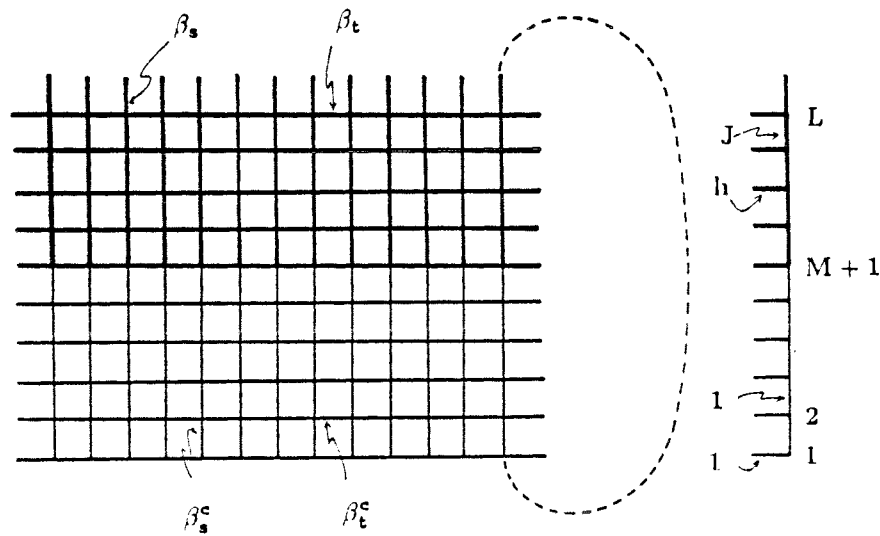


Figure 2.12

Correspondance classique $\longleftrightarrow$ quantique dans le cas $M = L/2$.

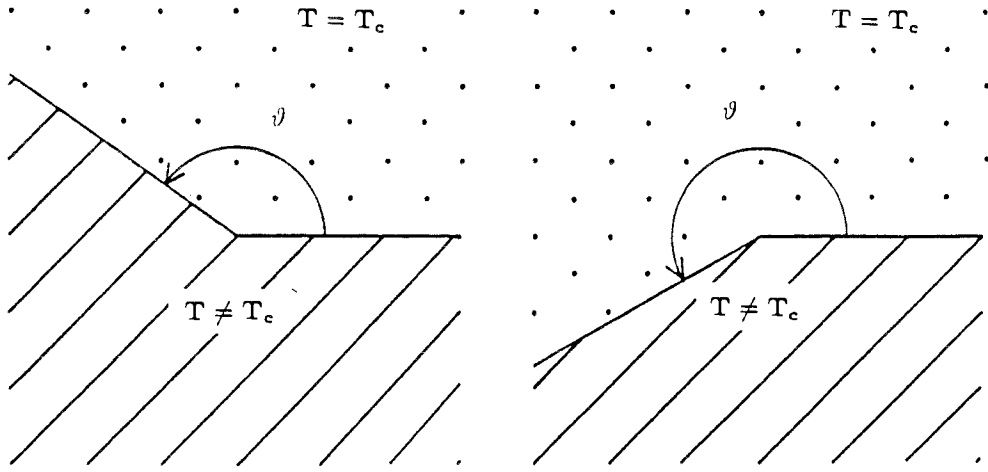


Figure 2.13

Interfaces non linéaires.

La transformation (2.53) fait correspondre la coordonnée angulaire dans le plan à la coordonnée spatiale transversale du ruban. Il faut néanmoins noter que, dans le cas de l'interface non linéaire ($\vartheta \neq \pi$), l'étude des propriétés critiques ne peut être effectuée que par invariance conforme. Le calcul des quantités locales à l'interface redonne en effet dans la limite $L \rightarrow \infty$ le comportement d'une interface linéaire.

Les conditions aux limites étant périodiques, l'hamiltonien (2.54) après transformation de Jordan-Wigner n'est pas une forme quadratique. Aussi procède-t-on comme dans le cas du modèle périodique homogène en introduisant l'opérateur modifié :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}(q) = & -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^M \left[\sigma_z(\ell) + \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) \right] - \frac{1}{2} \sum_{\ell=M+1}^{L-1} \left[h \sigma_z(\ell) + J \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) \right] \\ & + h \sigma_z(L) + (-1)^q J \sigma_x(L) \sigma_x(1) \end{aligned} \quad (2.56)$$

qui permet de définir les hamiltoniens $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ relatifs à chaque secteur de parité qui, eux, sont diagonalisables :

$$\tilde{\mathcal{H}}(q) = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}(q) \left(\eta_{\alpha}^+ \eta_{\alpha} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.57)$$

L'équation aux valeurs propres qui détermine les excitations $\Lambda_{\alpha}(q)$ se met sous la

forme (cf Annexe B pour le détail des calculs) :

$$h(\ell-1)J(\ell-1)\phi_\alpha(\ell-1) + \left[\Lambda_\alpha^2(q) - h^2(\ell) - J^2(\ell-1) \right] \phi_\alpha(\ell) + h(\ell)J(\ell)\phi_\alpha(\ell+1) = 0 \quad (2.58)$$

où

$$\begin{aligned} h(\ell) &= J(\ell) = 1 & 1 &\leq \ell \leq M \\ h(\ell) &= h & M+1 &\leq \ell \leq L \\ J(\ell) &= J & M+1 &\leq \ell \leq L-1 \\ J(L) &= -(-1)^q J & \ell &= L \end{aligned} \quad (2.59)$$

ce qui conduit aux solutions, notées $\phi_{1\alpha}(\ell)$, dans le demi-espace critique ($2 \leq \ell \leq M$) de la forme :

$$\phi_{1\alpha}(\ell) = Ae^{ik\ell} + Be^{-ik\ell} \quad (2.60)$$

associées aux excitations

$$\Lambda_\alpha^2(q) = 4 \sin^2 \frac{k}{2} \quad (2.61)$$

alors que dans le demi-espace non critique ($M+2 \leq \ell \leq L-1$), les solutions, notées $\phi_{2\alpha}(\ell)$, s'écrivent :

$$\phi_{2\alpha}(\ell) = Ce^{K\ell} + De^{-K\ell} \quad (2.62)$$

avec

$$\cosh K = \frac{h^2 + J^2 - \Lambda_\alpha^2(q)}{2hJ} \quad (2.63)$$

La condition de quantification de k est imposée par les conditions aux limites qui fournissent un système d'équations linéaires pour les coefficients A , B , C et D . L'annulation du déterminant 4×4 conduit à l'ordre dominant en puissances de L^{-1} à l'expression

$$k \cos kM \sinh KM \left(|h^2 - J^2| + O(L^{-2}) \right) = 0 \quad (2.64)$$

On obtient ainsi, lorsque $h \neq J$ (le demi-espace h , J n'est pas au point critique) :

$$\cos kM = 0 \quad \text{soit} \quad |\Lambda_\alpha(q)| = \frac{(2\alpha+1)\pi}{2M} + O(L^{-2}) \quad , \quad \alpha = 0, 1, \dots \quad (2.65)$$

que l'on peut encore écrire en fonction de ϑ :

$$|\Lambda_\alpha(q)| = \frac{2\pi}{L} \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{\vartheta} + O(L^{-2}) \quad , \quad \alpha = 0, 1, \dots \quad (2.66)$$

Dans le cas de l'interface linéaire à laquelle on se limite dans un premier temps, (2.66) s'écrit :

$$|\Lambda_\alpha(q)| = \frac{2\pi}{L} \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) + O(L^{-2}) \quad , \quad \alpha = 0, 1, \dots \quad (2.67)$$

A l'ordre L^{-1} , les excitations obtenues dans les deux secteurs de parité $q = 0$ et $q = 1$ sont identiques.

Les exposants de l'interface se déduisent du comportement des propriétés locales à l'interface (*) :

$$e^z(1) = \langle 0 | \sigma_z(1) | \varepsilon \rangle \sim L^{-x_e^i} \quad (2.68a)$$

$$m(1) = \langle 0 | \sigma_x(1) | \sigma \rangle \sim L^{-x_m^i} \quad (2.68b)$$

$$m'(1) = \langle 0 | \sigma_x(1) | \sigma' \rangle \sim L^{-x_m^{i'}} \quad (2.68c)$$

Dans les expressions (2.68), on rappelle que $|\varepsilon\rangle$ (respectivement $|\sigma\rangle$) est le premier état excité pair (respectivement impair) de $\mathcal{H}$. L'état $|\sigma'\rangle$ est le second état excité impair et l'expression (2.68c) permet simplement de déterminer la correction au *scaling* de l'aimantation. Rappelons aussi que, du fait des conditions périodiques, l'aimantation ne peut pas être calculée dans le formalisme fermionique puisque les éléments de matrice (2.68b et c) couplent des états propres appartenant à deux hamiltoniens distincts $\tilde{\mathcal{H}}(0)$ et $\tilde{\mathcal{H}}(1)$. Le calcul numérique a donc été réalisé par la méthode de tridiagonalisation de Lanczos (LANCZOS 1950, ROOMANY, WYLD et HOLLOWAY 1980). On obtient :

$$x_m^i = 1/2 \quad h > J \quad (2.69a)$$

$$x_m^i = 0, \quad x_m^{i'} = 2 \quad h < J \quad (2.69b)$$

L'exposant magnétique x_m^i est obtenu par effets de taille finie pour des chaînes de $L = 4$ à 14 spins (Figure 2.14a). Les perturbations de champs transverses sont rassemblées dans la partie gauche de la figure, celles de liaisons dans la partie droite.

(*) Il faut noter que, sur le ruban, il y a deux interfaces sur les sites 1 et $L/2$.

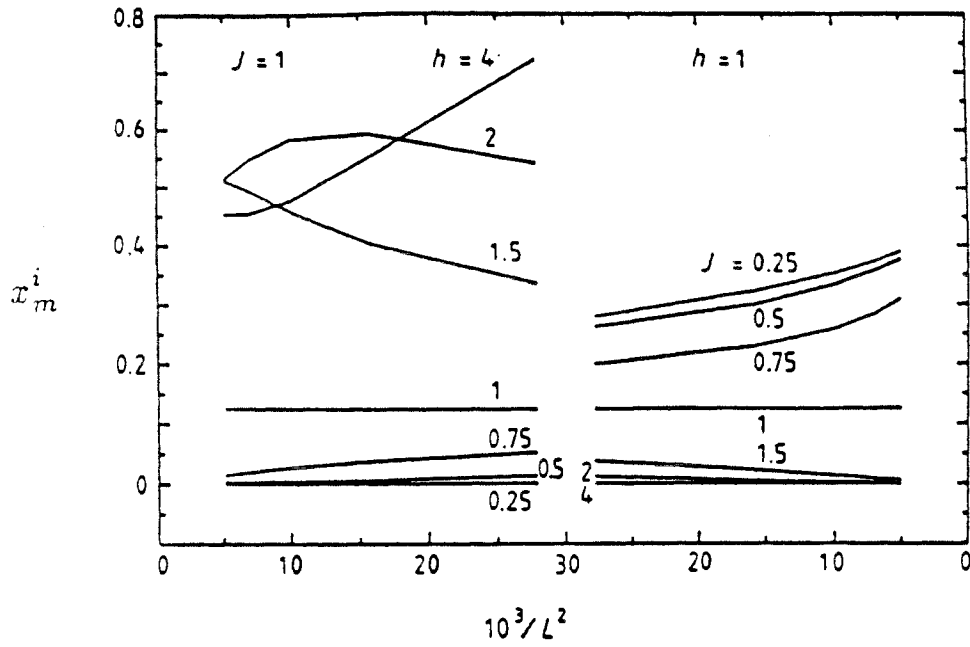


Figure 2.14a

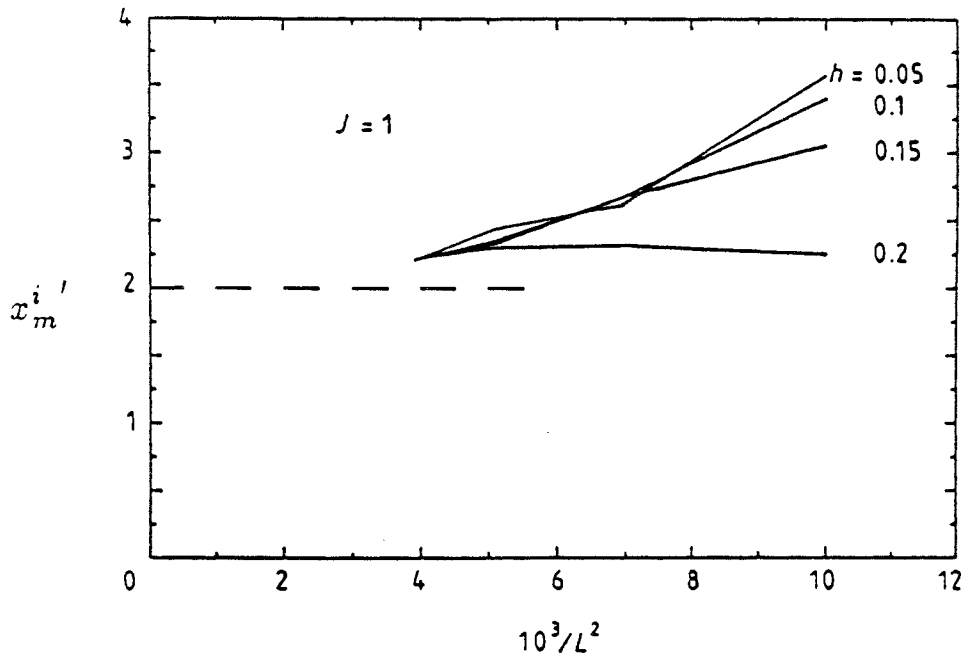


Figure 2.14b

Figure 2.14

Exposants magnétiques de l'interface (effets de taille finie).

L'exposant $x_m^{i'}$ qui gouverne la décroissance des corrélations spin-spin le long de l'interface lorsque le demi-espace non critique est ordonné est présenté sur la figure (2.14b) pour des tailles de $L = 8$ à 16 spins avec des perturbations de champs transverses.

Le calcul exact pour l'énergie d'interface (2.68a) fait intervenir les vecteurs Φ_α et Ψ_α du secteur pair ($\tilde{\mathcal{H}}(0)$), que l'on peut obtenir en utilisant trois des quatre équations fournies par les conditions aux limites (cf Annexe B). On trouve :

$$\phi_\alpha(1) = \begin{cases} 2i(-1)^q L^{-1/2} & + O(L^{-3/2}) & h > J \\ \frac{2i\pi(-1)^q(2\alpha+1)}{J^2 - h^2} L^{-3/2} & + O(L^{-5/2}) & h < J \end{cases} \quad (2.70a)$$

$$\psi_\alpha(1) = \begin{cases} -2i\pi(-1)^q(2\alpha+1)L^{-3/2} & + O(L^{-5/2}) & h > J \\ 2i(-1)^q L^{-1/2} & + O(L^{-3/2}) & h < J \end{cases} \quad (2.70b)$$

d'où

$$e_z(1) = \begin{cases} -8\pi L^{-2} & + O(L^{-3}) & h > J \\ -\frac{8\pi}{J^2 - h^2} L^{-2} & + O(L^{-3}) & h < J \end{cases} \quad (2.71)$$

conduisant à l'exposant thermique

$$x_e^i = 2 \quad h \neq J \quad (2.72)$$

dont la valeur est vérifiée numériquement sur la figure (2.15). L'exposant thermique de l'interface est obtenu par effets de taille finie (formalisme fermionique, tailles $L = 10$ à 180).

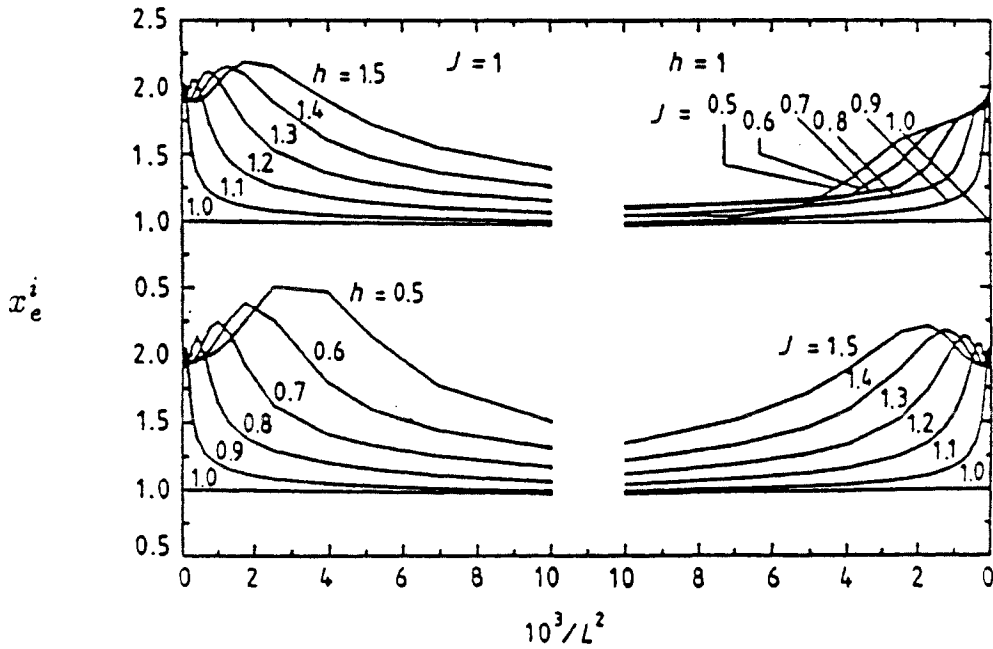


Figure 2.15

Exposant thermique de l'interface (effets de taille finie).

Les exposants (2.69) et (2.72) sont confirmés par l'application de l'invariance conforme. L'énergie $E_0(q)$ de l'état fondamental de $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ s'écrit :

$$E_0(q) = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} |\Lambda_{\alpha}(q)| \quad (2.73)$$

et l'on vérifie numériquement que les valeurs $E_0(0)$ et $E_0(1)$ sont exponentiellement dégénérées :

$$E_0(1) - E_0(0) \sim e^{-L} \quad (2.74)$$

La dégénérescence des niveaux $E_0(0)$ et $E_0(1)$ est mise en évidence par la variation linéaire de $\ln[E_0(1) - E_0(0)]$ avec la taille L pour différentes valeurs du champ transverse h dans le domaine non critique (Figure 2.16).

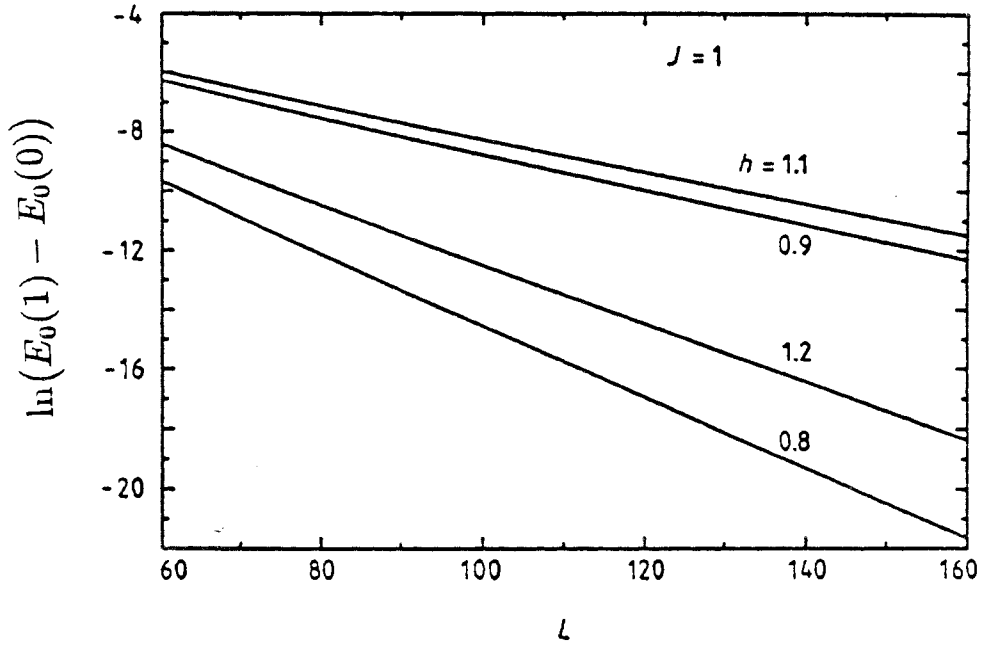


Figure 2.16

Dégénérescence asymptotique des niveaux $E_0(0)$ et $E_0(1)$.

Comme dans le cas du modèle périodique homogène, l'état fondamental de $\mathcal{H}$ est celui de $\tilde{\mathcal{H}}(0)$ et les états excités pairs s'en déduisent en ajoutant un nombre pair d'excitations $\Lambda_{\alpha}(0)$. Le secteur pair ($q = 0$) de $\mathcal{H}$ présente ainsi la structure de

tour conforme :

$$E_N(0) - E_0(0) = \frac{2\pi}{L} (0 + N) + O(L^{-2}) \quad , \quad N = 2, 3, 4, \dots \quad (2.75)$$

Dans le secteur impair, la parité de l'état fondamental $E_0(1)$ dépend de h/J . En effet, lorsque $h < J$, la présence d'une excitation $\Lambda_0(1)$ négative conduit à un état fondamental $E_0(1)$ impair, les autres niveaux impairs étant ensuite obtenus grâce à un nombre pair d'excitations $\Lambda_\alpha(1)$:

$$h < J : \quad E_N(1) - E_0(0) = \frac{2\pi}{L} (0 + N) + O(L^{-2}) \quad , \quad N = 0, 2, 3, \dots \quad (2.76)$$

alors que si $h > J$, un nombre impair d'excitations $\Lambda_\alpha(1)$ s'avère nécessaire pour rétablir à partir d'un état $E_0(1)$ pair les niveaux excités impairs :

$$h > J : \quad E_N(1) - E_0(0) = \frac{2\pi}{L} \left(\frac{1}{2} + N\right) + O(L^{-2}) \quad , \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (2.77)$$

Les tours conformes obtenues numériquement dans le cas $L = 140$ sont représentées sur la figure (2.17).

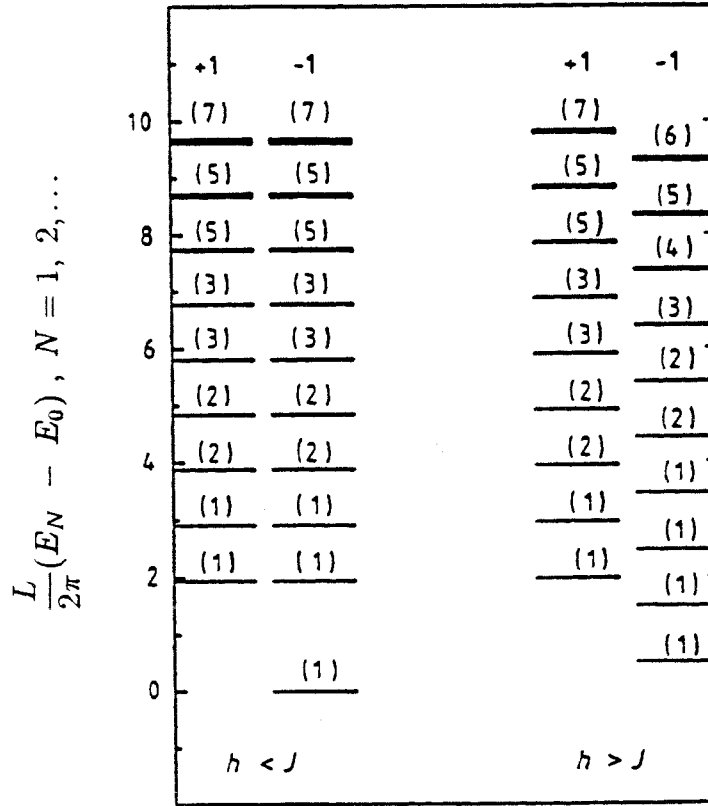


Figure 2.17

Tours conformes de l'interface.

Les niveaux sont classés selon les secteurs de parité et les dégénérescences sont indiquées entre parenthèses. Le demi-espace non critique est à température inférieure à T_c dans la partie gauche, $h = 0.5$, et supérieure dans la partie droite, $h = 2$.

Les dégénérescences permettent, comme on l'a déjà vu, d'identifier les opérateurs primaires de la théorie :

- si $h < J$, les secteurs pair et impair, dégénérés, constituent chacun une tour conforme de l'opérateur (0).

- si $h > J$, le secteur pair présente toujours les dégénérescences de l'opérateur (0), mais le secteur impair présente celles de l'opérateur ($\frac{1}{2}$).

Ces identifications sont en accord avec les expressions (2.75) à (2.77) et avec les relations gap-exposant :

– si $h < J$:

$$E_\epsilon - E_0 = \Lambda_0(0) + \Lambda_1(0) = \frac{2\pi}{L} \times 2 \quad (2.78a)$$

$$E_\sigma - E_0 = E_0(1) - E_1(0) \simeq 0 \quad (2.78b)$$

$$E_{\sigma'} - E_0 = E_0(1) + |\Lambda_0(1)| + \Lambda_1(1) - E_0(0) = \frac{2\pi}{L} \times 2 \quad (2.78c)$$

– si $h > J$:

$$E_\epsilon - E_0 = \Lambda_0(0) + \Lambda_1(0) = \frac{2\pi}{L} \times 2 \quad (2.79a)$$

$$E_\sigma - E_0 = E_0(1) + \Lambda_0(1) - E_0(0) = \frac{2\pi}{L} \times \frac{1}{2} \quad (2.79b)$$

La construction du spectre de $\mathcal{H}$ à partir des états pairs de $\tilde{\mathcal{H}}(0)$ et impairs de $\tilde{\mathcal{H}}(1)$ est schématisée sur la figure (2.18). Le spectre central a été obtenu par tridiagonalisation de l'hamiltonien de spins (pour une taille $L = 10$ et les valeurs $J = 1$, $h = 0.5$ en haut de la figure et $J = 1$, $h = 2$ en bas). L'état fondamental de $\tilde{\mathcal{H}}(1)$ est impair lorsque $h < J$.

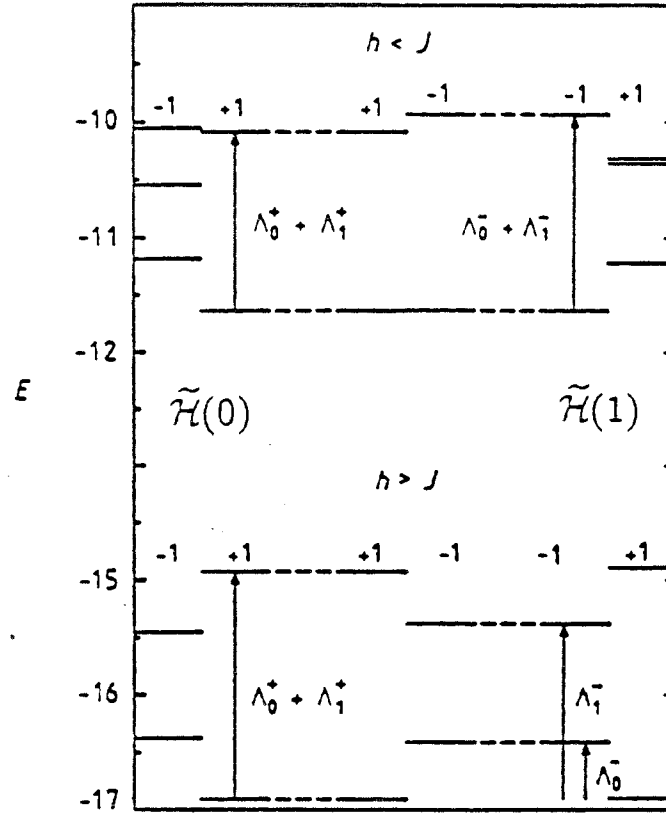


Figure 2.18

Construction du spectre de $\mathcal{H}$ à partir des énergies d'excitation.

La vérification numérique de la relation gap-exposant est présentée sur les figures (2.19) et (2.20). La première présente l'exposant magnétique x_m^i déduit de l'amplitude du gap $E_\sigma - E_0$ (2.78c) ainsi que l'exposant $x_m^{i'}$ (correction au scaling dans la phase de basse température) déduit de l'amplitude du gap $E'_\sigma - E_0$ (2.78c) pour des chaînes de tailles $L = 10$ à 180 . La seconde présente l'exposant thermique x_e^i déduit de l'amplitude du gap $E_e - E_0$ pour les mêmes tailles.

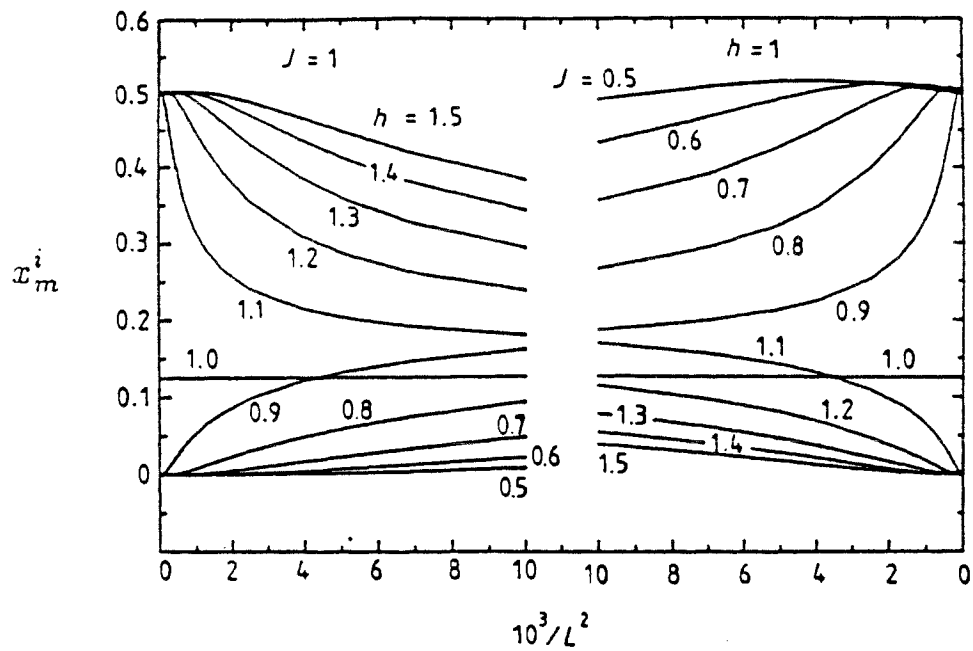


Figure 2.19a

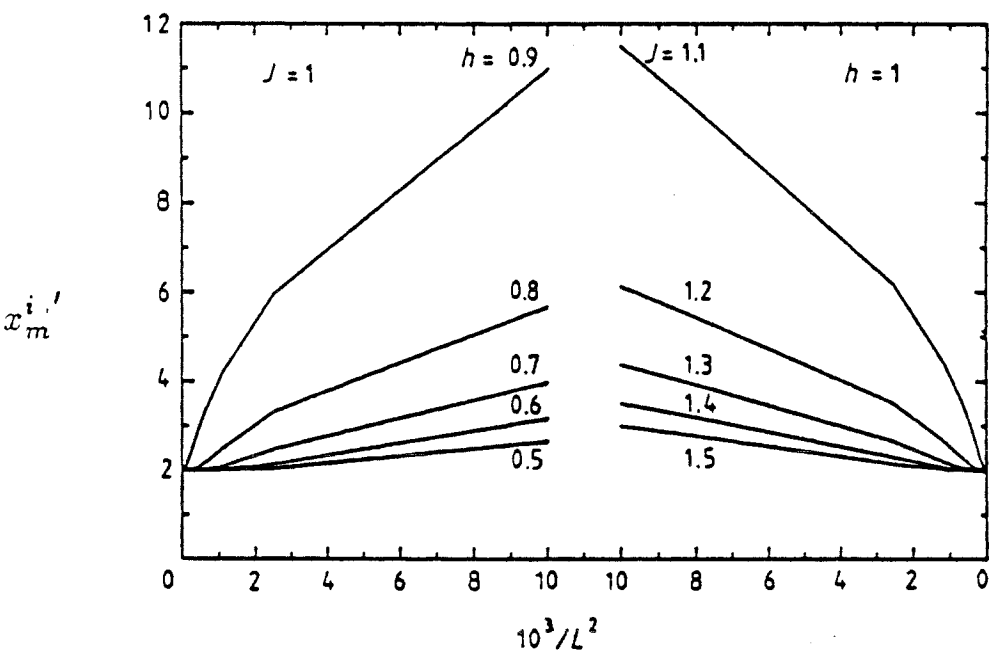


Figure 2.19b

Figure 2.19

Exposants magnétiques de l'interface (invariance conforme).

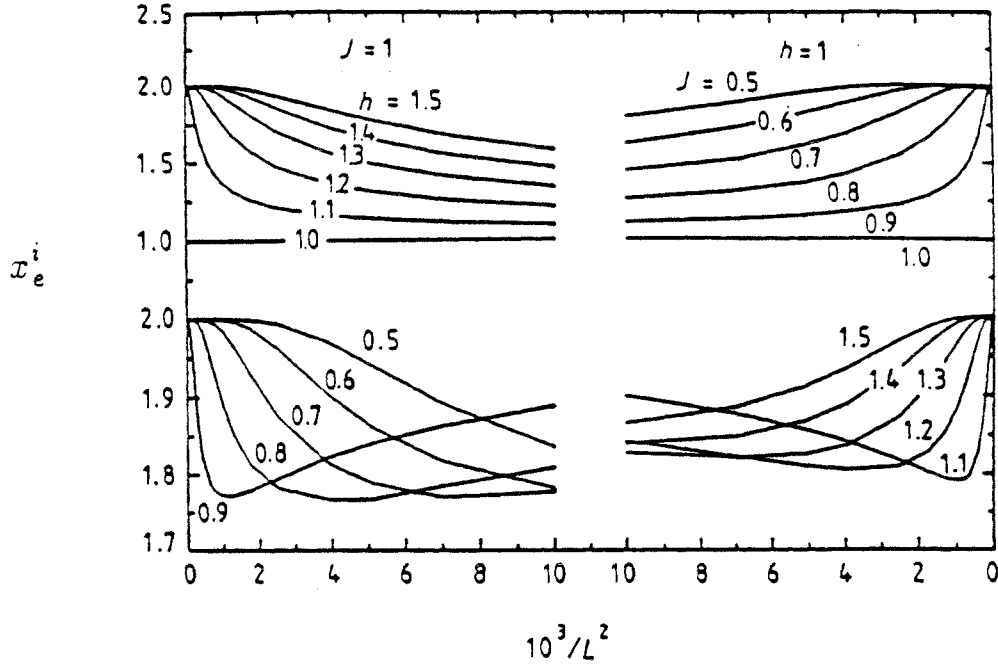


Figure 2.20

Exposant thermique de l'interface (invariance conforme).

Remarquons que la description du modèle que nous avons donnée par invariance conforme fait intervenir une seule algèbre de Virasoro, ce qui suggère l'analogie avec un comportement critique de surface. De plus, les opérateurs primaires et les exposants critiques correspondent à ceux d'une transition ordinaire en surface dans le cas $h > J$ et à ceux d'une transition extraordinaire lorsque $h < J$. Tout se passe donc comme si l'on avait à faire à un système avec surfaces libres comportant $M = L/2$ spins, *i.e.* les spins appartenant à la moitié critique de la chaîne uniquement. Les tours conformes (2.75) à (2.77) par exemple peuvent s'écrire :

$$E_N(\phi) - E_0 = \frac{\pi}{\ell}(x_\phi^i + N) \quad , \quad \ell = L/2 \quad (2.80)$$

Etudions maintenant le cas de l'interface angulaire. L'expression (2.66) des excitations permet d'appliquer la relation gap-exposant pour obtenir les exposants "de coin" :

$$E_\phi - E_0 = \frac{2\pi}{L} x_\phi^i(\vartheta) \quad (2.81)$$

soit

$$x_e^i(\vartheta) = \frac{2\pi}{\vartheta} \quad , \quad x_m^i(\vartheta) = 0 \quad , \quad x_m^{i'}(\vartheta) = \frac{2\pi}{\vartheta} \quad \text{si } h < J \quad (2.82a)$$

$$x_e^i(\vartheta) = \frac{2\pi}{\vartheta} \quad , \quad x_m^i(\vartheta) = \frac{\pi}{2\vartheta} \quad \text{si } h > j \quad (2.82b)$$

La valeur $x_m^i(\vartheta) = \pi/2\vartheta$ est en accord avec des résultats antérieurs (BARBER, PESCHEL et PEARCE 1984, PESCHEL 1985). Notons de plus que ces exposants peuvent s'obtenir à partir d'un système semi-infini par la transformation conforme

$$f(z) = z^{\vartheta/\pi} \quad (2.83)$$

qui transforme le demi-plan en un coin d'angle ϑ (CARDY 1984a).

4.3.2 Transformation de dualité de la chaîne d'Ising périodique

L'hamiltonien $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ peut s'écrire en fonction des matrices de Pauli en faisant intervenir explicitement l'opérateur de charge $\mathcal{Q}$:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}(q) = & -\frac{1}{2} \left(\sum_{\ell=1}^{L/2} [\sigma_x(\ell)\sigma_x(\ell+1) + \sigma_z(\ell)] + \sum_{\ell=L/2+1}^{L-1} [J\sigma_x(\ell)\sigma_x(\ell+1) + h\sigma_z(\ell)] \right. \\ & \left. + (-1)^q J\sigma_x(L)\sigma_x(1) + \mathcal{Q}h\sigma_z(L) \right) \end{aligned} \quad (2.84)$$

Par la transformation de dualité définie par les opérateurs μ_x, μ_z :

$$\mu_z(\ell) = \sigma_x(\ell-1)\sigma_x(\ell) \quad 2 \leq \ell \leq L \quad (2.85a)$$

$$\mu_z(1) = \sigma_x(1) \quad (2.85b)$$

$$\mu_x(\ell) = \prod_{k=\ell}^L \sigma_z(k) \quad (2.85c)$$

on obtient l'hamiltonien dual suivant :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_D(q) = & -\frac{1}{2} \left(\sum_{\ell=1}^{L/2} [\mu_z(\ell+1) + \mu_x(\ell)\mu_x(\ell+1)] + \sum_{\ell=L/2+1}^{L-1} [J\mu_z(\ell+1) + h\mu_x(\ell)\mu_x(\ell+1)] \right. \\ & \left. + h\mu_x(L)\mu_x(1) + (-1)^q J\mathcal{Q}_D\mu_z(1) \right) \end{aligned} \quad (2.86)$$

On constate alors que, lorsque $q = 0$, l'hamiltonien $\tilde{\mathcal{H}}(0)$ est self-dual (*) et que la dualité établit une correspondance dans laquelle les paramètres h et J voient leurs rôles s'inverser. La correspondance entre les deux chaînes est représentée sur la figure (2.21). Dans le secteur impair $q = 1$, la dualité met en évidence l'invariance par la transformation $h \longrightarrow -J$.

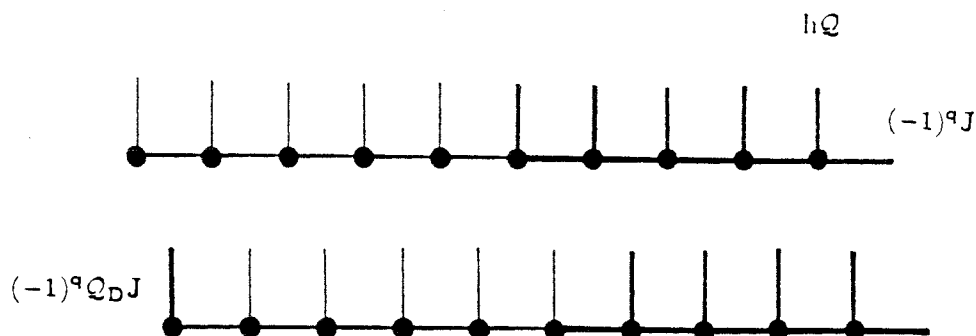


Figure 2.21

Transformation de dualité du modèle avec interface.

Les états propres pairs de $\tilde{\mathcal{H}}(0)$, sélectionnés par le projecteur P_0 , sont donc identiques si l'on change h en J et inversement. Ceci fournit une correspondance haute température $\longrightarrow$ basse température qui impose à l'exposant thermique d'avoir même valeur dans les deux situations $h > J$ et $h < J$. C'est effectivement le cas, puisque l'exposant thermique est égal à 2 pour les transitions ordinaire et extraordinaire.

5. Conclusion

Il convient, pour discuter les résultats obtenus précédemment, de distinguer les perturbations envisagées.

Examinons tout d'abord le modèle d'Ising avec surface libre. La perturbation en surface du modèle avec conditions de bords libres ne modifie pas les exposants

(*) On retrouve la chaîne périodique de départ à partir de la chaîne duale en renumérotant les sites : $\ell \rightarrow L/2 + 2 - \ell$ pour $1 \leq \ell \leq L/2 + 1$ et $\ell \rightarrow L - \ell + L/2 + 2$ pour $L/2 + 2 \leq \ell \leq L$.

de surface qui s'avèrent ceux de la transition ordinaire lorsque $h_s/J_s \neq 0$. Le défaut est de nature thermique puisqu'il consiste en une modification des couplages. Il est localisé en surface ($\bar{d} = 1$). Le comportement critique de référence pour une discussion de pertinence est donc celui de surface ($d = 1$) du système non perturbé pour lequel $y_t^s = -1$. On en déduit que la dimension associée à ce type de défaut est négative :

$$y_{\delta g} = \bar{d} - d + y_t^s = -1 \quad (2.87)$$

ce qui en fait une perturbation non pertinente. Le système perturbé converge alors par renormalisation vers l'ancien point fixe décrivant la transition ordinaire et l'on observe sur les courbes (2.6) et (2.7) que la convergence est d'autant plus lente que la perturbation est forte.

Dans le cas $h_s = 0$ en revanche, les exposants du système perturbé sont ceux de la transition extraordinaire, ce qui invalide la discussion précédente. Un champ transverse nul en surface, quoique caractérisé par une dimension négative, constitue néanmoins une perturbation pertinente. En effet, dans la version classique du modèle, cette perturbation particulière correspond à un couplage β_t^s infini dans la direction temporelle et qui demeure infini par renormalisation. La surface est ordonnée par ce couplage et le système perturbé converge vers le point fixe caractérisant la transition extraordinaire.

Dans les deux cas, l'algèbre de Virasoro de charge centrale $c = 1/2$ permet, après avoir identifié les champs primaires, de retrouver les propriétés critiques du système perturbé. Que celui-ci soit conformément covariant n'est pourtant pas évident a priori. Comme on l'a noté, le système étudié sur ruban ne correspond pas à la projection conforme d'un système semi-infini perturbé en surface de manière homogène lorsque $h_s/J_s \neq 0$. En effet, l'écart au point critique étant uniforme sur le ruban, $\delta t(w) = \Delta K_s$, il lui correspond dans le système semi-infini une perturbation de surface $\delta t(z)$ telle que

$$\delta t(w) = b(z)^{1/2} \delta t(z) \quad (2.88)$$

avec

$$b(z) = |f'(z)|^{-1} \quad (2.89)$$

soit

$$\delta t(z) = \frac{\rho\pi}{L} \Delta K, \quad (2.90)$$

Cette perturbation de surface, bien que non homogène, conduit cependant au comportement critique ordinaire. L'inhomogénéité de la perturbation dans le plan n'est pas pertinente.

Intéressons-nous maintenant au modèle d'Ising avec conditions de bords périodiques. Partant d'un système bidimensionnel infini, caractérisé par les exposants de volume du modèle d'Ising, $x_e = 1$, $x_m = 1/8$, on impose une perturbation étendue sur tout un demi-espace, ce qui induit un changement de comportement critique. On y reconnaît par ailleurs la transition ordinaire ou extraordinaire de surface selon les valeurs des perturbations.

Le changement de comportement critique s'explique par la dimension associée à la perturbation. Celle-ci étant étendue ($\bar{d} = 2$) et de nature thermique, elle affecte le comportement de volume ($d = 2$, $y_t = 1$), soit :

$$y_{\delta g} = \bar{d} - d + y_t = 1 \quad (2.91)$$

ce qui caractérise une perturbation pertinente.

Il s'avère de plus que l'invariance conforme peut être appliquée à ce type de perturbation : la relation gap-exposant confirme les exposants des transitions ordinaire et extraordinaire et l'algèbre de Virasoro de charge centrale 1/2 permet de reconstruire complètement le spectre du système perturbé. On doit cependant noter une nouvelle fois que le système étudié ne réalise pas la projection conforme d'un modèle perturbé de manière homogène dans un demi-espace puisque, la perturbation étant uniforme sur le ruban, $\delta t(w) = \Delta K$, elle correspond dans le plan à un écart inhomogène à la température critique :

$$\delta t(z) = \frac{L}{2\pi\rho} \Delta K, \quad (2.92)$$

Les exemples précédents montrent que l'on peut appliquer l'invariance conforme à des systèmes avec perturbations pertinentes ou non pertinentes. Les

propriétés conformes du système perturbé sont, dans chaque cas, celles du système à son point fixe. Les interprétations se trouvent simplifiées si l'on considère tout d'abord la renormalisation du système perturbé vers le nouveau point fixe si la perturbation est pertinente, ou vers l'ancien point fixe dans le cas contraire. Ensuite seulement, on envisage la transformation conforme du système à son point fixe.

Dans le cas de l'interface par exemple, si $h > J$, le demi-espace à $T > T_c$ renormalise vers le point fixe $T = \infty$, ce qui a pour effet de laisser un demi-espace critique avec surface libre. Dans le cas $h < J$, la perturbation $T < T_c$ renormalise vers le point fixe $T = 0$ où tous les spins sont gelés dans la même orientation, conduisant à un demi-espace critique avec conditions de bords fixes. Ceci justifie l'observation de transitions ordinaire et extraordinaire.

Le cas le plus intéressant consiste en fait à étudier des perturbations marginales pour lesquelles les propriétés critiques, non universelles, ne sont pas triviales. C'est l'objet du troisième chapitre que d'étudier de telles perturbations.

Annexe A

Excitations et vecteurs propres du modèle d'Ising en champ transverse perturbé en surface

Soit l'hamiltonien (2.18) à diagonaliser :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \left(\sum_{\ell=2}^{L-1} \sigma_z(\ell) + \sum_{\ell=2}^{L-2} \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) + h_s [\sigma_z(1) + \sigma_z(L)] \right. \\ \left. + J_s [\sigma_x(1) \sigma_x(2) + \sigma_x(L-1) \sigma_x(L)] \right) \quad (A.1)$$

Par la transformation de Jordan-Wigner et la méthode de Lieb, Schultz et Mattis :

$$\mathcal{H} = E_0 + \sum_k \Lambda_k \eta_k^+ \eta_k \quad (A.2)$$

où les excitations Λ_k sont solutions de l'équation aux valeurs propres

$$\Lambda \Phi_k = \Lambda_k^2 \Phi_k \quad (A.3)$$

et où Λ est une matrice tridiagonale.

A. 1. Perturbation $h_s/J_s \neq 0$

On met à profit la structure tridiagonale de la matrice des excitations pour écrire l'équation (A.3) en faisant intervenir des vecteurs à deux composantes (SCHMIDT 1957) :

$$\begin{pmatrix} \phi_k(\ell) \\ \phi_k(\ell+1) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_\ell \begin{pmatrix} \phi_k(\ell-1) \\ \phi_k(\ell) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ s_\ell & t_\ell \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_k(\ell-1) \\ \phi_k(\ell) \end{pmatrix} \quad (A.4)$$

avec les conditions aux limites

$$\phi_k(0) = \phi_k(L+1) = 0 \quad (\text{A.5})$$

Les éléments des matrices de transfert $\mathbf{T}_\ell$ sont alors :

$$\begin{aligned} t_\ell &= t = \Lambda_k^2 - 2, & s_\ell &= s = -1 \quad (3 \leq \ell \leq L-2) \\ t_1 &= \frac{\Lambda_k^2}{h_s J_s} - \frac{h_s}{J_s}, & s_1 &= 0 \\ t_2 &= \Lambda_k^2 - J_s^2 - 1, & s_2 &= -h_s J_s \\ t_{L-1} &= \frac{\Lambda_k^2}{J_s} - \frac{2}{J_s}, & s_{L-1} &= -\frac{1}{J_s} \\ t_L &= \frac{\Lambda_k^2}{J_s} - \frac{h_s^2}{J_s} - J_s, & s_L &= -1 \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

L'équation aux valeurs propres, satisfaisant aux conditions aux limites, devient :

$$\begin{pmatrix} \varphi_k(L) \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{T}_L \mathbf{T}_{L-1} \mathbf{T}_{L-2} \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

où les vecteurs φ_k redonnent les vecteurs Φ_k une fois normés ($\mathbf{T}_\ell = \mathbf{T}$ pour $3 \leq \ell \leq L-2$).

Les excitations les plus basses ($\Lambda_k < 2$) correspondent aux modes propagatifs le long de la chaîne de spins. $\mathbf{T}$ a alors deux valeurs propres complexes conjuguées $\lambda_\pm$ associées aux vecteurs propres $\mathbf{v}_\pm$:

$$\lambda_\pm = t/2 \pm i(1 - t^2/4)^{1/2} = e^{\pm ip} \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbf{v}_\pm = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_\pm \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Dans la base des états propres de $\mathbf{T}$, on écrit :

$$\mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \alpha \mathbf{v}_+ + \beta \mathbf{v}_- \quad (\text{A.10})$$

ainsi, l'équation obtenue à partir de la seconde composante de (A.7) s'écrit :

$$\begin{aligned} & (t_L t_{L-1} - 1) \left[(\alpha + \beta) \cos(L-3)p + i(\alpha - \beta) \sin(L-3)p \right] \\ & - \left(t_L / J_s \right) \left[(\alpha + \beta) \cos(L-4)p + i(\alpha - \beta) \sin(L-4)p \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

avec

$$\alpha + \beta = t_1 \quad (A.12a)$$

$$i(\alpha - \beta) = \frac{t_1 t_2 - h_s J_s - t_1 t/2}{(1 - t^2/4)^{1/2}} \quad (A.12b)$$

Au point critique, les excitations les plus basses s'annulent lorsque L tend vers l'infini et sont de la forme (PRIVMAN et FISHER 1984) :

$$\Lambda_k = \frac{a_k}{L} \left(1 + \frac{b_k}{L}\right) = O(L^{-3}) \quad (A.13)$$

Un développement en puissances de L^{-1} de (A.8) donne alors :

$$\lambda_{\pm} = -1 \pm i \frac{a_k}{L} + \left(\frac{a_k}{2} \pm i b_k\right) \frac{a_k}{L^2} + O(L^{-3}) \quad (A.14)$$

qui, avec

$$e^{\pm i p} = -1 \mp i(p - \pi) + \frac{1}{2}(p - \pi)^2 \quad (A.15)$$

permet d'identifier :

$$p = \pi - \left(1 + \frac{b_k}{L}\right) \frac{a_k}{L} + O(L^{-3}) \quad (A.16)$$

De même, (A.12) donne :

$$\alpha - \beta = -\frac{h_s}{J_s} + O(L^{-2}) \quad (A.17a)$$

$$i(\alpha - \beta) = -\left(\frac{J_s}{h_s} + \frac{h_s}{2J_s}\right) \frac{a_k}{L} + O(L^{-2}) \quad (A.17b)$$

et

$$t_L t_{L-1} - 1 = 1 + 2 \left(\frac{h_s}{J_s}\right)^2 + O(L^{-2}) \quad (A.18a)$$

$$-\frac{t_L}{J_s} = 1 + \left(\frac{h_s}{J_s}\right)^2 + O(L^{-2}) \quad (A.18b)$$

Enfin, avec les expressions

$$\cos(L - n)p = (-1)^{L-n} \left[\cos a_k + \frac{a_k}{L} (n - b_k) \sin a_k \right] + O(L^{-2}) \quad (A.19)$$

$$\sin(L - n)p = (-1)^{L-n} \left[(n - b_k) \frac{a_k}{L} \cos a_k - \sin a_k \right] + O(L^{-2})$$

l'équation (A.11) peut s'écrire :

$$\left(\frac{h_s}{J_s}\right)^3 \cos a_k + \left[\left(\frac{3}{2} - b_k\right) \left(\frac{h_s}{J_s}\right)^3 - 2 \frac{h_s}{J_s} \right] \frac{a_k}{L} \sin a_k = O(L^{-2}) \quad (A.20)$$

Lorsque $h_s/J_s \neq 0$, le terme dominant donne :

$$\cos a_k = 0 \quad \text{soit} \quad a_k = (2k+1) \frac{\pi}{2} \quad (\text{A.21})$$

et, à l'ordre suivant, on détermine la correction au *scaling* :

$$b_k = \frac{3}{2} - 2 \left(\frac{J_s}{h_s} \right)^2 \quad (\text{A.22})$$

pour obtenir l'expression (2.25) donnant les excitations les plus basses :

$$\Lambda_k = \frac{(2k+1)\pi}{2L} + \left[\frac{3}{4} - \left(\frac{J_s}{h_s} \right)^2 \right] (2k+1) \frac{\pi}{L^2} + O(L^{-3}) \quad (\text{A.23})$$

La connaissance des excitations permet de déterminer les vecteurs propres. La n ème composante du vecteur φ_k est obtenue grâce à :

$$\begin{pmatrix} \varphi_k(n-1) \\ \varphi_k(n) \end{pmatrix} = T^{n-3} T_2 T_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \alpha \lambda_+^{n-3} \mathbf{v}_+ + \beta \lambda_-^{n-3} \mathbf{v}_- \quad (3 \leq n \leq L-1) \quad (\text{A.24})$$

soit

$$\varphi_k(n) = (\alpha + \beta) \cos(n-2)p + i(\alpha - \beta) \sin(n-2)p \quad (\text{A.25})$$

avec

$$p = \pi - (2k+1) \frac{\pi}{2L} + O(L^{-2}) \quad (\text{A.26})$$

et $\phi_k(1)$ s'obtient ensuite par normation :

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^L \varphi_k^2(n) &= 2\alpha\beta L - i(\alpha^2 - \beta^2) \frac{L}{a_k} + O(1) \\ &= \frac{h_s^2}{2J_s^2} L + O(1) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

d'où l'on déduit

$$\phi_k(1) = \sqrt{2} \frac{J_s}{h_s} L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) \quad (\text{A.28})$$

Les autres composantes en découlent :

$$\phi_k(2) = t_1 \phi_k(1) = -\sqrt{2} L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) \quad (\text{A.29a})$$

$$\begin{aligned} \psi_k(1) &= -\frac{1}{\Lambda_k} \left(h_s \phi_k(1) + J_s \phi_k(2) \right) \\ &= -\frac{(2k+1)\pi J_s}{\sqrt{2} h_s^2} L^{-3/2} + O(L^{-5/2}) \end{aligned} \quad (\text{A.29b})$$

d'où les valeurs (2.30) calculées de l'énergie et de l'aimantation de surface.

A. 2. Perturbation $h_s = 0$

La même démarche s'applique dans ce cas à une matrice réduite de taille $(L-1) \times (L-1)$, puisque la première ligne (et colonne) de Λ est nulle. La première excitation s'annule :

$$\Lambda_0 = 0 \quad (A.30)$$

T , T_{L-1} , t_2 et s_L restent inchangés, mais on a maintenant

$$s_2 = 0, \quad t_L = \frac{\Lambda_k^2}{J_s} - J_s, \quad (A.31)$$

et l'équation aux valeurs propres devient :

$$\begin{pmatrix} \varphi_k(L) \\ 0 \end{pmatrix} = T_L T_{L-1} T^{L-4} T_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (A.32)$$

avec

$$T_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \gamma \mathbf{v}_+ + \delta \mathbf{v}_- \quad (A.33)$$

où l'on remplace α et β par γ et δ dans (A.11) avec

$$\gamma + \delta = 1 \quad (A.34a)$$

$$i(\gamma - \delta) = \frac{t_2 - t/2}{(1 - t^2/4)^{1/2}} = -\frac{J_s^2}{a_k} (L - b_k) + O(L^{-1}) \quad (A.34b)$$

et

$$t_L t_{L-1} - 1 = 1 + O(L^{-2}) \quad (A.35a)$$

$$-\frac{t_L}{J_s} = 1 + O(L^{-2}) \quad (A.35b)$$

de sorte que les excitations sont déterminées cette fois par :

$$-J_s^2 \cos a_k = O(L^{-1}) \quad (A.36)$$

soit, à l'ordre dominant l'expression (2.37) :

$$\Lambda_k = \frac{(2k-1)\pi}{2L} + O(L^{-2}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (A.37)$$

Les composantes des vecteurs propres se déterminent de proche en proche :

$$\begin{aligned}\phi_0(\ell) &= \delta_{\ell,1} \\ \psi_0(\ell) &= \delta_{\ell,L}\end{aligned}\tag{A.38}$$

et

$$\varphi_k(n) = (\gamma + \delta) \cos(n-2)p + i(\gamma - \delta) \sin(n-2)p \tag{A.39}$$

d'où

$$\sum_{n=1}^L \varphi_k^2(n) = \frac{2J_s^4}{(2k-1)^2 \pi^2} L^3 + O(L^2) \tag{A.40}$$

et

$$\phi_k(2) = \frac{(2k-1)\pi}{\sqrt{2}J_s^2} L^{-3/2} + O(L^{-5/2}) \tag{A.41a}$$

$$\psi_k(1) = -\frac{\sqrt{2}}{J_s} L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) \tag{A.41b}$$

qui permettent ensuite de calculer les propriétés de surface.

Annexe B

Excitations et vecteurs propres de la chaîne quantique d'Ising avec interface

Pour diagonaliser l'hamiltonien (2.54), on procède de manière habituelle par transformation de Jordan-Wigner pour obtenir une équation aux valeurs propres dans chaque secteur :

$$\Lambda(q)\Phi_\alpha = \Lambda_\alpha^2(q)\Phi_\alpha \quad (B.1)$$

L'introduction des vecteurs normés :

$$\begin{aligned} \phi_\alpha(\ell) &= (-1)^\ell (g_{\alpha\ell} + h_{\alpha\ell}) \\ \psi_\alpha(\ell) &= (-1)^\ell (g_{\alpha\ell} - h_{\alpha\ell}) \end{aligned} \quad (B.2)$$

reliés par :

$$-h(\ell)\phi_\alpha(\ell) + J(\ell)\phi_\alpha(\ell+1) = \Lambda_\alpha(q)\psi_\alpha(\ell) \quad (B.3)$$

où

$$\begin{aligned} h(\ell) &= J(\ell) = 1 & 1 &\leq \ell \leq M \\ h(\ell) &= h & M+1 &\leq \ell \leq L \\ J(\ell) &= J & M+1 &\leq \ell \leq L-1 \\ J(L) &= -(-1)^q J & \ell &= L \end{aligned} \quad (B.4)$$

permet d'écrire les lignes de l'expression matricielle (B.1) sous la forme :

$$\begin{aligned} h(\ell-1)J(\ell-1)\phi_\alpha(\ell-1) + \left[\Lambda_\alpha^2(q) - h^2(\ell) - J^2(\ell-1) \right] \phi_\alpha(\ell) \\ + h(\ell)J(\ell)\phi_\alpha(\ell+1) = 0 \end{aligned} \quad (B.5)$$

avec la condition

$$J(0) = J(L) \quad (B.6)$$

Dans le domaine critique ($2 \leq \ell \leq M$) où les composantes des vecteurs Φ_α et Ψ_α sont notées $\phi_{1\alpha}(\ell)$ et $\psi_{1\alpha}(\ell)$, on obtient :

$$\phi_{1\alpha}(\ell - 1) + (\Lambda_\alpha^2(q) - 2) \phi_{1\alpha}(\ell) + \phi_{1\alpha}(\ell + 1) = 0 \quad (B.7)$$

dont les solutions

$$\phi_{1\alpha}(\ell) = Ae^{ik\ell} + Be^{-ik\ell} \quad (B.8)$$

sont associées aux excitations

$$\Lambda_\alpha^2(q) = 4 \sin^2 \frac{k}{2} \quad (B.9)$$

Dans le second domaine ($M + 2 \leq \ell \leq L - 1$) où l'on adopte la notation $\phi_{2\alpha}(\ell)$ et $\psi_{2\alpha}(\ell)$, l'équation (B.5) devient :

$$hJ\phi_{2\alpha}(\ell - 1) + (\Lambda_\alpha^2(q) - h^2 - J^2) \phi_{2\alpha}(\ell) + hJ\phi_{2\alpha}(\ell + 1) = 0 \quad (B.10)$$

dont les solutions sont cette fois des exponentielles réelles :

$$\phi_{2\alpha}(\ell) = Ce^{K\ell} + De^{-K\ell} \quad (B.11)$$

avec

$$\cosh K = \frac{h^2 + J^2 - \Lambda_\alpha^2(q)}{2hJ} \quad (B.12)$$

Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\begin{aligned} \phi_{1\alpha}(0) + (J^2 - 1)\phi_{1\alpha}(1) &= -(-1)^q hJ\phi_{2\alpha}(L) \\ \phi_{1\alpha}(M + 1) &= \phi_{2\alpha}(M + 1) \\ \phi_{1\alpha}(1) &= -(-1)^q \phi_{2\alpha}(L + 1) \\ (h^2 - 1)\phi_{1\alpha}(M + 1) + \phi_{1\alpha}(M + 2) &= hJ\phi_{2\alpha}(M + 2) \end{aligned} \quad (B.13)$$

Elles conduisent avec les solutions (B.8) et (B.11) à un système homogène d'équations linéaires pour A , B , C et D :

$$\begin{aligned} [1 + (J^2 - 1)e^{ik}]A + [1 + (J^2 - 1)e^{-ik}]B + (-1)^q hJ e^{KL}C + (-1)^q hJ e^{-KL}D &= 0 \\ e^{ik(M+1)}A + e^{-ik(M+1)}B - e^{K(M+1)}C - e^{-K(M+1)}D &= 0 \\ e^{ik}A + e^{-ik}B + (-1)^q e^{K(L+1)}C + (-1)^q e^{-K(L+1)}D &= 0 \\ [(h^2 - 1)e^{ik(M+1)} + e^{ik(M+2)}]A + [(h^2 - 1)e^{-ik(M+1)} + e^{-ik(M+2)}]B \\ - hJ e^{K(M+2)}C - hJ e^{-K(M+2)}D &= 0 \end{aligned} \quad (B.14)$$

dont l'annulation du déterminant impose :

$$\begin{aligned}
 & 2(-1)^q h J \sin k \sinh K + (J^2 - 1)(h^2 - 1) \sin k M \sinh K M + h J(2 - h^2 - J^2) \\
 & \times \sin k M \sinh K(M + 1) + h^2 J^2 \sin k M \sinh K(M - 2) + (h^2 + J^2 - 2) \sin k(M + 1) \\
 & \times \sinh K M - 2h J \sin k(M + 1) \sinh K(M - 1) + \sin k(M + 2) \sinh K M = 0 \quad (B.15)
 \end{aligned}$$

Le comportement dominant en L^{-1} des excitations les plus basses suggère un développement en puissances de L^{-1} :

$$\begin{aligned}
 \cosh K &= \frac{h^2 + J^2}{2hJ} + O(L^{-2}) \\
 \sinh K &= \frac{|h^2 - J^2|}{2hJ} + O(L^{-2})
 \end{aligned} \quad (B.16)$$

qui simplifie (B.15) en :

$$k \cos k M \sinh K M (|h^2 - J^2| + O(L^{-2})) = 0 \quad (B.17)$$

On obtient donc, lorsque $h \neq J$, à l'ordre dominant :

$$\cos k M = 0 \quad \text{soit} \quad |\Lambda_\alpha(q)| = \frac{(2\alpha + 1)\pi}{2M} + O(L^{-2}) \quad , \quad \alpha = 0, 1, \dots \quad (B.18)$$

Le calcul des vecteurs propres ne se justifie que dans le cas de l'interface linéaire ($M = L/2$) que l'on considère dans la suite. Si l'on pose :

$$X = \gamma \Delta_X \quad (X = A, B, C, D) \quad (B.19)$$

les trois premières équations de (B.14) sont réécrites sous la forme :

$$\begin{aligned}
 [1 + (J^2 - 1)e^{-ik}] \frac{\Delta_B}{\Delta_A} + (-1)^q h J e^{KL} \frac{\Delta_C}{\Delta_A} + (-1)^q h J e^{-KL} \frac{\Delta_D}{\Delta_A} &= -[1 + (J^2 - 1)e^{ik}] \\
 -e^{-ik(L/2+1)} \frac{\Delta_B}{\Delta_A} + e^{K(L/2+1)} \frac{\Delta_C}{\Delta_A} + e^{-K(L/2+1)} \frac{\Delta_D}{\Delta_A} &= -e^{ik(L/2+1)} \\
 e^{-ik} \frac{\Delta_B}{\Delta_A} + (-1)^q e^{K(L+1)} \frac{\Delta_C}{\Delta_A} + (-1)^q e^{-K(L+1)} \frac{\Delta_D}{\Delta_A} &= -e^{ik}
 \end{aligned} \quad (B.20)$$

où les déterminants Δ_X , à l'ordre dominant en L^{-1} (i.e pour les excitations critiques), sont :

$$\begin{aligned}\Delta_A &= (-1)^q e^{KL/2} \left[1 + \frac{1}{2} (J^2 - h^2 - 2 + (h^2 - J^2)) e^{-ik} \right] (1 + O(L^{-2})) \\ \Delta_B &= -\Delta_A^* \quad (\text{conjugué complexe}) \\ \Delta_C &= -2ike^{-K(L/2+1)} (1 + O(L^{-2})) \\ \Delta_D &= 2i(-1)^q (-1)^\alpha e^{KL} (e^K J^2 - hJ) (1 + O(L^{-2}))\end{aligned}\quad (B.21)$$

soit, finalement :

$$\begin{aligned}\phi_{1\alpha}(\ell) &= i\gamma(-1)^q e^{KL/2} \left[2\sin k\ell + (J^2 - h^2 - 2 + (h^2 - J^2)) \sin k(\ell - 1) \right] \times (1 + O(L^{-2})) \\ \phi_{2\alpha}(\ell) &= 2i\gamma \left[(-1)^{\alpha+q} (e^K J^2 - hJ) e^{K(L-\ell)} - k e^{K(\ell-L/2-1)} \right] \times (1 + O(L^{-2}))\end{aligned}\quad (B.22)$$

où le coefficient γ est déterminé par la condition de normation des vecteurs Φ_k :

$$\sum_{\ell=1}^{L/2} |\phi_{1\alpha}(\ell)|^2 + \sum_{\ell=L/2+1}^L |\phi_{2\alpha}(\ell)|^2 = 1 \quad (B.23)$$

avec

$$\sum_{\ell=1}^{L/2} |\phi_{1\alpha}(\ell)|^2 = \begin{cases} \gamma^2 e^{KL} k^2 L (1 + O(L^{-1})) & \text{si } h > J \\ \gamma^2 e^{KL} (J^2 - h^2)^2 L (1 + O(L^{-1})) & \text{si } h < J \end{cases} \quad (B.24)$$

et

$$\sum_{\ell=L/2+1}^L |\phi_{2\alpha}(\ell)|^2 = \begin{cases} 8\gamma^2 e^{KL} \frac{J^2}{h^2 - J^2} k^2 & \text{si } h > J \\ 8\gamma^2 e^{KL} J^2 (J^2 - h^2) & \text{si } h < J \end{cases} \quad (B.25)$$

On constate que la contribution du demi-espace non critique à la norme est négligeable. On détermine donc γ en posant la première somme égale à 1, soit :

$$\phi_\alpha(1) = \begin{cases} 2i(-1)^q L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) & \text{si } h > J \\ \frac{2i\pi(-1)^q(2\alpha+1)}{J^2 - h^2} L^{-3/2} + O(L^{-5/2}) & \text{si } h < J \end{cases} \quad (B.26)$$

et, avec (B.3) :

$$\psi_\alpha(1) = \begin{cases} -2i\pi(-1)^q(2\alpha+1)L^{-3/2} + O(L^{-5/2}) & \text{si } h > J \\ 2i(-1)^q L^{-1/2} + O(L^{-3/2}) & \text{si } h < J \end{cases} \quad (B.27)$$

ce qui permet d'évaluer l'énergie sur l'interface (2.71).

3

Systèmes inhomogènes et relation gap-exposant

1. Introduction

Après avoir considéré des perturbations homogènes dans le modèle d'Ising, nous envisageons maintenant des systèmes dans lesquels la présence d'un défaut induit une perturbation inhomogène étendue en volume. C'est le cas du modèle de Hilhorst et van Leeuwen (1981) qui présente une grande variété de comportements critiques (BURKHARDT 1982a, BLÖTE et HILHORST 1983 et 1985, BURKHARDT et GUIM 1982 et 1984, BURKHARDT et al 1984) et, bien que les propriétés de symétrie par translation et par rotation soient brisées, il est intéressant d'y envisager l'application de l'invariance conforme.

Le modèle de Hilhorst et van Leeuwen consiste en un modèle d'Ising semi-infini dans lequel l'interaction entre spins premiers voisins parallèlement à la surface libre est constante et notée K_1 , alors qu'elle varie avec la distance ℓ à la surface libre dans la direction perpendiculaire :

$$K_2(\ell) = K_2(\infty) - \bar{A}/\ell^\gamma \quad (3.1)$$

Les travaux cités précédemment indiquent que le comportement critique en surface dépend de l'exposant γ qui caractérise l'interaction perpendiculaire. Lorsque $\gamma > 1$, la perturbation n'affecte pas le comportement critique de surface qui reste celui d'une

transition ordinaire. En revanche, si $y < 1$, la surface s'ordonne et la transition devient du premier ordre. Le cas $y = 1$ enfin conduit à un comportement de surface non universel, les exposants magnétiques étant des fonctions continues de

$$A = \frac{4\bar{A}}{\sinh[2K_2(\infty)]} \quad (3.2)$$

Deux comportements distincts sont alors observés, séparés par la valeur critique :

$$A_c = -1 \quad (3.3)$$

$$x_m^s = \frac{1}{2} (A + 1) \quad \text{si } A \geq A_c \quad (3.4a)$$

$$x_m^s = 0, \quad x_m^{s'} = -\frac{1}{2} (A + 1) \quad \text{si } A \leq A_c \quad (3.4b)$$

où la valeur nulle de l'exposant x_m^s lorsque $A \leq A_c$ est due à l'existence d'une aimantation spontanée en surface et où $x_m^{s'} = \eta_{\parallel}/2$ est l'exposant caractérisant la décroissance des corrélations en surface lorsque celle-ci est ordonnée.

Un argument de renormalisation (BURKHARDT 1982b, CORDERY 1982) rend compte de ces différents comportements en fonction de la valeur de y . Au voisinage du point fixe de volume K^* , l'écart $K_2(\ell) - K^*$ se transforme par renormalisation suivant :

$$\mathcal{R}[K_2(\ell) - K^*] = K_2'(\ell') - K^* = b^{y_c} (K_2(\ell) - K^*) \quad (3.5)$$

où

$$K_2'(\ell') = K_2'(\infty) - \bar{A}'/\ell'^y$$

En utilisant l'équation de renormalisation pour le couplage de volume

$$K_2'(\infty) - K^* = b^{y_c} (K_2(\infty) - K^*) \quad (3.6)$$

ainsi que la transformation des longueurs

$$\ell' = \ell/b$$

on obtient :

$$\bar{A}' = b^{y_c - y} \bar{A} \quad (3.7)$$

C'est ainsi le signe de $y_t - y$ qui caractérise le comportement de l'inhomogénéité spatiale par renormalisation.

- Si $y > y_t$, l'amplitude $\bar{A}$ décroît et la perturbation est non pertinente.
- Si $y < y_t$, on est en présence d'une perturbation augmentant par renormalisation, c'est-à-dire pertinente.
- Si $y = y_t$, la perturbation est marginale et donne lieu à des comportements critiques dépendant de l'amplitude $\bar{A}$.

Dans le cas du modèle d'Ising où $y_t = 1$, cette analyse est en accord avec les résultats précédents.

Avant d'aborder le problème dans sa version quantique, il convient de traduire dans la limite hamiltonienne les résultats déjà acquis et mentionnés plus haut. Lorsque

$$K_2(\infty) \longrightarrow 0 \quad , \quad K_1 \longrightarrow \infty$$

l'expression (3.2) se réduit à :

$$\bar{A} = \frac{1}{2} AK_2(\infty) \quad (3.8)$$

Le couplage perpendiculaire à la surface (*i.e.* dans la direction spatiale du modèle quantique) s'écrit alors :

$$K_2(\ell) = K_2(\infty) \left(1 - A/2\ell^y\right) = \lambda(\ell)\tau \quad (3.9a)$$

où $\tau = e^{-2K_1}$ est le pas du réseau dans la direction temporelle et où l'on a posé :

$$\lambda(\ell) = \lambda(\infty) \left(1 - \alpha/\ell^y\right) \quad (3.9b)$$

La correspondance classique $\longleftrightarrow$ quantique $A/2 = \alpha$ permet de prévoir les comportements suivants pour le système quantique lorsque $y = 1$:

$$x_m^s = \alpha + \frac{1}{2} \quad \text{si } \alpha \geq \alpha_c \quad (3.10a)$$

$$x_m^s = 0 \quad , \quad x_m^{s'} = -\alpha - \frac{1}{2} \quad \text{si } \alpha \leq \alpha_c \quad (3.10b)$$

avec pour valeur critique $\alpha_c = -1/2$. Le résultat (3.10a) a déjà été confirmé (PESCHEL 1984, KAISER et PESCHEL 1989).

L'objet de ce troisième chapitre est de poursuivre l'étude du modèle de Hilhorst et van Leeuwen par le calcul des exposants thermiques dans la limite hamiltonienne. On est ensuite amené à changer les conditions aux limites pour envisager le cas d'une inhomogénéité spatiale causée par une ligne de défauts en volume dans un système avec conditions périodiques. Enfin, c'est la forme de l'hamiltonien que l'on modifie en considérant le cas de chaînes quantiques XY qui constituent une généralisation naturelle du modèle.

Le calcul des propriétés critiques par effets de taille finie est effectué numériquement ou analytiquement selon les cas et accompagné des résultats issus des prédictions de l'invariance conforme, supposée valable.

2. Inhomogénéité spatiale décroissant depuis une surface libre

2.1 Présentation du modèle et résultats numériques

On considère une chaîne d'Ising en champ transverse, inhomogène et symétrique, comportant $L - 1$ spins (L est choisi pair) et avec conditions de bords libres. L'hamiltonien est écrit :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^{L-1} \sigma_z(\ell) - \frac{1}{2} \lambda(\infty) \sum_{\ell=1}^{L-2} \Delta_i(\ell) \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) \quad (3.11)$$

où l'on inclut l'écart au couplage critique dans $\Delta_i(\ell)$:

$$\Delta_1(\ell) = 1 - \alpha/\ell \quad \ell < L/2 \quad (3.12a)$$

$$\Delta_2(\ell) = 1 - \alpha/(L - \ell - 1) \quad \ell \geq L/2 \quad (3.12b)$$

On procède de manière habituelle pour diagonaliser l'hamiltonien (3.11) et, au point critique $\lambda(\infty) = 1$, les vecteurs propres Φ_k et les excitations Λ_k sont solutions des équations aux valeurs propres :

$$\Delta_i(\ell-1)\phi_k(\ell-1) - \left(\Lambda_k^2 - 1 - \Delta_i^2(\ell-1)\right)\phi_k(\ell) + \Delta_i(\ell)\phi_k(\ell+1) = 0 \quad (3.13)$$

avec les conditions aux limites :

$$\Delta_1(0)\phi_k(0) + \Delta_1^2(0)\phi_k(1) = 0 \quad (3.14a)$$

$$\Delta_2(L-1)\phi_k(L) = 0 \quad (3.14b)$$

On rappelle ici les expressions des éléments de matrice des opérateurs énergie et aimantation dans le formalisme fermionique, en les complétant pour les besoins de ce problème. L'énergie peut s'obtenir à partir de :

$$e_{\varepsilon}^z(\ell) = \langle \varepsilon | \sigma_z(\ell) | 0 \rangle \quad (3.15a)$$

$$e_{\varepsilon}^{xx}(\ell, \ell + 1) = \langle \varepsilon | \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell + 1) | 0 \rangle \quad (3.15b)$$

avec

$$| \varepsilon \rangle = \eta_k^+ \eta_{k'}^+ | 0 \rangle, \quad k < k' \quad (3.15c)$$

soit

$$e_{kk'}^z(\ell) = \phi_{k'}(\ell) \psi_k(\ell) - \phi_k(\ell) \psi_{k'}(\ell) \quad (3.15d)$$

$$e_{kk'}^{xx}(\ell, \ell + 1) = \phi_{k'}(\ell + 1) \psi_k(\ell) - \phi_k(\ell + 1) \psi_{k'}(\ell) \quad (3.15e)$$

L'aimantation

$$m_{\sigma}(\ell) = \langle \sigma | \sigma_x(\ell) | 0 \rangle \quad (3.16a)$$

ne s'exprime simplement qu'en surface où, avec un état excité à un fermion

$$| \sigma \rangle = \eta_k^+ | 0 \rangle \quad (3.16b)$$

on obtient sur les deux premiers sites :

$$m_k(1) = \phi_k(1) \quad (3.16c)$$

$$m_k(2) = \phi_k(2) \sum_{k'} \phi_{k'}(1) \psi_{k'}(1) - \phi_k(1) \sum_{k'} \phi_{k'}(2) \psi_{k'}(1) \quad (3.16d)$$

alors qu'avec un état excité comprenant trois fermions

$$| \sigma \rangle = \eta_k^+ \eta_{k'}^+ \eta_{k''}^+ | 0 \rangle \quad (3.16e)$$

on a en second site :

$$m_{kk'k''}(2) = \phi_k(2) e_{k'k''}^z(1) + \phi_{k'}(2) e_{kk''}^z(1) + \phi_{k''}(2) e_{k'k}^z(1) \quad (3.16f)$$

Si l'on commence la numérotation des excitations à $k = 0$ pour les plus basses, on attend pour un ruban de largeur finie L les comportements suivants :

$$e_{01}^z(1) \sim e_{01}^{zx}(1,2) \sim L^{-x_t^s} \quad (3.17a)$$

$$m_0(1) \sim L^{-x_m^s} \quad (3.17b)$$

$$m_1(1) \sim L^{-x_m^{s'}} \quad \text{si } \alpha \leq -1/2 \quad (3.17c)$$

qui définissent les exposants thermique et magnétiques. Les calculs numériques ont été effectués sur des chaînes de $L = 80$ à 180 spins et les exposants, déduits des courbes en log-log des éléments de matrice (3.15) et (3.16) et extrapolés à taille infinie, sont tracés en fonction de α sur les figures suivantes (BERCHE et TURBAN 1990c).

La figure (3.1) reproduit les variations avec α de l'exposant x_t^s déduit des éléments de matrices $e_{01}^z(1)$ (carrés) et $e_{01}^{zx}(1,2)$ (croix). La courbe continue donne l'expression analytique conjecturée et les courbes insérées représentent les exposants calculés pour différentes tailles. La superposition met en évidence leur convergence vers la courbe extrapolée.

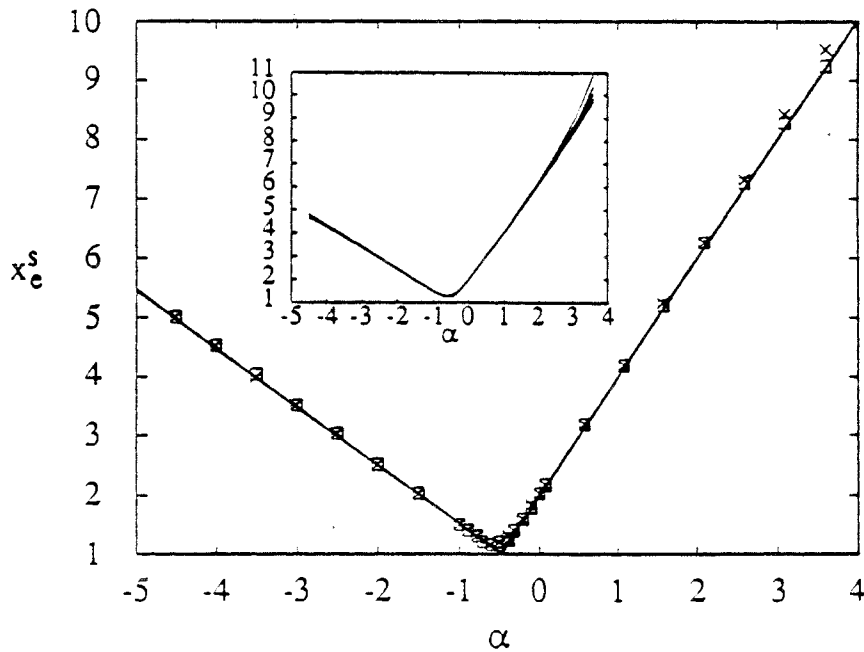


Figure 3.1

Exposant thermique obtenu par effets de taille finie puis extrapolé à taille infinie.

La figure (3.2) présente de même x_m^s (carrés) et $x_m^{s'}$ (croix, $\alpha < -1/2$).

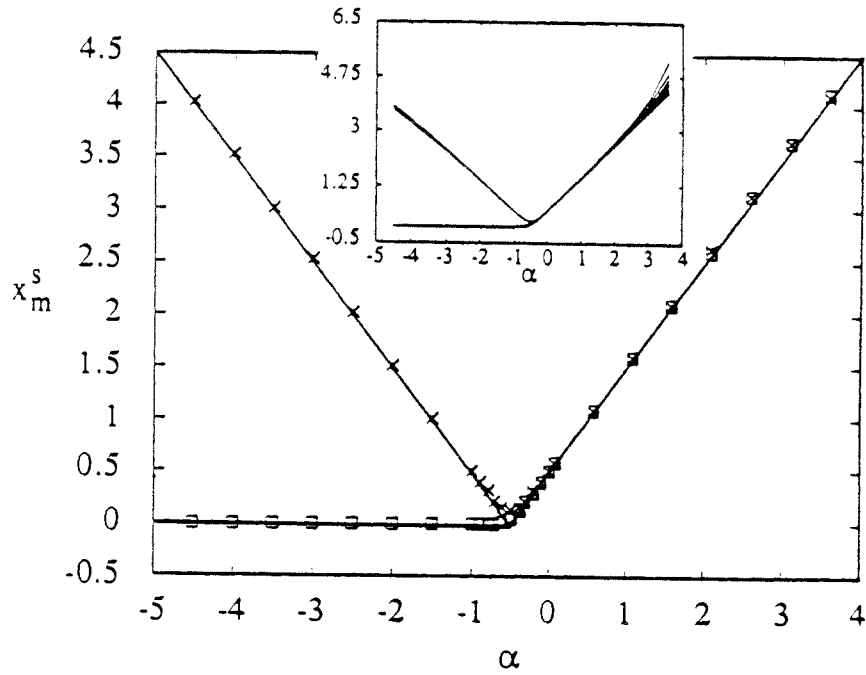


Figure 3.2

Exposants magnétiques obtenus par effets de taille finie puis extrapolés à taille infinie.

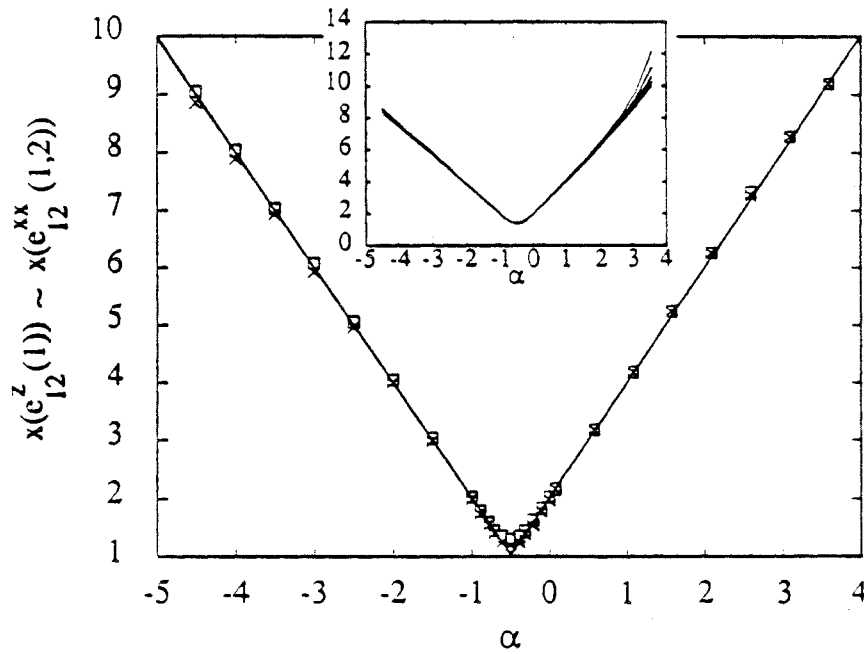


Figure 3.3

Correction au scaling de l'énergie.

Les figures (3.3) et (3.4) donnent les exposants de la correction au *scaling* de l'aimantation (déduit de $m_{012}(2)$) et de l'énergie (déduits de $e_{12}^z(1)$ (carrés) et de $e_{12}^{zz}(1,2)$ (croix)).

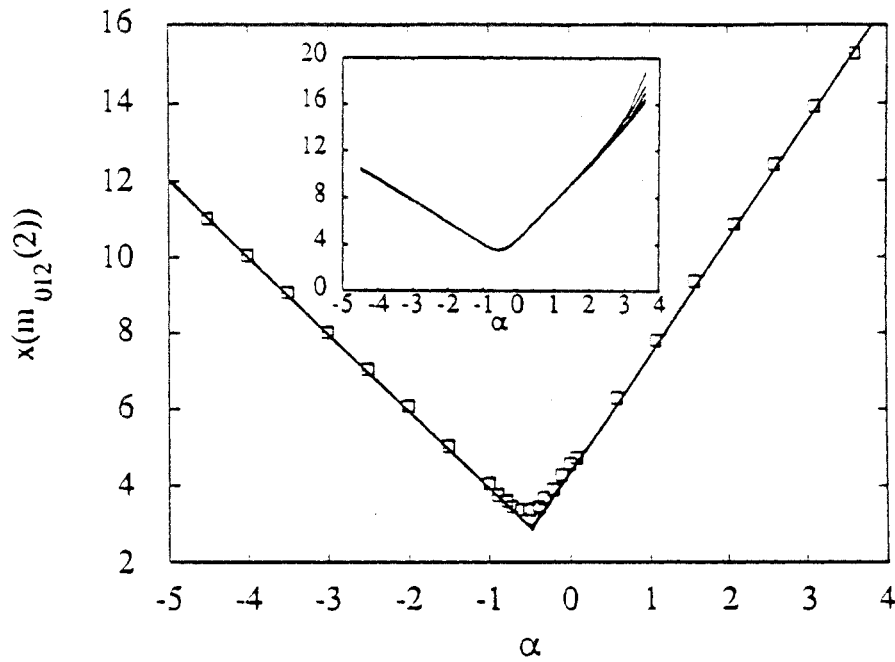


Figure 3.4

Correction au *scaling* de l'aimantation.

La précision des résultats numériques est suffisante pour suggérer les expressions analytiques des exposants caractérisant les comportements dominants (Figures 3.1 et 3.2) ainsi que celles des corrections au *scaling* (Figures 3.3 et 3.4).

- Si $\alpha \geq -1/2$

$$x_e^s = 2\alpha + 2 \quad (3.18a)$$

$$x_m^s = \alpha + 1/2 \quad (3.18b)$$

$$e_{12}^z(1) \sim e_{12}^{zz}(1,2) \sim L^{-(2\alpha+2)} \quad (3.18c)$$

$$m_{012}(2) \sim L^{-(3\alpha+9/2)} \quad (3.18d)$$

- Si $\alpha \leq -1/2$

$$x_e^s = -\alpha + 1/2 \quad (3.19a)$$

$$x_m^s = 0 \quad , \quad x_m^{s'} = -\alpha - 1/2 \quad (3.19b)$$

$$e_{12}^z(1) \sim e_{12}^{xx}(1,2) \sim L^{-(-2\alpha)} \quad (3.19c)$$

$$m_{012}(2) \sim L^{-(2-2\alpha)} \quad (3.19d)$$

On remarque que les valeurs (3.18b) et (3.19b) sont en accord avec les résultats annoncés.

2.2 Résultats exacts dans le cas d'un système non ordonné en surface

Lorsque $\alpha > -1/2$, on peut calculer la dépendance avec la taille L des propriétés de surface au point critique $\lambda(\infty) = 1$ et confirmer ainsi les résultats (3.18) (*).

La technique initialement introduite par Peschel (1984) pour obtenir l'aimantation de surface du système inhomogène semi-infini peut également être exploitée pour calculer l'énergie de surface.

On se limite au cas asymétrique $\Delta_i = \Delta_1$, ce qui n'affecte pas les propriétés de surface évaluées sur le site $\ell = 1$. La contribution dominante à la composante $\phi_k(\ell)$ se déduit de l'équation aux valeurs propres (3.13) si l'on néglige les termes en Λ_k^2 d'ordre $O(L^{-2})$. En combinant (3.13) avec la condition (3.14a), on obtient une relation de récurrence

$$\phi_k(\ell + 1) \simeq -\frac{1}{\Delta_1(\ell)} \phi_k(\ell)$$

conduisant à :

$$\phi_k(\ell) \simeq (-1)^{\ell-1} \phi_k(1) \prod_{j=1}^{\ell-1} \Delta_1^{-1}(j) \quad (3.20)$$

Le produit sur j s'exprime à partir de la fonction Γ d'Euler :

$$\prod_{j=1}^{\ell-1} \Delta_1^{-1}(j) = \prod_{j=1}^{\ell-1} (1 - \alpha/j)^{-1} = \frac{\Gamma(1 - \alpha) \Gamma(\ell)}{\Gamma(\ell - \alpha)} \quad (3.21)$$

(*) Lorsque $\alpha \leq -1/2$, la méthode ne donne pas les bons comportements, mais on vérifie alors la cohérence des valeurs (3.19).

de sorte qu'en utilisant le développement asymptotique

$$\Gamma(z+b) = \sqrt{2\pi} e^{-z} z^{z+b-1/2} (1 + O(z^{-1})) \quad (3.22)$$

dans la condition de normation

$$\sum_{\ell=1}^{L-1} \phi_k^2(\ell) = 1 = \phi_k^2(1) \sum_{\ell=1}^{L-1} \prod_{j=1}^{\ell-1} \Delta_1^{-2}(j) \quad (3.23)$$

le produit devient :

$$\prod_{j=1}^{\ell-1} \Delta_1^{-2}(j) = \Gamma^2(1-\alpha) \ell^{2\alpha} (1 + O(\ell^{-1})) \quad (3.24)$$

La somme (3.23) étant remplacée par une intégrale qui converge lorsque $\alpha > -1/2$, on obtient une expression indépendante de k à cet ordre en $1/L$:

$$\phi_k(1) \simeq \phi(1) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \left(\int_0^L d\ell \ell^{2\alpha} \right)^{-1/2} = \frac{\sqrt{2\alpha+1}}{\Gamma(1-\alpha)} L^{-(\alpha+1/2)} \quad (3.25)$$

et qui confirme la valeur de l'exposant magnétique

$$x_m^s = \alpha + 1/2 \quad \text{si } \alpha > -1/2$$

Le calcul de l'énergie nécessite la connaissance de

$$\psi_k(1) = -\frac{1}{\Lambda_k} (\phi_k(1) + \Delta_1(1) \phi_k(2)) \quad (3.26a)$$

Or $\phi_k(2)$ vaut exactement :

$$\phi_k(2) = \frac{1}{\Delta_1(1)} (\Lambda_k^2 - 1) \phi_k(1) \quad (3.26b)$$

ce qui simplifie (3.26a) :

$$\psi_k(1) = -\Lambda_k \phi_k(1) \quad (3.26c)$$

d'où l'on déduit :

$$e_{kk'}^z(1) \sim (\Lambda_{k'} - \Lambda_k) \phi^2(1) \sim L^{-(2\alpha+2)} \quad (3.27)$$

Le même comportement est obtenu pour $e_{kk'}^{zx}(1,2)$ en accord avec la valeur conjecturée :

$$x_e^s = 2\alpha + 2 \quad \text{si } \alpha > -1/2$$

Le calcul peut être poursuivi pour obtenir les corrections au *scaling*, l'évaluation de $m_{kk'k''}(2)$ conduit à trois termes d'ordre $L^{-(3\alpha+5/2)}$ dont la somme s'annule (on le vérifie numériquement) et le comportement de $m_{kk'k''}(2)$ provient en fait du terme suivant dans lequel apparaît un facteur supplémentaire d'ordre $O(L^{-2})$ dû à une correction en Λ_k^2 dans $\phi_k(2)$ (3.26b). On obtient ainsi :

$$m_{kk'k''}(2) \sim L^{-(3\alpha+9/2)} \quad (3.28)$$

Cette méthode est malheureusement inefficace dans le cas $\alpha < -1/2$ où, si elle donne bien la contribution dominante constante de $\phi_0(1)$ (aimantation spontanée en surface), elle ne conduit pas au bon comportement pour $\phi_{k \neq 0}(1)$. Néanmoins, en admettant comme le suggèrent les résultats numériques que $\phi_{k \neq 0}(1) \sim L^{\alpha+1/2}$ en accord avec (3.19b), on obtient :

$$\psi_0(1) \sim O(L^{-1}) \quad , \quad \psi_{k \neq 0}(1) \sim L^{\alpha-1/2}$$

soit

$$e_{01}^z(1) \sim L^{-(-\alpha+1/2)} \quad (3.29)$$

de sorte que les valeurs de x_m^s et de x_e^s (3.19a et b) s'avèrent mutuellement cohérentes, de même que la correction au *scaling* qui donne :

$$e_{12}^z(1) \sim L^{2\alpha} \quad (3.30)$$

en accord avec (3.19c).

2.3 Spectre d'excitation dans la limite continue

Afin d'appliquer l'invariance conforme au modèle (3.11), il convient d'en déterminer le spectre d'excitations (*).

Lorsque $L \gg 1$, celui-ci peut être étudié dans l'approximation continue (IGLÓI 1990) en introduisant la variable $z = \ell/L$ qui prend des valeurs continues dans la limite thermodynamique.

(*) Nous verrons dans la discussion que le ruban étudié ici n'est pas parfaitement adapté aux méthodes de l'invariance conforme.

Ainsi, en posant

$$\varphi(\ell) = (-1)^\ell \phi(\ell) \quad (3.31)$$

et en passant des différences finies aux dérivées :

$$\varphi(\ell + 1) - \varphi(\ell) = \frac{1}{L} \varphi'(z) + O(L^{-2}) \quad (3.32a)$$

$$\varphi(\ell + 1) - 2\varphi(\ell) + \varphi(\ell - 1) = \frac{1}{L^2} \varphi''(z) + O(L^{-3}) \quad (3.32b)$$

on transforme l'équation aux différences finies (3.13) en équations différentielles du second ordre en se limitant aux termes dominants (les détails de calcul figurent en annexe C) :

$$\frac{d^2 \varphi_1(z)}{dz^2} + \left[(\Lambda_k L)^2 - \frac{\alpha(\alpha - 1)}{z^2} \right] \varphi_1(z) = 0 \quad , \quad 0 < z < \frac{1}{2} \quad (3.33a)$$

$$\frac{d^2 \varphi_2(z)}{dz^2} + \left[(\Lambda_k L)^2 - \frac{\alpha(\alpha + 1)}{(1 - z)^2} \right] \varphi_2(z) = 0 \quad , \quad \frac{1}{2} < z < 1 \quad (3.33b)$$

Les conditions aux limites (3.14) s'écrivent :

$$\frac{\alpha}{z} \varphi_1(z) - \frac{d\varphi_1}{dz} = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (3.34a)$$

$$\varphi_2(z) = 0 \quad \text{en } z = 1 \quad (3.34b)$$

L'équation (3.13) en $\ell = L/2$ conduit aux conditions de raccordement :

$$\frac{d\varphi_1}{dz} = \frac{d\varphi_2}{dz} \quad \text{en } z = 1/2 \quad (3.35a)$$

$$\varphi_1(z) = \varphi_2(z) \quad \text{en } z = 1/2 \quad (3.35b)$$

Les équations différentielles (3.33) sont des équations de Bessel modifiées admettant des solutions particulières de la forme :

$$\varphi_1^\pm(z) \sim z^{1/2} J_{\pm(\alpha-1/2)}(cz) \quad (3.36a)$$

$$\varphi_2^\pm(z) \sim (1 - z)^{1/2} J_{\pm(\alpha+1/2)}(c(1 - z)) \quad (3.36b)$$

où $J_\nu(x)$ est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre ν et $c = \Lambda_k L$. Les conditions (3.34) permettent de sélectionner les solutions :

$$\begin{aligned} \varphi_1(z) &= A z^{1/2} J_{\alpha-1/2}(cz) \\ \varphi_2(z) &= B (1 - z)^{1/2} J_{\alpha+1/2}(c(1 - z)) \end{aligned} \quad \text{si } \alpha \geq -1/2 \quad (3.37a)$$

et

$$\begin{aligned}\varphi_1(z) &= Az^{1/2} J_{-(\alpha-1/2)}(cz) \\ \varphi_2(z) &= B(1-z)^{1/2} J_{-(\alpha+1/2)}(c(1-z))\end{aligned} \quad \text{si } \alpha \leq -1/2 \quad (3.37b)$$

alors que les conditions de continuité de φ et de sa dérivée en $z = 1/2$ fournissent un système d'équations linéaires homogène pour A et B dont on annule le déterminant pour éviter les solutions nulles, soit

$$J_p^2(c/2) = J_q^2(c/2) \quad (3.38)$$

où

$$p = \alpha - 1/2 \quad \text{et} \quad q = \alpha + 1/2 \quad \text{si } \alpha \geq -1/2 \quad (3.39a)$$

$$p = -\alpha + 1/2 \quad \text{et} \quad q = -\alpha - 1/2 \quad \text{si } \alpha \leq -1/2 \quad (3.39b)$$

La forme asymptotique du spectre pour les excitations élevées est déterminée en utilisant le développement en z^{-1} des fonctions de Bessel :

$$J_\nu(z) = \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \left(\cos\left(z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + O(z^{-1})\right) \quad (3.40)$$

de sorte que (3.38) conduit à :

$$\sin\left[c - \frac{(p+q+1)\pi}{2}\right] = 0 \quad (3.41)$$

soit

$$c = (p+q+2k+1)\frac{\pi}{2} \quad (3.42)$$

d'où l'on déduit les valeurs asymptotiques des énergies d'excitation :

$$\Lambda_k = \frac{\pi}{L} \left(\frac{p+q+1}{2} + k\right) \quad (3.43)$$

Pour les excitations les plus basses, le développement des fonctions de Bessel en puissances de z permet d'obtenir une solution de (3.38) si $\alpha \geq -1/2$:

$$\Lambda_0 = \frac{4}{L} \left(\alpha + \frac{1}{2}\right) + O\left(\alpha + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (3.44)$$

Cette excitation constitue le mode le plus bas du spectre. Elle s'annule linéairement avec α à $\alpha_c = -1/2$. Lorsque $\alpha < -1/2$, cette solution n'existe pas, de sorte que l'on

peut supposer que le mode le plus bas Λ_0 décroît alors plus vite que L^{-1} et, dans le cas d'un mode nul $\Lambda_0 = 0$, les équations (3.33) et (3.34) ont pour solution :

$$\begin{aligned}\varphi_1(z) &= Az^\alpha \\ \varphi_2(z) &= B(1-z)^{-\alpha} \quad \alpha \leq -1/2\end{aligned}$$

Pour normer cette solution, on est amené à introduire un paramètre de coupure en $z = 1/L$ afin d'éviter une divergence à la borne inférieure. En effet, la condition de normation s'écrit :

$$\sum_{\ell=1}^{L-1} \varphi^2(\ell) = 1 \xrightarrow{\ell=zL} L \int_{1/L}^{1-1/L} dz \varphi^2(z) = 1$$

Cette dernière intégrale se décompose en deux termes raccordés en $z = 1/2$:

$$LA^2 \int_{1/L}^{1/2} z^{2\alpha} dz + LB^2 \int_{1/2}^{1-1/L} (1-z)^{-2\alpha} dz = 1$$

Le second terme ayant une contribution négligeable, cette expression conduit à :

$$A \sim L^\alpha$$

d'où l'on déduit :

$$\varphi_1(z = 1/L) \sim L^0$$

c'est-à-dire une amplitude indépendante de la taille du système, reliée à la valeur constante de $\phi_0(1)$ et associée à l'aimantation spontanée en surface.

La comparaison entre l'expression asymptotique (3.43) et la valeur de l'excitation la plus basse lorsque $\alpha \geq -1/2$ (3.44) suggère que cette dernière corresponde à $k = 0$ dans le spectre asymptotique, les facteurs numériques respectifs π et 4 étant voisins.

Les valeurs asymptotiques des énergies d'excitation sont en définitive :

$$\Lambda_k = \frac{\pi}{L} \left(\alpha + \frac{1}{2} + k \right) \quad , \quad k = 0, 1, \dots \quad \alpha \geq -\frac{1}{2} \quad (3.45a)$$

$$\Lambda_0 = 0 \quad , \quad \Lambda_{k+1} = \frac{\pi}{L} \left(-\alpha + \frac{1}{2} + k \right) \quad , \quad k = 0, 1, \dots \quad \alpha \leq -\frac{1}{2} \quad (3.45b)$$

La correspondance avec les valeurs numériques est représentée sur la figure (3.5) qui confirme notre conjecture en ce qui concerne l'excitation la plus basse. Le trait plein représente les excitations dans la limite continue, les croix correspondent aux résultats numériques pour une chaîne de $L = 180$ spins.

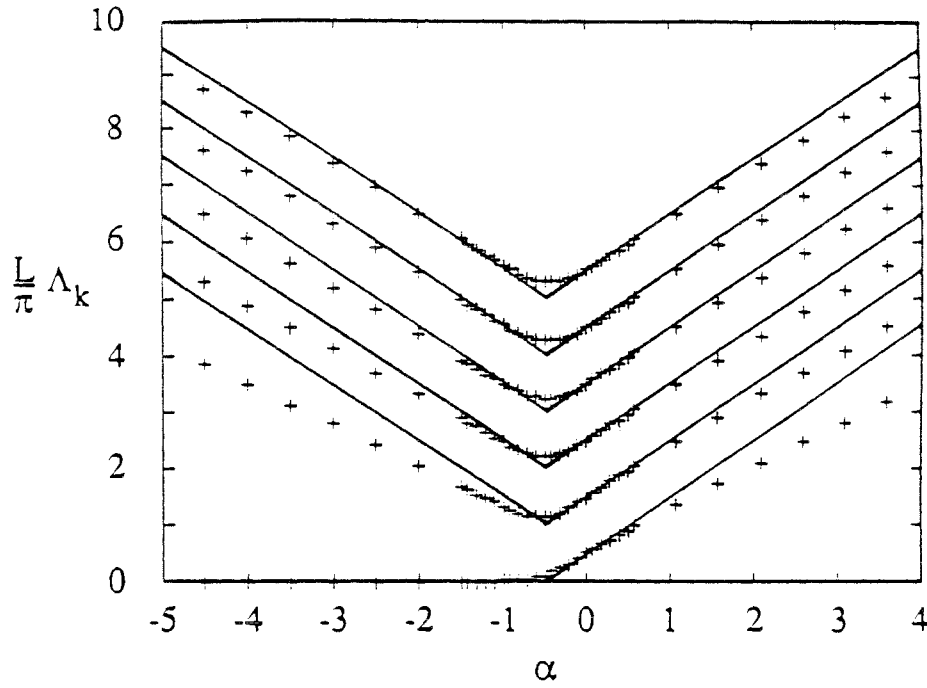


Figure 3.5

Excitations dans la limite continue.

2.4 Discussion

Le spectre asymptotique obtenu au paragraphe précédent présente des énergies d'excitation régulièrement espacées qui permettent la construction de niveaux analogues à des tours conformes.

Des expressions (3.45), on déduit celles des gaps des secteurs pair et impair.

• Si $\alpha \geq -\frac{1}{2}$, les énergies des niveaux excités pairs (respectivement impairs) sont obtenues grâce à $2n$ excitations (respectivement $2n + 1$) et notées $E^+(2n, k)$ (respectivement $E^-(2n + 1, k)$), les gaps correspondants ayant pour expressions :

$$\frac{L}{\pi} (E^+(2n, k) - E_0) = 2n\alpha + 2n^2 + k$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.46a)$$

$$\frac{L}{\pi} (E^-(2n + 1, k) - E_0) = (2n + 1)\alpha + 2n(n + 1) + \frac{1}{2} + k$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.46b)$$

Les premiers gaps de chaque secteur sont rassemblés dans les tableaux (3.1) et (3.2).

Nombre d'excitations	2	4	6
Premiers gaps	$2\alpha + 2$	$4\alpha + 8$	$6\alpha + 18$
	$2\alpha + 3$	$4\alpha + 9$	$6\alpha + 19$
	$2\alpha + 4$	$4\alpha + 10$	$6\alpha + 20$
	...	...	...

Tableau 3.1

Premiers gaps du secteur pair lorsque $\alpha \geq \alpha_c$.

Nombre d'excitations	1	3	5
Premiers gaps	$\alpha + 1/2$	$3\alpha + 9/2$	$5\alpha + 25/2$
	$\alpha + 3/2$	$3\alpha + 11/2$	$5\alpha + 27/2$
	$\alpha + 5/2$	$3\alpha + 13/2$	$5\alpha + 29/2$
	...	...	...

Tableau 3.2

Premiers gaps du secteur impair lorsque $\alpha \geq \alpha_c$.

• Si $\alpha \leq -\frac{1}{2}$, les secteurs pair et impair sont dégénérés du fait de l'existence d'une excitation nulle. Si l'on note $E_{(0)}^\pm$ les énergies des niveaux comprenant cette excitation nulle, les gaps correspondants ont pour expressions :

$$\frac{L}{\pi} \left(E_{(0)}^+(2n, k) - E_0 \right) = -(2n-1)\alpha + \frac{1}{2}(2n-1)^2 + k$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.47a)$$

$$\frac{L}{\pi} \left(E_{(0)}^-(2n+1, k) - E_0 \right) = -2n\alpha + 2n^2 + k$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.47b)$$

alors que les énergies ne mettant pas en jeu l'excitation Λ_0 , notées $E^\pm$, correspondent aux expressions inversées :

$$\frac{L}{\pi} \left(E^+(2n, k) - E_0 \right) = -2n\alpha + 2n^2 + k$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.47c)$$

$$\frac{L}{\pi} \left(E^-(2n-1, k) - E_0 \right) = -(2n-1)\alpha + \frac{1}{2}(2n-1)^2 + k$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.47d)$$

Les tableaux (3.3) et (3.4) contiennent les premiers gaps et mettent en évidence la dégénérescence des deux secteurs pour $\alpha \leq \alpha_c$.

Nombre d'excitations	2(*)	2	4(*)	4	6(*)
Premiers gaps	$-\alpha + 1/2$	$-2\alpha + 2$	$-3\alpha + 9/2$	$-4\alpha + 8$	$-5\alpha + 25/2$
	$-\alpha + 3/2$	$-2\alpha + 3$	$-3\alpha + 11/2$	$-4\alpha + 9$	$-5\alpha + 27/2$
	$-\alpha + 5/2$	$-2\alpha + 4$	$-3\alpha + 13/2$	$-4\alpha + 10$	$-5\alpha + 29/2$
	...	...	...	...	...

Tableau 3.3

Premiers gaps du secteur pair lorsque $\alpha \leq \alpha_c$.

(*) Gaps qui incluent l'excitation Λ_0 .

Nombre d'excitations	1(*)	1	3(*)	3	5(*)	5
Premiers gaps	0	$-\alpha + 1/2$	$-2\alpha + 2$	$-3\alpha + 9/2$	$-4\alpha + 8$	$-5\alpha + 25/2$
		$-\alpha + 3/2$	$-2\alpha + 3$	$-3\alpha + 11/2$	$-4\alpha + 9$	$-5\alpha + 27/2$
		$-\alpha + 5/2$	$-2\alpha + 4$	$-3\alpha + 13/2$	$-4\alpha + 10$	$-5\alpha + 29/2$
		...	...	...	...	...

Tableau 3.4

Premiers gaps du secteur impair lorsque $\alpha \leq \alpha_c$.

(*) Gaps qui incluent l'excitation Λ_0 .

Les gaps $\frac{L}{\pi}(E - E_0)$ sont représentés en fonction de α dans la limite continue sur les figures (3.6) et (3.7). Les chiffres notés entre parenthèses indiquent les dégénérescences.

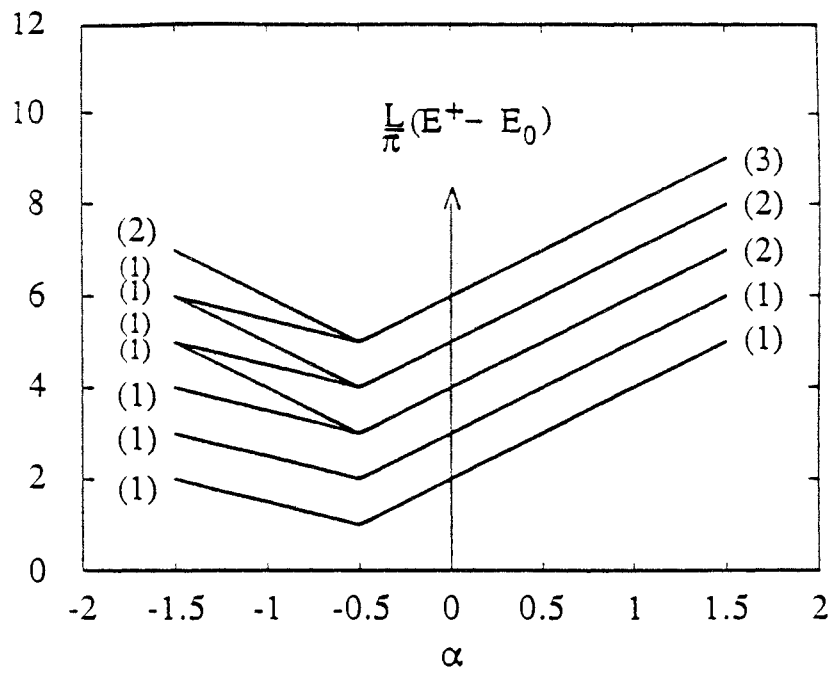


Figure 3.6

Gaps du secteur pair dans la limite continue.

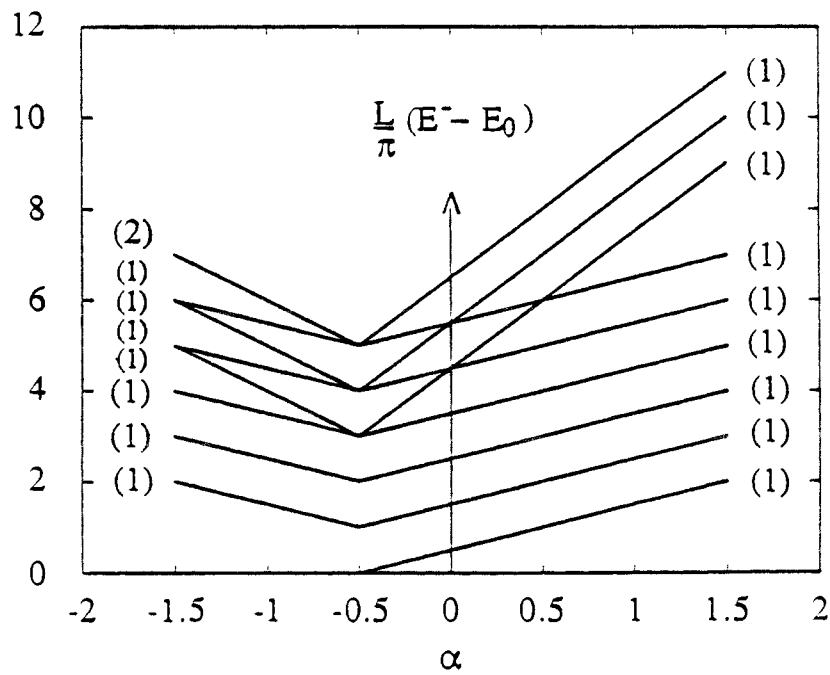


Figure 3.7

Gaps du secteur impair dans la limite continue.

Les exposants déterminés par effets de taille finie varient continûment avec l'amplitude α de la perturbation ; ils ne peuvent par conséquent pas être issus de la formule de Kac (1.75b). Celle-ci ne convient en effet qu'aux théories unitaires de la série discrète (FRIEDAN, QIU et SHENKER 1984), alors que des exposants variant continûment correspondent à une théorie de charge centrale $c \geq 1$ (CARDY 1987b, HENKEL et PATKÓS 1987a). Les dégénérescences indiquées sur les figures (3.6) et (3.7) ne peuvent donc être comparées à celles figurant dans le tableau (1.3) que lorsque $\alpha = 0$: on retrouve alors logiquement une théorie de charge centrale $1/2$ décrivant la transition de surface ordinaire.

La relation gap-exposant permet néanmoins de confirmer les comportements dominants obtenus numériquement (ou exactement dans le cas $\alpha \geq -1/2$).

- Si $\alpha \geq -1/2$

$$x_e^s = \frac{L}{\pi} (E^+(2,0) - E_0) = \frac{L}{\pi} (\Lambda_0 + \Lambda_1) = 2\alpha + 2 \quad (3.48a)$$

$$x_m^s = \frac{L}{\pi} (E^-(1,0) - E_0) = \frac{L}{\pi} \Lambda_0 = \alpha + \frac{1}{2} \quad (3.48b)$$

$$\frac{L}{\pi} (E^-(3,0) - E_0) = \frac{L}{\pi} (\Lambda_0 + \Lambda_1 + \Lambda_2) = 3\alpha + \frac{9}{2} \quad (3.48c)$$

- Si $\alpha \leq -1/2$

$$x_e^s = \frac{L}{\pi} (E_{(0)}^+(2,0) - E_0) = \frac{L}{\pi} (\Lambda_0 + \Lambda_1) = -\alpha + \frac{1}{2} \quad (3.49a)$$

$$x_m^s = \frac{L}{\pi} (E_{(0)}^-(1,0) - E_0) = \frac{L}{\pi} \Lambda_0 = 0 \quad (3.49b)$$

$$\frac{L}{\pi} (E_{(0)}^-(3,0) - E_0) = \frac{L}{\pi} (\Lambda_0 + \Lambda_1 + \Lambda_2) = -2\alpha + 2 \quad (3.49c)$$

Malgré l'absence de certaines corrections au *scaling* (*), ces résultats sont compatibles avec un comportement du modèle que l'on peut qualifier d'asymptotiquement conforme, puisque les tours régulièrement espacées n'apparaissent que dans la limite des excitations élevées.

(*) Il manque notamment une excitation décrivant l'exposant $x_m^{s'} = -\alpha - 1/2$ lorsque $\alpha \leq \alpha_c$.

Cette observation se trouve renforcée si l'on note que le modèle étudié ici ne constitue pas le modèle transformé du système semi-infini de Hilhorst et van Leeuwen. En effet, sur le système semi-infini constitué du demi-espace $\text{Im}(z) \geq 0$, $z = \rho e^{i\vartheta}$, l'écart à la température critique dans le modèle de Hilhorst et van Leeuwen est de la forme :

$$t(z) = \alpha/\ell^\gamma = \alpha(\rho \sin \vartheta)^{-\gamma}$$

Celui-ci se transforme sur ruban par la transformation habituelle

$$w = f(z) = \frac{L}{\pi} \ln z = u + iv$$

en (BURKHARDT et IGLÓI 1990) :

$$t(w) = b(z)^{\gamma_t} t(z) = |f'(z)|^{-\gamma_t} t(z) \quad (3.50)$$

soit

$$t(w) = \left(\frac{\pi\rho}{L}\right)^{\gamma_t} \alpha(\rho \sin \vartheta)^{-\gamma} \quad (3.51)$$

qui s'exprime en fonction des coordonnées du ruban en utilisant

$$\rho = \exp\left(\frac{\pi u}{L}\right) \quad \text{et} \quad \vartheta = \frac{\pi v}{L}$$

d'où :

$$t(w) = \alpha \left(\frac{\pi}{L}\right)^{\gamma_t} \exp\left[\frac{\pi u}{L}(y_t - y)\right] \left[\sin\left(\frac{\pi v}{L}\right)\right]^{-\gamma} \quad (3.52)$$

Dans le cas d'une perturbation marginale $y = y_t = 1$, l'écart à la température critique est donc de la forme :

$$t(w) = \frac{\alpha\pi}{L} \left[\sin\left(\frac{\pi v}{L}\right)\right]^{-1} \quad (3.53a)$$

et correspond dans la limite hamiltonienne à un couplage longitudinal $\lambda(\ell)$ qui s'écrit :

$$\lambda(\ell) = \lambda(\infty) \left[1 - \frac{\alpha}{\frac{L}{\pi} \sin\left(\frac{\pi v}{L}\right)}\right] \quad (3.53b)$$

Lorsque ℓ/L et $1 - \ell/L$ sont très petits devant 1, cette interaction $\lambda(\ell)$ redonne (3.12a) (Figure 3.8).

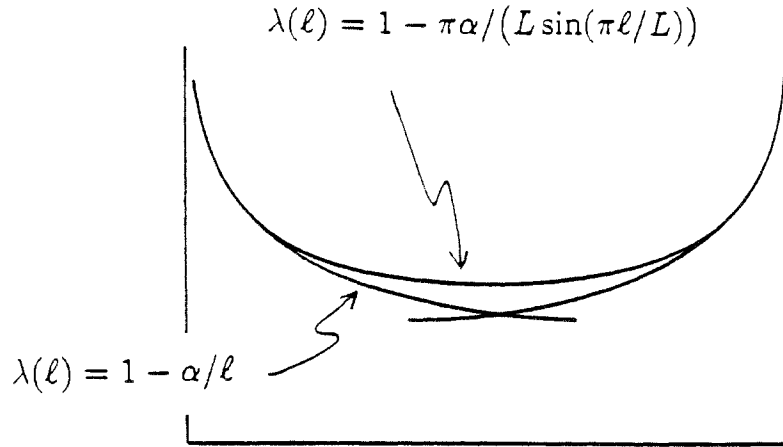


Figure 3.8

Comparaison entre les interactions

$$\lambda(\ell) = 1 - \alpha/\ell \text{ et } \lambda(\ell) = 1 - \pi\alpha/(L \sin(\pi\ell/L)).$$

Le modèle correspondant à la transformation conforme exacte (3.53b) a été étudié par Burkhardt et Iglói (1990) qui obtiennent, dans la limite continue, les résultats suivants :

$$\Lambda_k = \frac{\pi}{L}(\alpha + \frac{1}{2} + k) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad \alpha > -\frac{1}{2} \quad (3.54a)$$

$$\Lambda_0 = O(L^{-2\alpha}), \quad \Lambda_k = \frac{\pi}{L}(-\alpha + \frac{1}{2} + k - 1) \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad \alpha < -\frac{1}{2} \quad (3.54b)$$

en accord avec les expressions (3.45).

Notons enfin que la valeur particulière de l'exposant thermique x_e^* lorsque $\alpha = \alpha_c$ (soit $x_e^*(\alpha_c) = +1$) suggère l'éventualité d'un phénomène intéressant : si l'on impose à ce système déjà perturbé en volume un défaut linéaire supplémentaire en surface, ce dernier, non pertinent lorsqu'il est appliqué à un système homogène, devient ici marginal à $\alpha = \alpha_c$. On pourrait donc attendre une variation des exposants avec l'amplitude h_0 ou J_0 du défaut de surface. Celle-ci n'est cependant pas observée dans l'étude numérique effectuée par effets de taille finie (Figure 3.9) ou par invariance conforme (Figure 3.10). Ces figures présentent les résultats de calculs numériques sur des chaînes de $L = 80$ à 180 spins puis extrapolés à taille infinie. Ce phénomène sera discuté à la lumière d'observations effectuées au paragraphe suivant.

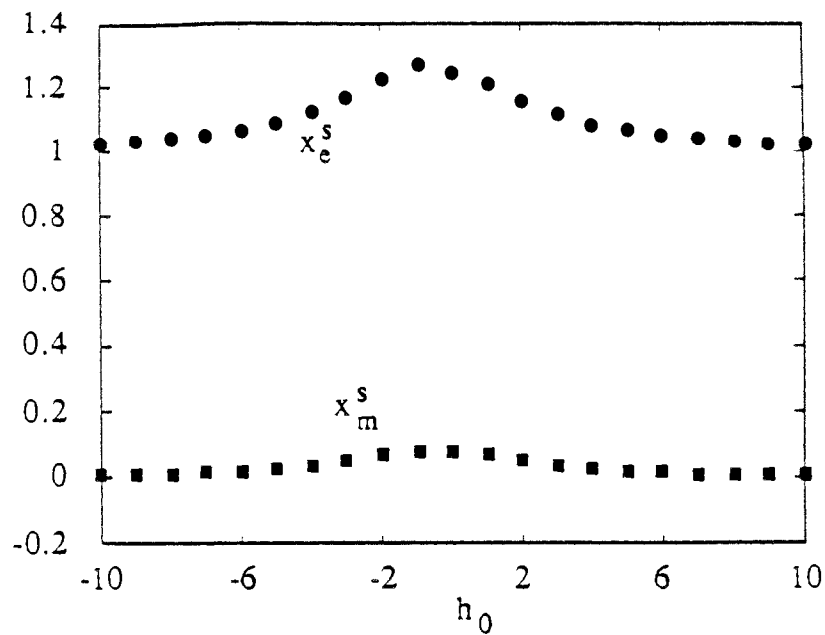


Figure 3.9

Exposants magnétique et thermique du modèle inhomogène perturbé par un défaut localisé h_0 (effets de taille finie).

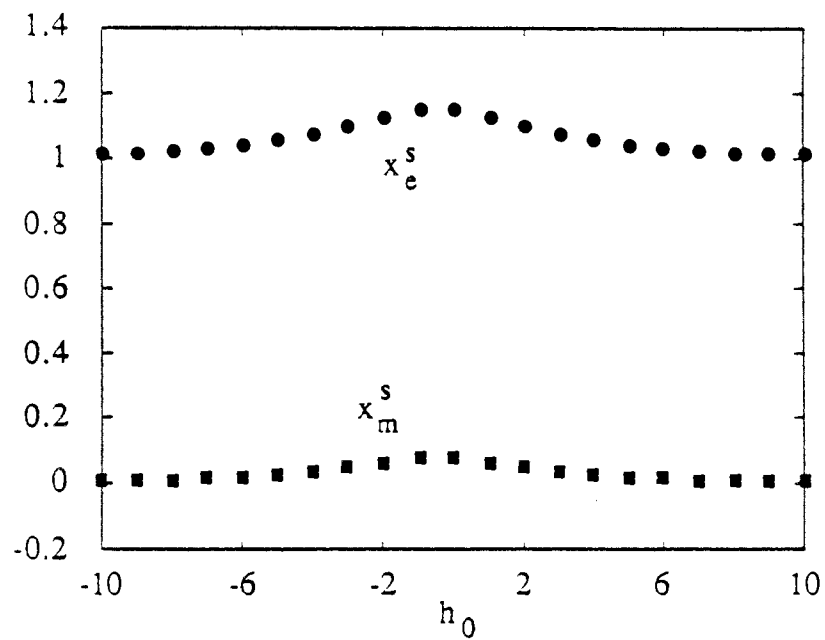


Figure 3.10

Exposants magnétique et thermique du modèle inhomogène perturbé par un défaut localisé h_0 (relation gap-exposant).

3. Inhomogénéité spatiale décroissant depuis un défaut linéaire en volume

3.1 Présentation du modèle et résultats numériques

Dans le modèle précédent, l'inhomogénéité spatiale était causée par la présence d'une surface libre dans le système. On généralise maintenant ce type de perturbation au cas d'un défaut linéaire en volume à l'origine de l'inhomogénéité spatiale. Ce modèle a été étudié dans un travail commun avec Ferenc Iglói (IGLÓI, BERCHE et TURBAN 1990).

Les propriétés critiques sont déterminées par effets de taille finie sur un ruban périodique avec une ligne de défauts depuis laquelle décroissent des interactions du type Hilhorst-van Leeuwen, ce qui restitue dans la limite thermodynamique un système bidimensionnel infini. Celui-ci est projeté par la transformation conforme $f(z) = \frac{L}{2\pi} \ln z$ sur un ruban avec conditions périodiques présentant deux lignes de défauts et des interactions modifiées du type Burkhardt-Iglói. C'est sur ce dernier système qu'est effectuée l'étude des propriétés critiques par invariance conforme (Figure 3.11) (*).

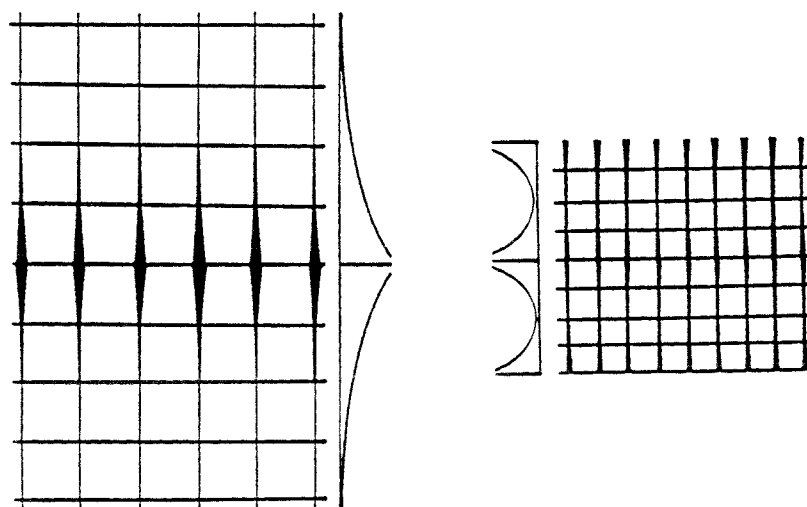


Figure 3.11

*Transformation des interactions du type Hilhorst-van Leeuwen
en interactions du type Burkhardt-Iglói.*

(*) On évite ainsi le passage à un spectre asymptotique.

Dans la limite anisotrope extrême, pour une chaîne de L spins avec conditions périodiques, l'hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^L \left(\sigma_z(\ell) - \lambda(\infty) \Delta_1(\ell) \sigma_x(\ell) \sigma_x(\ell+1) \right) \quad (3.55a)$$

$$\sigma_x(L+1) = \sigma_x(1) \quad (3.55b)$$

avec des interactions qui sont dans le premier cas de la forme suivante :

$$\begin{cases} \Delta_1(\ell) = 1 - \frac{\alpha}{\ell} & 1 \leq \ell \leq \frac{L}{2} \\ \Delta_2(\ell) = 1 - \frac{\alpha}{L - \ell + 1} & \frac{L}{2} + 1 \leq \ell \leq L \end{cases} \quad L = 2p \quad (3.56)$$

et dans le second :

$$\begin{cases} \Delta_1(\ell) = 1 - \frac{2\pi\alpha}{L} \left[\sin \frac{2\pi\ell}{L} \right]^{-1} & 1 \leq \ell \leq \frac{L}{4} \\ \Delta_2(\ell) = 1 - \frac{2\pi\alpha}{L} \left[\sin \frac{2\pi}{L} \left(\frac{L}{2} - \ell + 1 \right) \right]^{-1} & \frac{L}{4} + 1 \leq \ell \leq \frac{L}{2} \\ \Delta_3(\ell) = 1 - \frac{2\pi\alpha}{L} \left[\sin \frac{2\pi}{L} \left(\frac{L}{2} + \ell \right) \right]^{-1} & \frac{L}{2} + 1 \leq \ell \leq \frac{3L}{4} \\ \Delta_4(\ell) = 1 - \frac{2\pi\alpha}{L} \left[\sin \frac{2\pi}{L} (L - \ell + 1) \right]^{-1} & \frac{3L}{4} + 1 \leq \ell \leq L \end{cases} \quad L = 4p \quad (3.57)$$

La présence du terme non local dans l'hamiltonien après transformation de Jordan-Wigner nécessite l'introduction des opérateurs $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ de secteurs pair ($q = 0$) et impair ($q = 1$), que l'on diagonalise par la méthode habituelle.

Le calcul des éléments de matrice n'impliquant que le secteur pair (opérateurs d'énergie) est effectué numériquement avec l'hamiltonien $\tilde{\mathcal{H}}(0)$ qui contient alors toute l'information nécessaire. L'exposant du défaut x_e^d obtenu par effets de taille finie sur des chaînes de $L = 60$ à 160 spins avec des interactions de la forme (3.56)

$$e_{01}^z(\ell) \sim e_{01}^{xz}(\ell) \sim L^{-x_e^d} \quad (3.58)$$

est extrapolé à taille infinie (Figure 3.12 où les croix correspondent aux éléments de matrice $e_{01}^z(1)$ et les carrés à ceux de $e_{01}^{xz}(1,2)$). Comme dans le cas du système avec

conditions de bords libres, la convergence des résultats est suffisante pour conjecturer l'expression analytique :

$$x_e^d = 1 + 2 |\alpha| \quad (3.59)$$

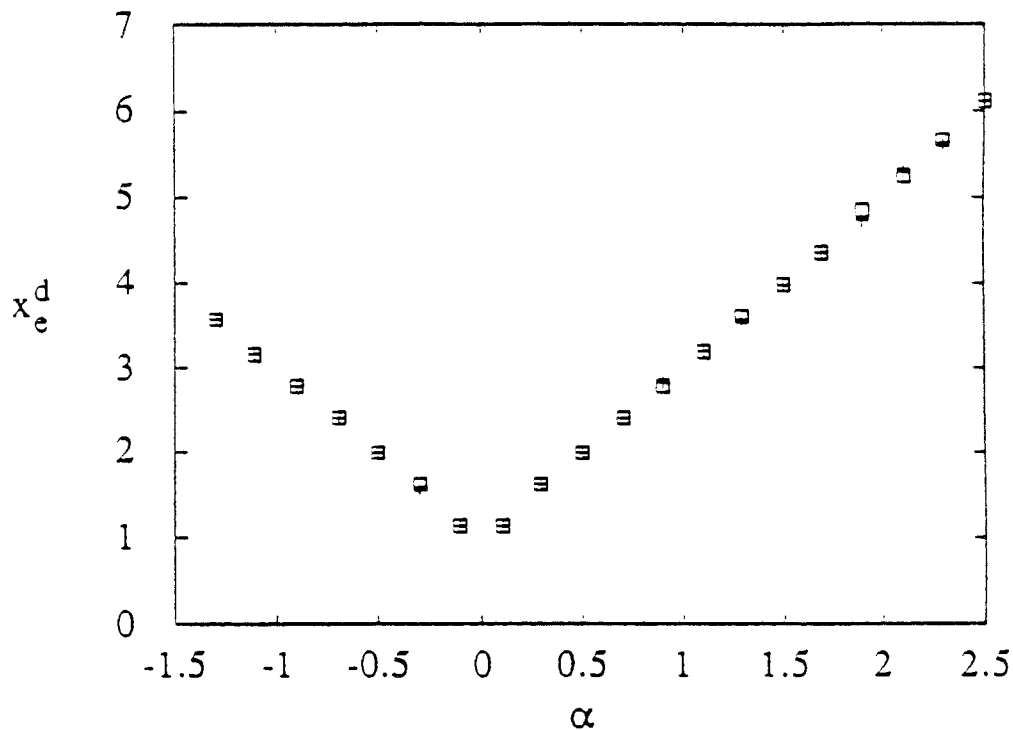


Figure 3.12

Exposant thermique obtenu par effets de taille finie.

Le calcul de l'aimantation en revanche est effectué par tridiagonalisation sur des chaînes de petites tailles ($L = 4$ à 16). Si l'extrapolation est cette fois moins précise, on peut tout de même suggérer l'expression des exposants magnétiques pour les faibles perturbations (α proche de 0) ; précisons que les points anguleux sont mal décrits par les résultats numériques qui rendent difficilement compte des singularités (Figure 3.13) (*) :

(*) Il apparaît que les résultats (3.59) et (3.60), confirmés analytiquement au paragraphe 3.2, sont partiellement en contradiction avec ceux de Bariev obtenus sur le modèle bidimensionnel (BARIEV 1989, BARIEV et MALOV 1989).

$$x_m^d = \frac{1}{2} + \alpha \quad \text{si } \alpha > 0 \quad (3.60a)$$

$$x_m^d = 0, \quad x_m^{d'} = -2\alpha \quad \text{si } \alpha < 0 \quad (3.60b)$$

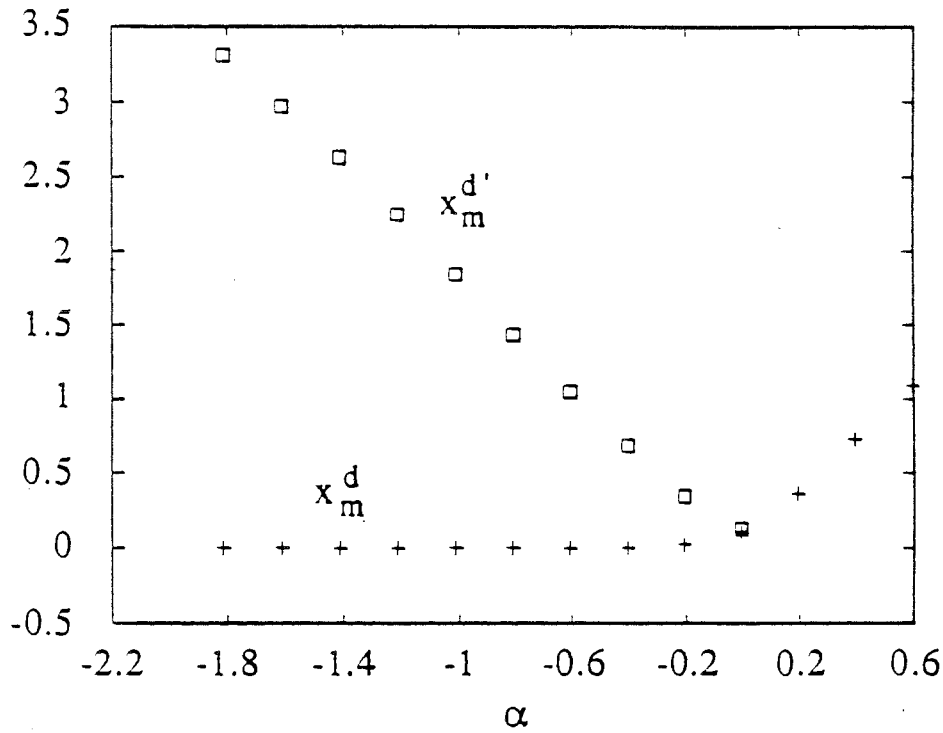


Figure 3.13

Exposant magnétique et correction au scaling.

Il faut noter ici une différence qualitative entre les expressions (3.59) et (3.60). En effet, si (3.59) est valable dans le cas d'un système non perturbé ($\alpha = 0$) où l'on retrouve $x_e = 1$, ce n'est pas le cas de (3.60a) qui ne redonne pas $x_m = 1/8$ pour $\alpha = 0$. Cela suggère l'existence d'une discontinuité de l'exposant magnétique à $\alpha = 0$ bien qu'elle ne soit pas évidente sur la figure (3.13a). Nous verrons dans la discussion comment cette discontinuité est liée aux propriétés du secteur impair du spectre de l'hamiltonien.

Ces exposants doivent être comparés à ceux que l'on obtient numériquement à partir de l'amplitude des gaps avec des interactions de la forme (3.57). Il faut pour

cela tenir compte du changement de parité de l'état fondamental de $\tilde{\mathcal{H}}(1)$ d'énergie $E_0(1)$ avec le signe de α . La figure (3.14) présente la comparaison des spectres obtenus numériquement par tridiagonalisation et par construction à partir des hamiltoniens pair et impair $\tilde{\mathcal{H}}(0)$ et $\tilde{\mathcal{H}}(1)$ pour une chaîne de taille $L = 8$ avec a) $\alpha = +0.5$, b) $\alpha = -0.5$.

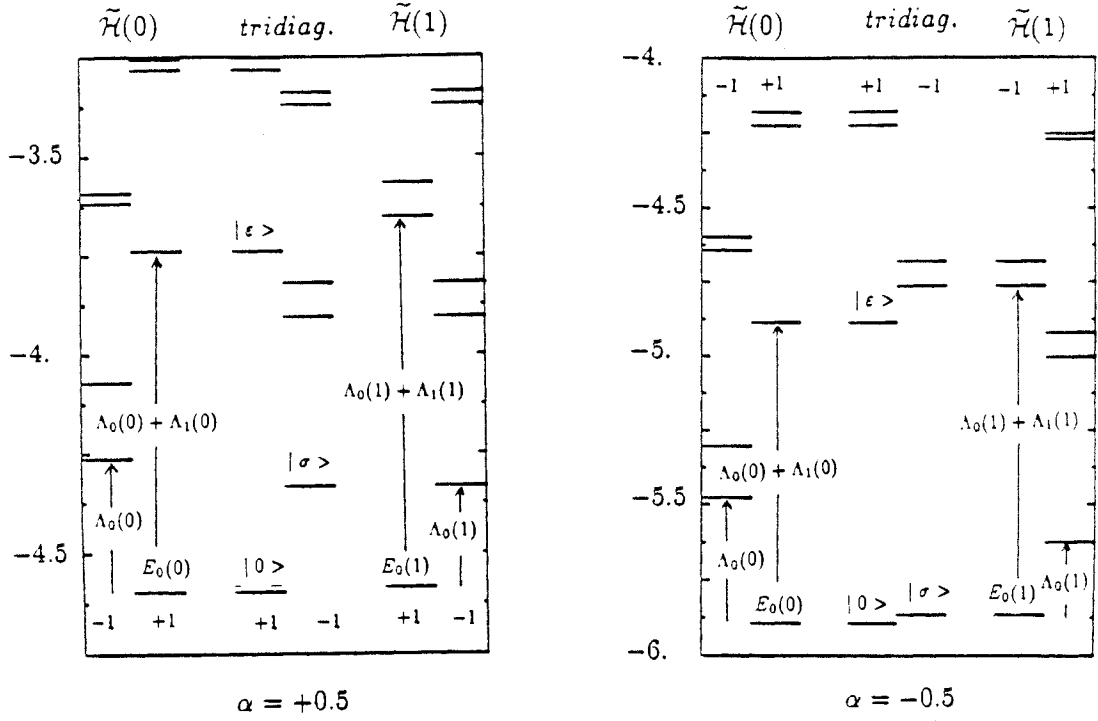


Figure 3.14.

*Construction des états propres de $\mathcal{H}$
à partir des excitations paires et impaires dans les cas $\alpha > 0$ et $\alpha < 0$.*

On définit les exposants de la façon suivante :

$$\frac{2\pi}{L}x_e^d = E_e - E_0 = \Lambda_0(0) + \Lambda_1(0) \quad (3.61a)$$

$$\frac{2\pi}{L}x_m^d = E_\sigma - E_0 = \begin{cases} E_0(1) + \Lambda_0(1) - E_0(0) & \text{si } \alpha > 0 \\ E_0(1) - E_0(0) & \text{si } \alpha < 0 \end{cases} \quad (3.61b)$$

Ils confirment numériquement les expressions (3.59) et (3.60) et, en particulier, l'éventualité d'une discontinuité de l'exposant magnétique.

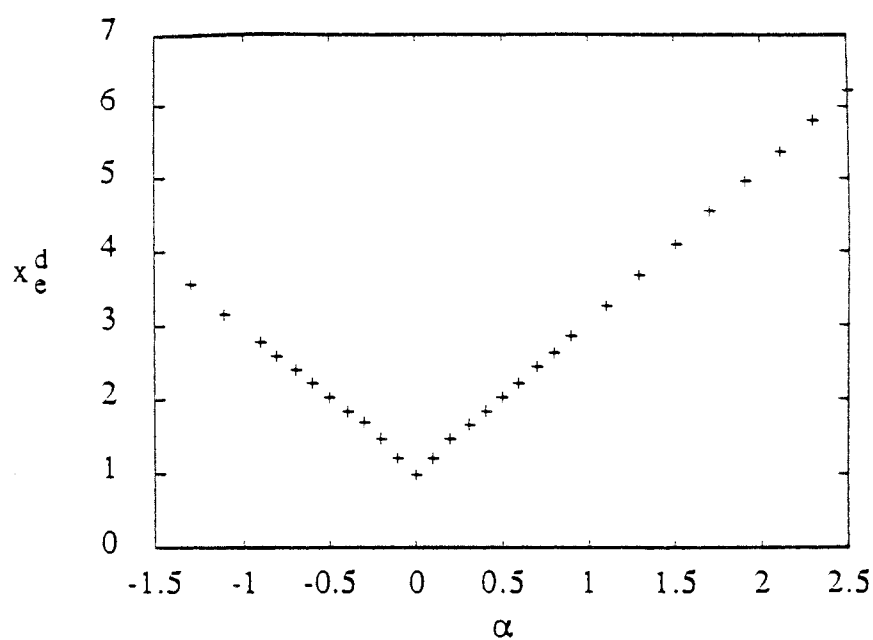


Figure 3.15

*Exposant thermique déduit de la relation gap-exposant
puis extrapolé à taille infinie.*

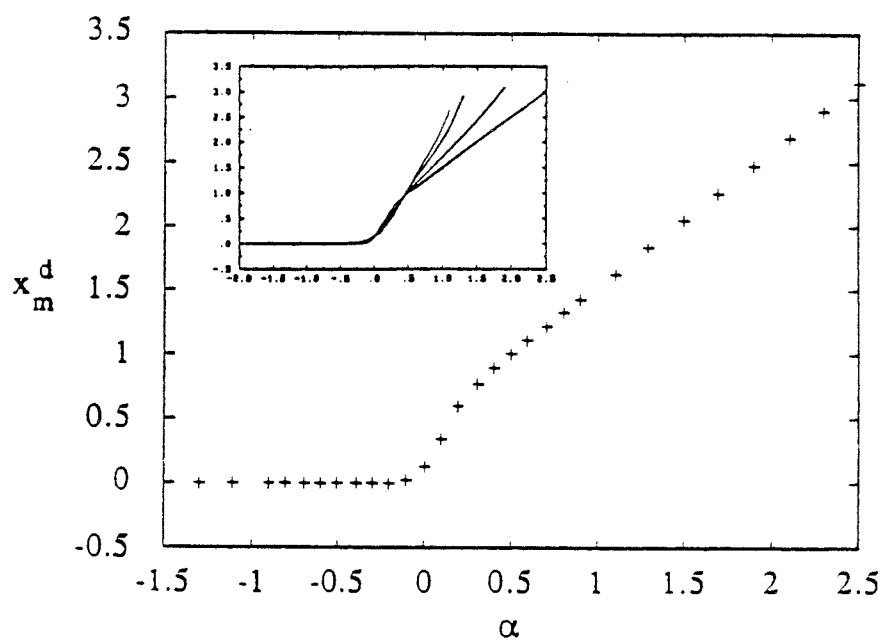


Figure 3.16

*Exposant magnétique déduit de la relation gap-exposant
puis extrapolé à taille infinie.*

La figure (3.15) présente l'extrapolation à taille infinie de l'exposant thermique calculé pour des chaînes de 80 à 160 spins.

La figure (3.16) reproduit de même l'exposant magnétique et les courbes insérées mettent en évidence l'évolution avec la taille ($L = 16, 20, 40, \infty$) vers une discontinuité en $\alpha = 0$.

3.2 Spectre d'excitation dans la limite continue

Le spectre exact est déterminé dans la limite continue (IGLÓI, BERCHE et TURBAN 1990) en adoptant une démarche analogue à celle utilisée pour le système semi-infini (BURKHARDT et IGLÓI 1990).

L'hamiltonien est donné par (3.55a) avec des interactions du type Burkhardt-Iglói :

$$\Delta(\ell) = \lambda(\infty) \left(1 - \frac{\alpha}{\frac{L}{2\pi} \left| \sin \frac{2\pi(\ell - \delta)}{L} \right|} \right) \quad (3.62)$$

où δ est introduit pour éviter une divergence de la perturbation. Les conditions périodiques exigent une diagonalisation séparée de chaque secteur de parité $\tilde{\mathcal{H}}(q)$. Les expressions matricielles

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_k = \Lambda_k \Psi_k$$

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B})\Psi_k = \Lambda_k \Phi_k$$

sont écrites sous la forme :

$$\phi_k(\ell) + \Delta(\ell)\phi_k(\ell + 1) = -\Lambda_k \psi_k(\ell) \quad (3.63a)$$

$$\Delta(\ell)\psi_k(\ell) + \psi_k(\ell + 1) = -\Lambda_k \phi_k(\ell + 1) \quad (3.63b)$$

pour $2 \leq \ell \leq L - 1$, avec les conditions aux limites :

$$-(-1)^q \Delta(L)\phi_k(1) + \phi_k(L) = -\Lambda_k \psi_k(L) \quad (3.64a)$$

$$-(-1)^q \Delta(L)\psi_k(L) + \psi_k(1) = -\Lambda_k \phi_k(1) \quad (3.64b)$$

Dans la limite continue, on pose

$$z = \frac{2\pi\ell}{L}, \quad 0 \leq z \leq 2\pi$$

$$\varphi_k(z) = (-1)^\ell \phi_k(\ell)$$

avec une notation analogue pour $\psi_k(z)$ et

$$\varepsilon_k = \frac{\Lambda_k L}{2\pi}$$

Les équations aux différences finies (3.63) deviennent, à l'ordre dominant en $1/L$, des équations différentielles couplées :

$$\varphi'_k(z) - \frac{\alpha}{|\sin z|} \varphi_k(z) = \varepsilon_k \psi_k(z) \quad (3.65a)$$

$$\psi'_k(z) + \frac{\alpha}{|\sin z|} \psi_k(z) = -\varepsilon_k \varphi_k(z) \quad (3.65b)$$

avec les conditions aux limites

$$\varphi_k(z) = 0 \quad \text{en } z = 0, z = \pi, z = 2\pi \quad (3.66a)$$

$$\psi_k(z) = 0 \quad \text{en } z = 0, z = \pi, z = 2\pi \quad (3.66b)$$

Les équations (3.65) sont rassemblées en une équation différentielle unique du second ordre :

$$\varphi''_k(z) - \frac{\alpha^2 - \alpha \cos z}{\sin^2 z} \Theta(z) \varphi_k(z) + \varepsilon_k^2 \varphi_k(z) = 0 \quad (3.67)$$

où

$$\Theta(z) = \frac{\sin z}{|\sin z|} \quad (3.68)$$

Comme l'équation (3.67) est invariante par la translation

$$z \longrightarrow z + \pi$$

les valeurs propres ε_k^2 sont doublement dégénérées dans chaque secteur de parité.

Dans le domaine $\pi < z < 2\pi$, $\Theta(z) = -1$ et l'équation (3.67) a alors la même forme que dans le cas du problème avec conditions de bords libres (BURKHARDT et IGLÓI 1990) :

$$\frac{d^2 \varphi_k}{dz^2} - \left(\frac{\alpha^2 + \alpha \cos z}{\sin^2 z} - \varepsilon_k^2 \right) \varphi_k(z) = 0 \quad (3.69)$$

Il en est de même des conditions aux limites qui peuvent être réécrites :

$$\varphi_k(z) = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (3.70a)$$

$$\psi_k(z) = \frac{1}{\varepsilon_k} \left(\varphi'_k(z) - \frac{\alpha}{|\sin z|} \varphi_k(z) \right) = 0 \quad \text{en } z = \pi \quad (3.70b)$$

$$\varphi_k(z) = 0 \quad \text{en } z = \pi \quad (3.70c)$$

La dernière condition (3.70c) permet de sélectionner parmi les solutions possibles celles qui sont non divergentes. L'équation aux valeurs propres (3.69) est transformée en une équation hypergéométrique par le changement de variable suivant :

$$\varphi_k(z) = \cos^\alpha(z/2) \sin^{\alpha+1}(z/2) y(t) \quad (3.71a)$$

où

$$t = \sin^2(z/2) \quad (3.71b)$$

On obtient :

$$t(1-t)y''(t) + (c - (a+b+1)t)y'(t) - aby(t) = 0 \quad (3.72a)$$

avec

$$a = \alpha + 1/2 + \varepsilon_k, \quad b = \alpha + 1/2 - \varepsilon_k, \quad c = \alpha + 3/2 \quad (3.72b)$$

et les solutions générales sont de la forme :

$$y(t) = C_1 F(a, b, c; t) + C_2 t^{1-c} F(a-c+1, b-c+1, 2-c; t) \quad (3.73)$$

où $F(a, b, c; t)$ désigne une fonction hypergéométrique (ABRAMOWITZ et STEGUN 1970). Les conditions aux limites sont satisfaites par l'ensemble de valeurs propres :

$$|\Lambda_k| = \frac{2\pi}{L} \left(|\alpha| + \frac{1}{2} + k \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad \alpha \neq 0$$

Pour tenir compte de la dégénérescence double systématique liée à l'invariance par translation de π dans le cas du système périodique, on écrit :

$$|\Lambda_k| = \frac{2\pi}{L} \left[|\alpha| + \frac{1}{2} + E\left(\frac{k}{2}\right) \right], \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad \alpha \neq 0 \quad (3.74)$$

où $E(x)$ désigne la partie entière de x .

Les excitations (3.74) sont identiques dans les deux secteurs de parité $q = 0, 1$ lorsque $\alpha \neq 0$, ce que l'on confirme par extrapolation des résultats numériques ($L = 80, 160$) sur la figure (3.17). Les excitations impaires $\Lambda_k(1)$ présentent une discontinuité lorsque α s'annule (Figure 3.17b). Ce n'est en revanche pas le cas des excitations paires et (3.74) reste alors valable en $\alpha = 0$ (Figure 3.17a).

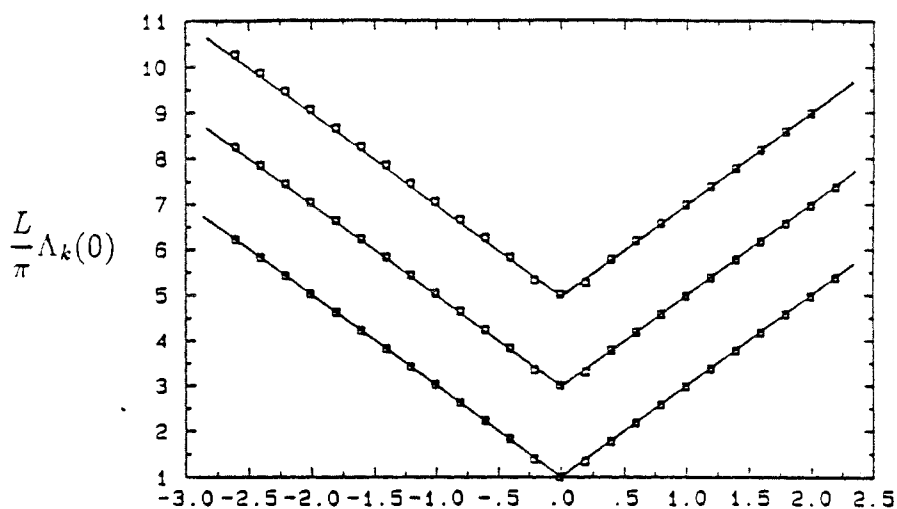


Figure 3.17a

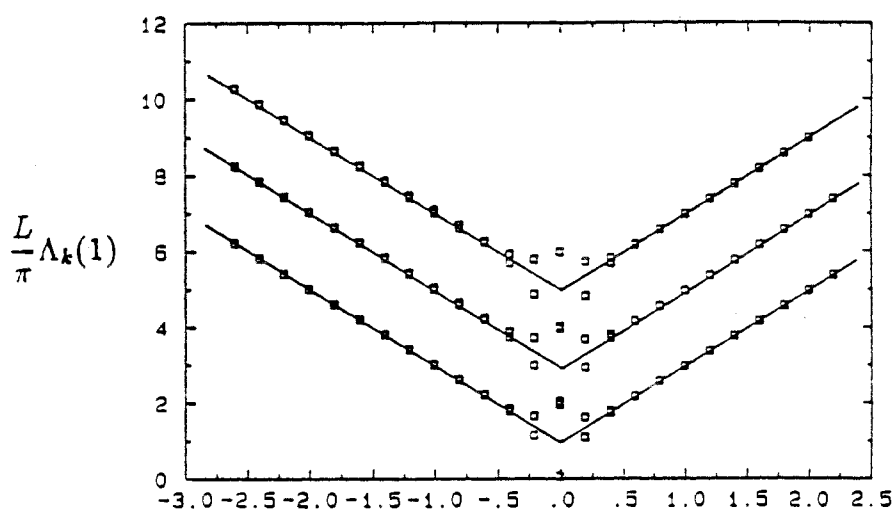


Figure 3.17b

Figure 3.17

Spectre d'excitation des secteurs pair et impair.

Sur ces figures, les traits pleins correspondent à la limite continue et les croix aux résultats numériques extrapolés. Là encore, les résultats numériques rendent difficilement compte de la discontinuité en $\alpha = 0$.

Notons l'existence d'une excitation négative dans le secteur impair ($q = 1$) lorsque $\alpha < 0$. En effet, l'expression de l'excitation la plus basse du secteur impair dans le cas du système homogène, $\Lambda_0 = (1 - \lambda)$, suggère par continuité que Λ_0 devienne négative lorsque $\lambda > \lambda_c = 1$. Un comportement analogue est obtenu ici avec $\alpha_c = 0$. L'apparition d'une excitation négative est liée, comme on l'a vu, au changement de parité de l'état fondamental $E_0(1)$ avec le signe de α (Figure 3.14). Lorsque $\alpha < 0$, $E_0(1)$ est impair et correspond au premier état excité impair de $\mathcal{H}$ noté E_σ , alors que lorsque $\alpha > 0$, $E_0(1)$ est pair et on obtient E_σ grâce à une excitation supplémentaire : $E_0(1) + \Lambda_0(1)$.

Mentionnons enfin le résultat d'un calcul en perturbation dû à Iglói (IGLÓI, BERCHE et TURBAN 1990) montrant que les énergies des états fondamentaux de chaque secteur $E_0(0)$ et $E_0(1)$ sont asymptotiquement dégénérées :

$$E_0(1) - E_0(0) \sim L^{-1-4|\alpha|} \quad (3.75)$$

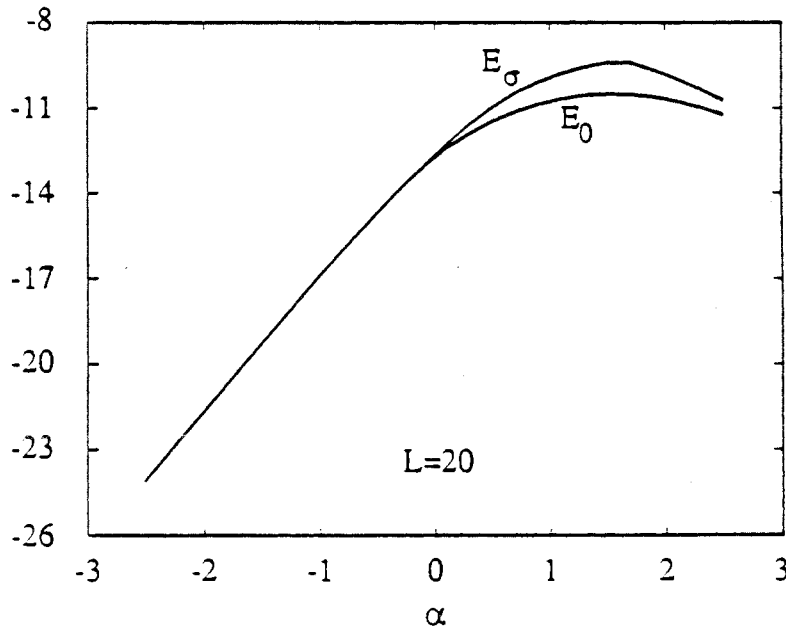


Figure 3.18

Dégénérescence de l'état fondamental dans la phase ordonnée.

Dans le spectre de l'hamiltonien $\mathcal{H}$, la fermeture du gap $E_\sigma - E_0$ lorsque $\alpha < 0$ caractérise l'apparition de l'ordre sur le défaut et l'existence d'une transition du premier ordre. La figure (3.18) reproduit les variations de $E_\sigma - E_0$ en fonction de α pour une chaîne de $L = 20$ spins.

3.3 Discussion

Le spectre du modèle est construit à partir des excitations (3.74).

• Dans le secteur pair, et pour toute valeur de α , les états excités s'obtiennent grâce à un nombre pair d'excitations égal à $2n$. Les gaps correspondants s'écrivent :

$$\frac{L}{2\pi}(E^+(2n, k) - E_0) = 2n|\alpha| + n^2 + k$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.76)$$

La figure (3.19) met en évidence la symétrie du secteur pair par rapport à $\alpha = 0$ et le tableau (3.5) présente les premiers gaps.

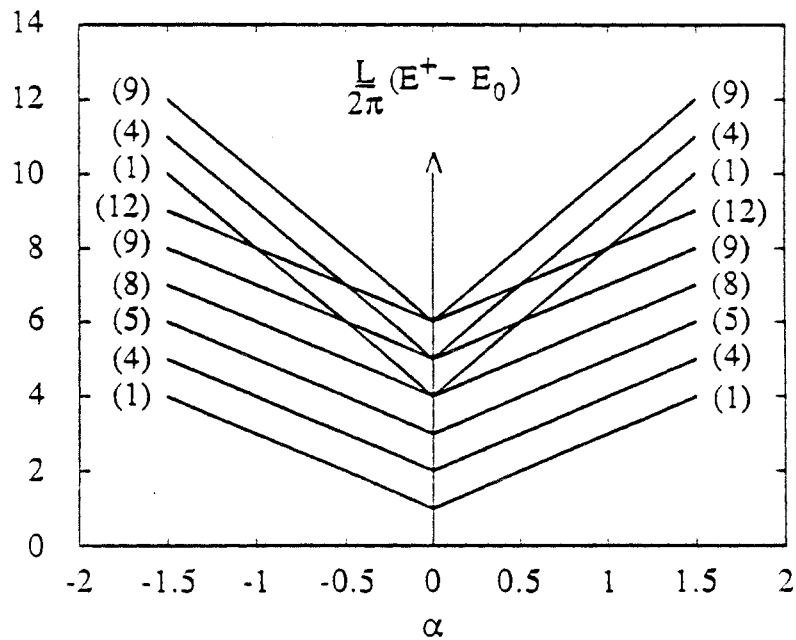


Figure 3.19

Secteur pair du spectre pour le modèle périodique.

Les dégénérescences sont indiquées entre parenthèses.

Nombre d'excitations	2	4	6
Premiers gaps	$2 \alpha + 1$	$4 \alpha + 4$	$6 \alpha + 9$
	$2 \alpha + 2$	$4 \alpha + 5$	$6 \alpha + 10$
	$2 \alpha + 3$	$4 \alpha + 6$	$6 \alpha + 11$
	...	...	...

Tableau 3.5

Premiers gaps du secteur pair pour le modèle périodique.

- Dans le secteur impair, l'expression (3.76) reste valable lorsque $\alpha < 0$. On utilise $2n$ excitations pour générer les niveaux impairs, soit :

$$\frac{L}{2\pi} (E^-(2n, k) - E_0) = 2n|\alpha| + n^2 + k$$

$$(\alpha < 0) \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.77a)$$

A ces niveaux excités s'ajoute bien sûr $E_0(1)$ lui-même. Pour $\alpha > 0$ en revanche, un nombre impair $(2n - 1)$ d'excitations est nécessaire pour restituer les niveaux impairs à partir du fondamental $E_0(1)$ pair :

$$\frac{L}{2\pi} (E^-(2n - 1, k) - E_0) = (2n - 1)\alpha + \frac{n^2 + (n - 1)^2}{2} + k$$

$$(\alpha > 0) \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.77b)$$

Les premiers gaps correspondants à (3.77b) ($\alpha > 0$) sont rassemblés dans le tableau (3.6).

Nombre d'excitations	1	3	5
Premiers gaps	$\alpha + 1/2$	$3\alpha + 5/2$	$5\alpha + 13/2$
	$\alpha + 3/2$	$3\alpha + 7/2$	$5\alpha + 15/2$
	$\alpha + 5/2$	$3\alpha + 9/2$	$5\alpha + 17/2$
	...	...	...

Tableau 3.6

Premiers gaps du secteur impair ($\alpha > 0$) pour le modèle périodique.

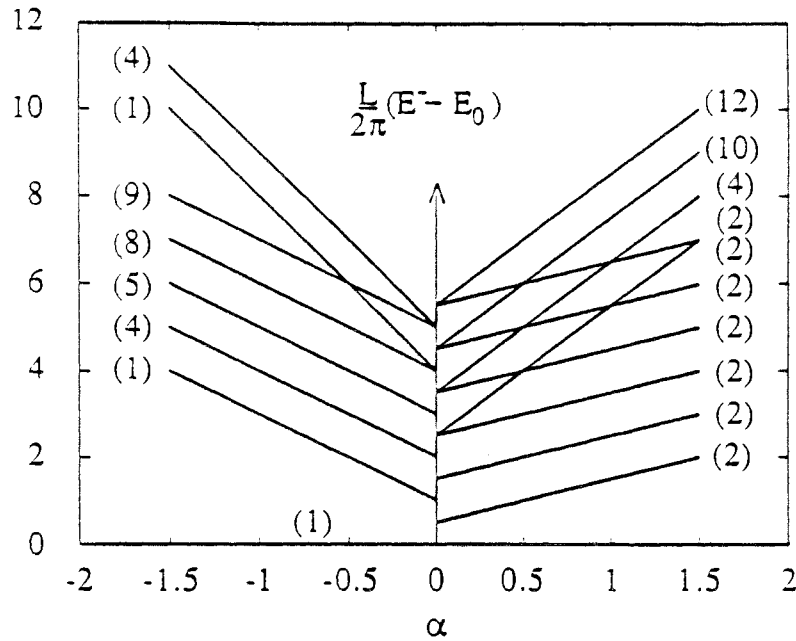


Figure 3.20

*Secteur impair du spectre pour le modèle périodique.
Les dégénérescences sont indiquées entre parenthèses.*

La figure (3.20) présente le secteur impair du spectre en fonction de α (3.77a et b) avec, en particulier, la discontinuité des niveaux d'énergie en $\alpha = 0$. La limite $\alpha = 0$, qui correspond au modèle périodique homogène, redonne le spectre et les dégénérescences présentés au chapitre 1 (Figures 3.19 et 3.20).

L'expression des gaps étant établie, discutons tout d'abord le cas du secteur magnétique (impair) pour lequel on dispose des résultats numériques d'effets de taille finie obtenus par tridiagonalisation (Figure 3.6) et des résultats d'invariance conforme dans le formalisme fermionique.

Lorsque $\alpha < 0$, le gap $E_0(1) - E_0(0)$ décroît plus rapidement que L^{-1} . Ceci caractérise l'existence d'une aimantation spontanée à l'interface ($x_m^d = 0$), la transition est alors du premier ordre. On observe un comportement analogue en surface dans le modèle avec conditions de bords libres lorsque $\alpha < -1/2$. Si l'on poursuit l'analogie entre ces deux systèmes, on peut conjecturer pour l'exposant

x_m^d décrivant la décroissance des corrélations dans la phase ordonnée la valeur correspondant au premier gap manquant dans le spectre et qui s'annule à $\alpha_c = 0$, soit :

$$x_m^d = 2 |\alpha| \quad (3.78a)$$

Cette valeur, bien qu'absente de la tour conforme, est en effet le résultat (3.60b) suggéré par les calculs de tridiagonalisation (Figure 3.4b).

Le spectre présente par ailleurs une discontinuité en $\alpha = 0$ et, lorsque $\alpha > 0$, la transition est du second ordre, caractérisée par un exposant magnétique x_m^d (premier gap de l'expression (3.77b)) :

$$x_m^d = \alpha + \frac{1}{2} \quad (3.78b)$$

Cet exposant est identique à celui qui décrit le comportement de surface, puisque le spectre complet est construit à partir de l'ensemble dédoublé des excitations obtenues pour le problème semi-infini.

Le secteur de l'énergie (pair) est identique pour α positif ou négatif et continu en $\alpha = 0$. Le premier gap de l'expression (3.76) conduit à la dimension de l'opérateur énergie

$$x_e^d = 1 + 2 |\alpha| \quad (3.79)$$

obtenue par ailleurs numériquement par effets de taille finie.

On peut envisager la présence d'une perturbation supplémentaire h_0 (champ transverse) sur le site d'interface. On sait en effet que dans ce cas, si $\alpha = 0$, l'exposant magnétique varie continûment avec h_0 , alors que l'exposant de l'énergie reste égal à 1 (BARIEV 1979, Mc COY et PERK 1980). Dans le modèle perturbé à grande distance, un tel défaut localisé supplémentaire est caractérisé par une dimension

$$y_{\delta g} = 1 - x_e^d = -2 |\alpha|$$

et s'avère non pertinent sauf lorsque α est nul où il devient marginal. Nous avons vérifié, par une étude numérique utilisant la relation gap-exposant, que l'influence d'une telle perturbation supplémentaire h_0 n'est sensible qu'au voisinage de $\alpha = 0$ dans le secteur magnétique (Figure 3.21).

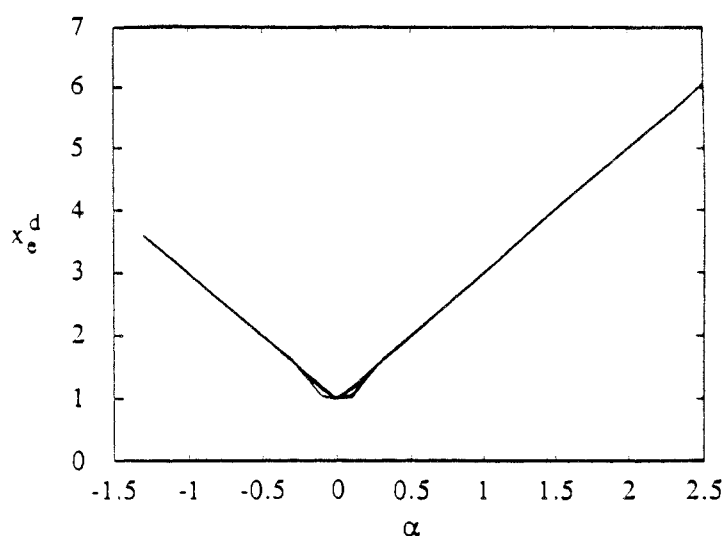


Figure 3.21a

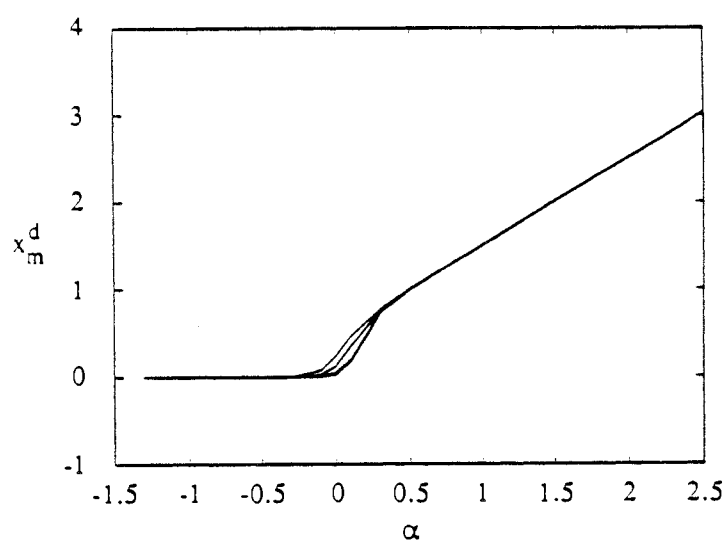


Figure 3.21b

Figure 3.21

Exposants thermique et magnétique déduits de la relation gap-exposant pour un système inhomogène périodique perturbé par un défaut linéaire localisé à l'interface.

Notons néanmoins que les limites de la discontinuité de l'exposant x_m^d en $\alpha = 0$ ($\lim_{\alpha \rightarrow 0^-} x_m^d = 0$; $\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} x_m^d = 1/2$) correspondent aux limites de variation en fonction de h_0 de l'exposant magnétique du défaut linéaire. En effet, dans la limite hamiltonienne, on a (PESCHEL et SCHOTTE 1984, GUIMARAËS et DRUGOWICH DE

FELÍCIO 1986) :

$$x_m^d = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{\pi} \arctan h_0 \right)^2 \quad (3.80)$$

qui varie précisément entre 0 et 1/2 lorsque h_0 varie entre 0 et ∞ . On constate ainsi que la discontinuité du spectre dans le secteur impair coïncide avec l'existence d'une variation de l'exposant x_m^d pour le défaut linéaire. De même, l'exposant thermique du défaut linéaire, égal à 1, coïncide avec la continuité du spectre dans le secteur pair.

Par ailleurs, dans le modèle inhomogène avec conditions de bords libres étudié précédemment, nous avons envisagé la présence d'un défaut linéaire en surface supplémentaire. On avait alors constaté, là aussi, une coïncidence entre la continuité des deux secteurs de parité du spectre et l'absence de variation des exposants x_m^s et x_e^s .

Il semblerait donc qu'il existe une corrélation entre les propriétés de continuité du spectre et le marginalisme des exposants.

Notons enfin que la valeur critique α_c , nécessaire à la mise en ordre du défaut (surface ou interface), dépend des conditions aux limites choisies. Avec conditions périodiques, dès que le couplage dépasse la valeur critique $\lambda(\ell) = 1$, soit $\alpha < \alpha_c = 0$, l'interface s'ordonne. Avec conditions de bords libres, les couplages doivent être renforcés pour compenser les liaisons coupées en surface ($\alpha_c = -1/2$).

4. Chaîne quantique XY inhomogène

4.1 Chaîne XY avec conditions de bords libres

Le modèle inhomogène étudié précédemment peut être étendu au cas de chaînes quantiques reliées au modèle d'Ising. C'est le cas de la chaîne quantique XY dont l'hamiltonien s'écrit, pour un système avec conditions de bords libres :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N-1} \left[J_x(n) \sigma_x(n) \sigma_x(n+1) + J_y(n) \sigma_y(n) \sigma_y(n+1) \right] \quad (3.81)$$

où $N = 2L$. La transformation de Jordan-Wigner permet d'écrire cet hamiltonien sous forme quadratique (LIEB, SCHULTZ et MATTIS 1961). Il est ensuite diagonalisé

par la méthode habituelle :

$$\Lambda_\phi \Phi_k = \Lambda_k^2 \Phi_k$$

et l'on peut écrire la matrice des excitations Λ_ϕ en deux blocs distincts de dimension $L \times L$ en séparant les composantes paires et impaires :

$$\Lambda_\phi = \begin{pmatrix} \Lambda^{(imp.)} & 0 \\ 0 & \Lambda^{(pair)} \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

où $\Lambda^{(imp.)}$ (respectivement $\Lambda^{(pair)}$) décrit une chaîne d'Ising de L spins avec conditions de bords libres et avec des couplages longitudinaux $j(k) = J_x(2k)$ (respectivement $j(k) = J_y(2k)$) et des champs transverses $h(k) = J_y(2k - 1)$ (respectivement $h(k) = J_x(2k - 1)$) (Figure 3.22).

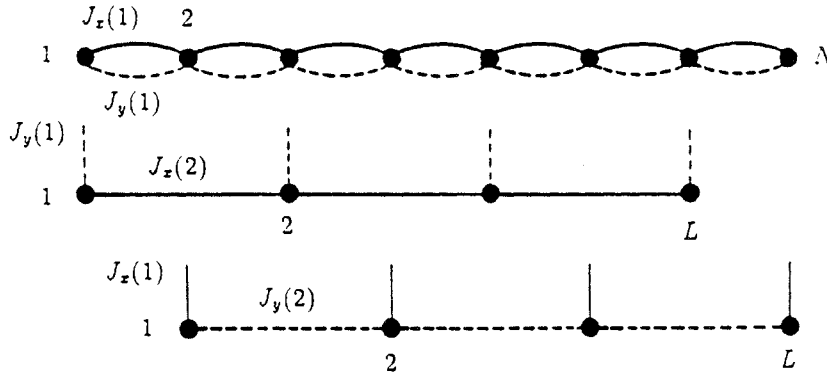


Figure 3.22

Découplage d'une chaîne XY en deux chaînes d'Ising.

Ce découplage de la chaîne XY en deux chaînes d'Ising indépendantes peut également être mis en évidence par une transformation de dualité (JULLIEN et FIELDS 1978, PENSON, JULLIEN et PFEUTY 1982, PESCHEL et SCHOTTE 1984), les opérateurs duaux

$$\begin{aligned} \tau_z(n) &= \sigma_y(n)\sigma_y(n+1) & \mu_z(2n) &= \tau_x(2n-2)\tau_x(2n) \\ \tau_z(N) &= \sigma_y(N) & \text{et} & \mu_z(2) = \tau_x(2) \\ \tau_x(n) &= \prod_{k=1}^n \sigma_x(k) & \mu_x(2n) &= \prod_{k=n}^{N/2} \tau_z(2k) \end{aligned} \quad (3.83)$$

permettant d'écrire :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(imp.)} + \mathcal{H}^{(pair)}$$

où

$$\mathcal{H}^{(imp.)} = -\frac{1}{2} \left[\sum_{\ell=1}^L J_y(2\ell-1) \tau_z(2\ell-1) + \sum_{\ell=1}^{L-1} J_x(2\ell) \tau_x(2\ell-1) \tau_x(2\ell+1) \right] \quad (3.84a)$$

$$\mathcal{H}^{(pair)} = -\frac{1}{2} \left[\sum_{\ell=1}^L J_x(2\ell-1) \mu_z(2\ell) + \sum_{\ell=1}^{L-1} J_y(2\ell) \mu_x(2\ell) \mu_x(2\ell+2) \right] \quad (3.84b)$$

en accord avec la figure (3.22).

Les opérateurs de charge définissant les secteurs de parité sur les chaînes duales s'expriment en fonction des anciens opérateurs :

$$Q^{(imp.)} = \prod_{\ell=1}^L \tau_z(2\ell-1) = \prod_{\ell=1}^N \sigma_y(\ell) = Q_y \quad (3.85a)$$

$$Q^{(pair)} = \prod_{\ell=1}^L \mu_z(2\ell) = \prod_{\ell=1}^N \sigma_x(\ell) = Q_x \quad (3.85b)$$

Comme l'hamiltonien (3.81) commute avec ces deux opérateurs, on classe ses états selon les quatre secteurs de parité de la chaîne XY : $Q_x = \pm 1$, $Q_y = \pm 1$ et l'on définit les éléments de matrice nécessaires au calcul des propriétés critiques conformément à ces secteurs.

- Les opérateurs d'énergie $\sigma_x(n)\sigma_x(n+1)$ et $\sigma_y(n)\sigma_y(n+1)$ commutent tous deux avec Q_x et Q_y ; on définit donc dans le secteur correspondant les quantités :

$$E_{xx}(n, n+1) = \langle 0 | \sigma_x(n) \sigma_x(n+1) | ++ \rangle \quad (3.86a)$$

$$E_{yy}(n, n+1) = \langle 0 | \sigma_y(n) \sigma_y(n+1) | ++ \rangle \quad (3.86b)$$

où $|0\rangle$ désigne l'état fondamental de $\mathcal{H}$ et où $|\pm\pm\rangle$ correspond au premier état excité dans le secteur $Q_x = \pm 1$, $Q_y = \pm 1$.

- Pour les opérateurs d'aimantation, on définit de même :

$$M_x(n) = \langle 0 | \sigma_x(n) | +- \rangle \quad (3.86c)$$

$$M_y(n) = \langle 0 | \sigma_y(n) | -+ \rangle \quad (3.86d)$$

• Dans le dernier secteur enfin, $Q_x = Q_y = -1$, on calcule les éléments de matrice de l'opérateur $\sigma_z(n)$:

$$S_z(n) = \langle 0 | \sigma_z(n) | -- \rangle \quad (3.86e)$$

Dans le formalisme fermionique, (3.86b) et (3.86d) s'écrivent :

$$M_y(N) = \phi_k(N) \quad (3.87a)$$

$$E_{yy}(n, n+1) = \phi_k(n)\psi_{k'}(n+1) - \phi_{k'}(n)\psi_k(n+1) \quad (3.87b)$$

Considérons maintenant le cas d'une chaîne inhomogène symétrique définie par l'hamiltonien (3.81) avec des interactions du type Hilhorst-van Leeuwen :

$$\left. \begin{aligned} J_x(n) &= 1 - \alpha/n \\ J_y(n) &= 1 - \beta/n \end{aligned} \right\} \quad 1 \leq n \leq L \quad (3.88a)$$

$$\left. \begin{aligned} J_x(n) &= 1 - \alpha/(N-n) \\ J_y(n) &= 1 - \beta/(N-n) \end{aligned} \right\} \quad L+1 \leq n \leq N \quad (3.88b)$$

La transformation de dualité donne des chaînes d'Ising avec des couplages et champs transverses de la forme $1 - \alpha'/\ell$ et $1 - \beta'/\ell$, avec $\alpha' = \alpha/2$ et $\beta' = \beta/2$ (3.84).

Avec les interactions (3.88), on obtient des résultats exacts à l'ordre dominant en $1/N$ par la méthode appliquée précédemment à la chaîne d'Ising (cf paragraphe 2.1). L'équation aux valeurs propres est réécrite en deux séries d'équations aux différences finies pour les composantes impaires et paires. En négligeant de plus le terme en Λ_k^2 , on obtient :

$$\begin{aligned} \phi(2k+1) &= (-1)^k \prod_{\ell=1}^k \frac{J_y(2\ell-1)}{J_x(2\ell)} \phi(1) \\ \phi(N-2k) &= (-1)^k \prod_{\ell=1}^k \frac{J_x(2\ell-1)}{J_y(2\ell)} \phi(N) \end{aligned}$$

et, pour simplifier le calcul, on choisit des interactions asymétriques étendues à l'ensemble de la chaîne, ce qui conduit aux résultats :

$$\phi(1) \simeq \frac{\Gamma(1-\beta)2^\beta \sqrt{1+\alpha-\beta}}{\Gamma(1-\alpha/2)\Gamma(1-\beta/2)} \left(\frac{N}{2}\right)^{-\frac{\alpha-\beta+1}{2}} \quad \text{si } \alpha - \beta \geq -1 \quad (3.89a)$$

$$\phi(N) \simeq \frac{\Gamma(1-\alpha)2^\alpha\sqrt{1+\beta-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha/2)\Gamma(1-\beta/2)}\left(\frac{N}{2}\right)^{-\frac{\beta-\alpha+1}{2}} \quad \text{si } \alpha - \beta \leq +1 \quad (3.89b)$$

soit, pour les éléments de matrice (3.86), les comportements suivants :

$$M_x(1) \sim N^{-\frac{\alpha-\beta+1}{2}} \quad \alpha - \beta \geq -1 \quad (3.90a)$$

$$M_y(N) \sim N^{-\frac{\beta-\alpha+1}{2}} \quad \alpha - \beta \leq +1 \quad (3.90b)$$

d'où l'on déduit ensuite :

$$E_{xx}(1,2) \sim E_{yy}(2,3) \sim N^{-(\beta-\alpha+2)} \quad \alpha - \beta \leq +1 \quad (3.90c)$$

$$E_{yy}(1,2) \sim E_{xx}(2,3) \sim N^{-(\alpha-\beta+2)} \quad \alpha - \beta \geq -1 \quad (3.90d)$$

$$S_z(1) \sim N^{-1} \quad -1 \leq \alpha - \beta \leq +1 \quad (3.90e)$$

Les résultats numériques confirment ces valeurs et les complètent. Les figures (3.23) à (3.25) présentent respectivement les exposants associés aux grandeurs M_x et M_y , E_{xx} et E_{yy} , S_z . Ceux-ci ont été obtenus par extrapolation des résultats d'effets de taille finie sur des chaînes comportant $N = 80$ à 200 spins et avec $\beta = 0$.

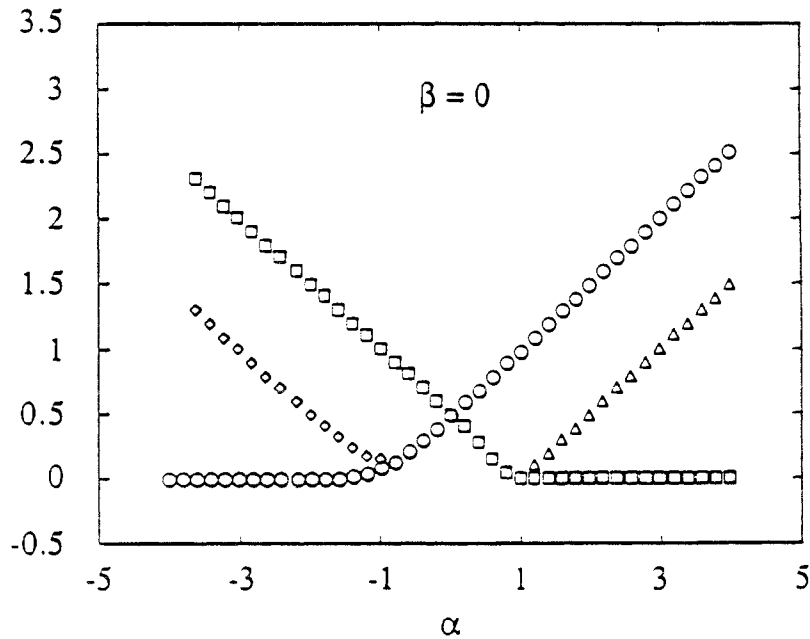


Figure 3.23

Variation des exposants associés aux grandeurs M_x et M_y .

Sur la figure (3.23) sont rassemblés les exposants associés à $M_x(1)$ (cercles) et à $M_y(1)$ (carrés) ainsi qu'à leurs corrections au *scaling* respectives (losanges et triangles).

Sur la figure (3.24), carrés et losanges donnent les exposants de $E_{xx}(2,3)$ et $E_{yy}(1,2)$, alors que cercles et croix correspondent à $E_{xx}(1,2)$ et $E_{yy}(2,3)$.

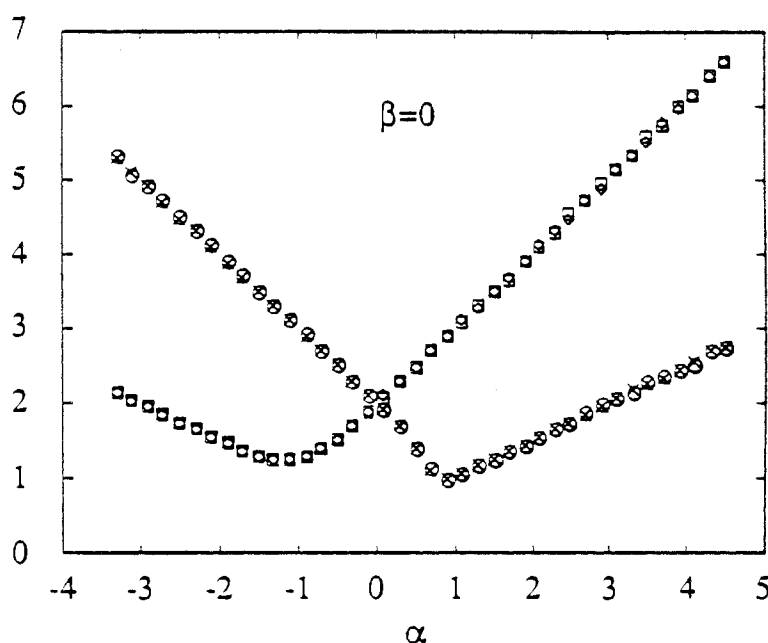


Figure 3.24

Variation des exposants associés aux grandeurs E_{xx} et E_{yy} .

La figure (3.25) représente l'exposant associé à $S_z(1)$.

Ces résultats sont rassemblés dans le tableau (3.7) où l'on donne le comportement dominant de l'opérateur indiqué dans la colonne de gauche en fonction des valeurs de $\alpha - \beta$.

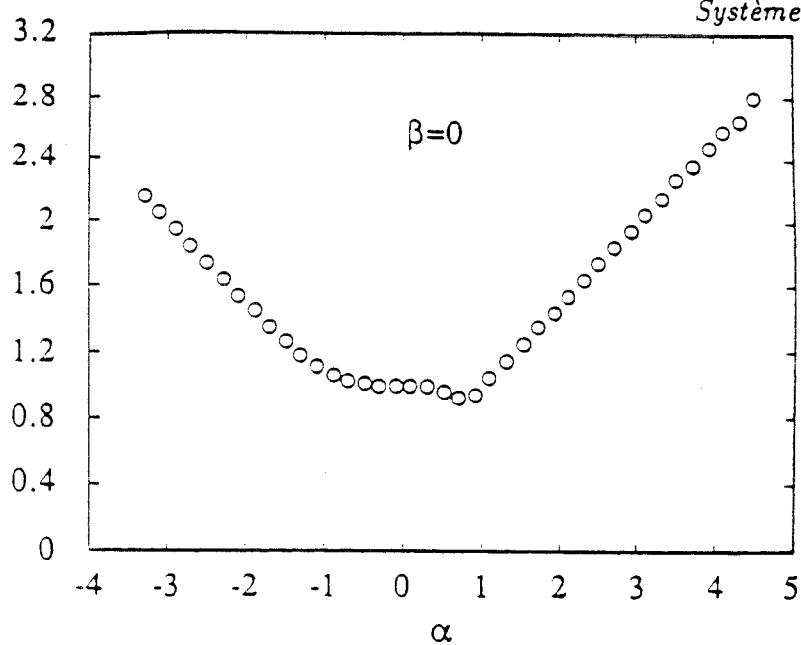


Figure 3.25

Variation de l'exposant associé à la grandeur S_z .

$\alpha - \beta$	$\alpha - \beta < -1$	$-1 < \alpha - \beta < 1$	$\alpha - \beta > 1$
$M_x(1)$	0	$\frac{\alpha - \beta + 1}{2}$	$\frac{\alpha - \beta + 1}{2}$
correction	$-\frac{\alpha - \beta + 1}{2}$		
$M_y(1)$	$\frac{\beta - \alpha + 1}{2}$	$\frac{\beta - \alpha + 1}{2}$	0
correction			$-\frac{\beta - \alpha + 1}{2}$
$\left. \begin{matrix} E_{xx}(1,2) \\ E_{yy}(2,3) \end{matrix} \right\}$	$\beta - \alpha + 2$	$\beta - \alpha + 2$	$\frac{\alpha - \beta + 1}{2}$
$\left. \begin{matrix} E_{xx}(2,3) \\ E_{yy}(1,2) \end{matrix} \right\}$	$\frac{\beta - \alpha + 1}{2}$	$\alpha - \beta + 2$	$\alpha - \beta + 2$
$S_z(1)$	$\frac{\beta - \alpha + 1}{2}$	1	$\frac{\alpha - \beta + 1}{2}$

Tableau 3.7

Exposants critiques de la chaîne XY quantique.

Les transformations de dualité (3.83) fournissent l'explication de ces résultats par la correspondance entre les opérateurs σ_x , σ_y de la chaîne XY et les opérateurs τ_x , τ_z et μ_x , μ_z des chaînes duales d'Ising.

L'opérateur $\sigma_x(1)$, par exemple, correspond à l'aimantation de surface de la chaîne d'Ising impaire $\tau_x(1)$, alors que $\sigma_y(N)$ est l'aimantation de surface de la chaîne paire $\mu_x(N)$. De même, $\sigma_x(1)\sigma_x(2)$ et $\sigma_y(2)\sigma_y(3)$ correspondent à l'énergie de surface de la chaîne paire, alors que $\sigma_x(2)\sigma_x(3)$ et $\sigma_y(1)\sigma_y(2)$ correspondent à celle de la chaîne impaire.

Cette correspondance établie, on explique la dépendance des exposants critiques en $\alpha - \beta$ en considérant l'une des chaînes d'Ising duales dans la limite continue et en notant les couplages et champs transverses sous leur forme modifiée par transformation conforme :

$$j(\ell) = 1 - \frac{\alpha'}{\frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi \ell}{L}} \quad (3.91a)$$

$$h(\ell) = 1 - \frac{\beta'}{\frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi \ell}{L}} \quad (3.91b)$$

où α' et β' sont reliés aux caractéristiques de la chaîne initiale par :

$$\alpha' = \alpha/2 \quad \text{et} \quad \beta' = \beta/2 \quad (3.92)$$

En posant $z = \ell/L$ et $\varphi(\ell) = (-1)^\ell \phi(\ell)$ (cf paragraphe 2.1), les équations aux valeurs propres (3.63) conduisent à l'ordre dominant en $1/L$ à l'équation différentielle :

$$\varphi''(z) + \left((\pi L)^2 - \frac{(\alpha' - \beta')^2 + (\alpha' - \beta') \cos \pi z}{\sin^2 \pi z} \right) \varphi(z) = 0 \quad (3.93)$$

où l'on reconnaît l'équation (3.69) avec $\alpha' - \beta'$ remplaçant α . Les conditions aux limites (3.64) s'écrivent de même :

$$\varphi(z) = 0 \quad \text{en} \quad z = 0 \quad (3.94a)$$

$$\frac{(\alpha' - \beta')\pi}{\sin \pi z} \varphi(z) + \varphi'(z) = 0 \quad \text{en} \quad z = 1 \quad (3.94b)$$

et sont elles aussi analogues à (3.70). Les excitations d'une chaîne d'Ising inhomogène à la fois par ses couplages et ses champs transverses se déduisent alors simplement

des expressions (3.45) en changeant α en $\alpha' - \beta'$. On revient ensuite aux excitations de la chaîne XY initiale, soit :

$$\Lambda_k^{(pair)} = \frac{\pi}{N} \left(\frac{\beta - \alpha + 1}{2} + k \right) \quad k = 0, 1, \dots, \alpha - \beta \leq +1 \quad (3.95a)$$

$$\Lambda_0^{(pair)} = 0, \quad \Lambda_{k+1}^{(pair)} = \frac{\pi}{N} \left(\frac{\alpha - \beta + 1}{2} + k \right) \quad k = 0, 1, \dots, \alpha - \beta \geq +1 \quad (3.95b)$$

$$\Lambda_k^{(imp.)} = \frac{\pi}{N} \left(\frac{\alpha - \beta + 1}{2} + k \right) \quad k = 0, 1, \dots, \alpha - \beta \geq -1 \quad (3.95c)$$

$$\Lambda_0^{(imp.)} = 0, \quad \Lambda_{k+1}^{(imp.)} = \frac{\pi}{N} \left(\frac{\beta - \alpha + 1}{2} + k \right) \quad k = 0, 1, \dots, \alpha - \beta \leq -1 \quad (3.95d)$$

Notons que le cas particulier d'une inhomogénéité de même forme en couplage et en champ transverse, $\alpha' = \beta'$, redonne l'équation différentielle d'une chaîne homogène (PFEUTY 1979). Il lui correspond ainsi les exposants du système non perturbé.

Les excitations permettent de retrouver les comportements dominants présentés dans le tableau (3.7) grâce à la relation gap-exposant.

<i>Elément de matrice</i>	<i>Expression du gap</i>
$M_x(1)$	$\frac{N}{\pi} \Lambda_0^{(imp.)}$
$M_y(1)$	$\frac{N}{\pi} \Lambda_0^{(pair)}$
$\left. \begin{array}{l} E_{xx}(1,2) \\ E_{yy}(2,3) \end{array} \right\}$	$\frac{N}{\pi} \left(\Lambda_0^{(pair)} + \Lambda_1^{(pair)} \right)$
$\left. \begin{array}{l} E_{xx}(2,3) \\ E_{yy}(1,2) \end{array} \right\}$	$\frac{N}{\pi} \left(\Lambda_0^{(imp.)} + \Lambda_1^{(imp.)} \right)$
$S_z(1)$	$\frac{N}{\pi} \left(\Lambda_0^{(pair)} + \Lambda_0^{(imp.)} \right)$

Tableau 3.8

Gaps de la chaîne XY.

Considérons par exemple le cas de $M_x(1)$. Cet élément de matrice fait intervenir un état excité appartenant au sous-espace associé aux valeurs propres de charge $Q_x = Q^{(pair)} = 1$ et $Q_y = Q^{(imp.)} = -1$, construit en ajoutant à l'état

fondamental (provenant du secteur pair-pair) une excitation $\Lambda^{(imp.)}$. On en déduit que le gap associé à $M_x(1)$ vaut $(N/\pi)\Lambda_0^{(imp.)}$.

Les gaps correspondant aux différents éléments de matrice sont regroupés dans le tableau (3.8). Ils sont compatibles avec les comportements dominants présentés dans le tableau (3.7).

Le spectre d'excitation déterminé numériquement sur une chaîne XY de $N = 160$ spins avec $\beta = 0$ est en accord avec les expressions (3.95) (Figure 3.26).

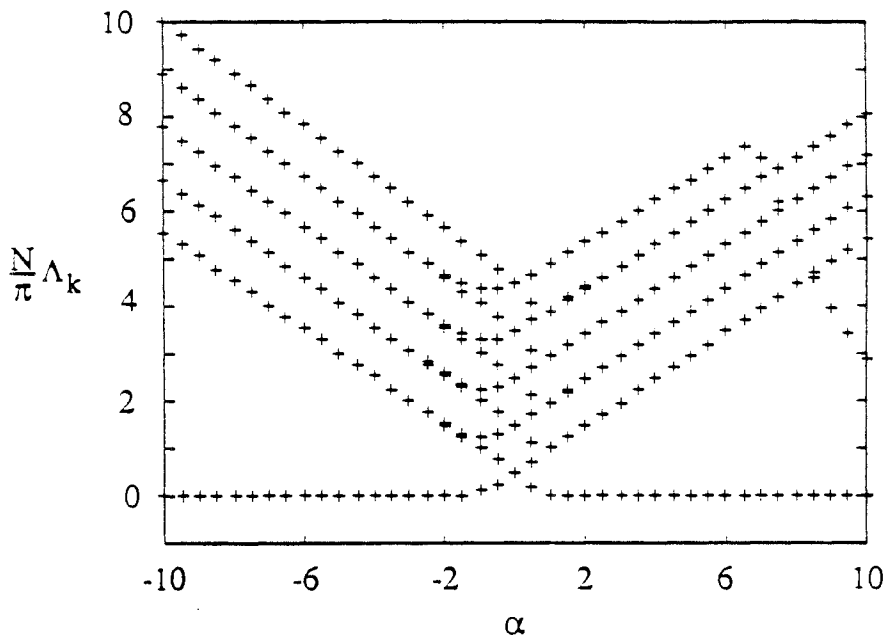


Figure 3.26

Spectre d'excitations de la chaîne XY avec conditions de bords libres.

Les exposants présentés sur les figures (3.23) à (3.25) peuvent être tracés pour des valeurs non nulles de β . La figure (3.27) présente à titre d'exemple les exposants magnétiques en fonction de α lorsque $\beta = -1$. On y reconnaît l'allure de la figure (3.23) simplement décalée vers la gauche. Lorsque $\alpha = \beta = -1$, ces exposants redonnent la valeur $1/2$ du système non perturbé.

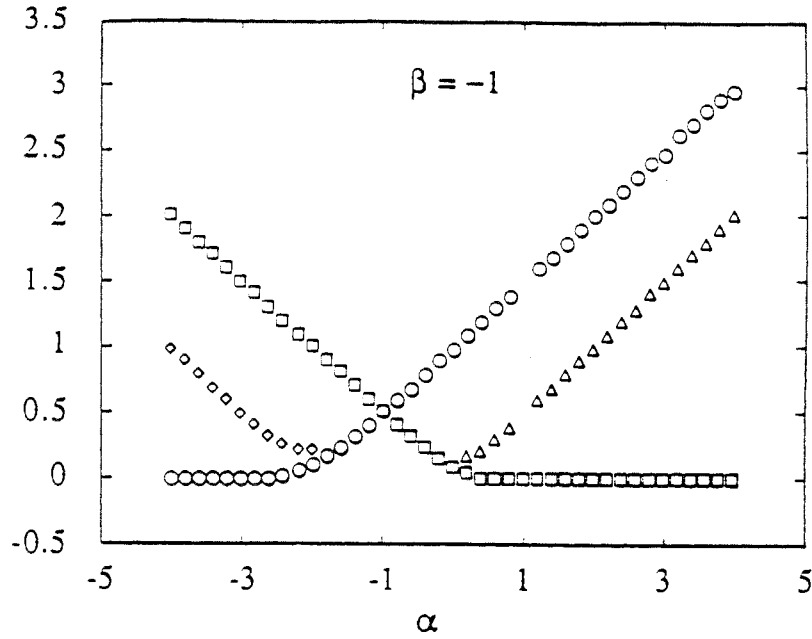


Figure 3.27

Exposants magnétiques en fonction de α pour une chaîne XY inhomogène ($\beta = -1$).

4.2 Chaîne XY avec conditions périodiques

L'étude précédente peut être poursuivie dans le cas d'une chaîne XY avec conditions périodiques. La séparation de la matrice des excitations en deux blocs distincts persiste et l'on en déduit les excitations quatre fois dégénérées de la chaîne XY :

$$|\Lambda_k(q, r)| = \frac{4\pi}{N} \left[\frac{1}{2}(\alpha - \beta) + \frac{1}{2} + E\left(\frac{k}{4}\right) \right] \\ k = 0, 1, 2, \dots, \quad |\alpha - \beta| \neq 0 \quad (3.96)$$

où q et r définissent les secteurs de parité $Q_x = (-1)^q$, $Q_y = (-1)^r$.

Les douze premières excitations de chaque secteur pour une chaîne de $N = 100$ spins sont tracées sur les figures (3.28) et (3.29).

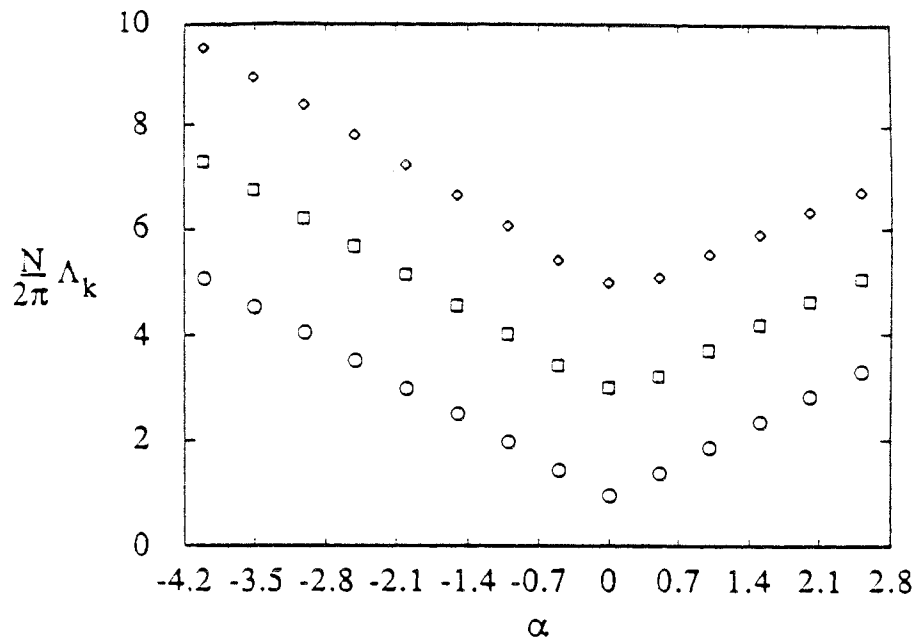


Figure 3.28

Excitations du modèle XY périodique inhomogène ($q = r = 0$).

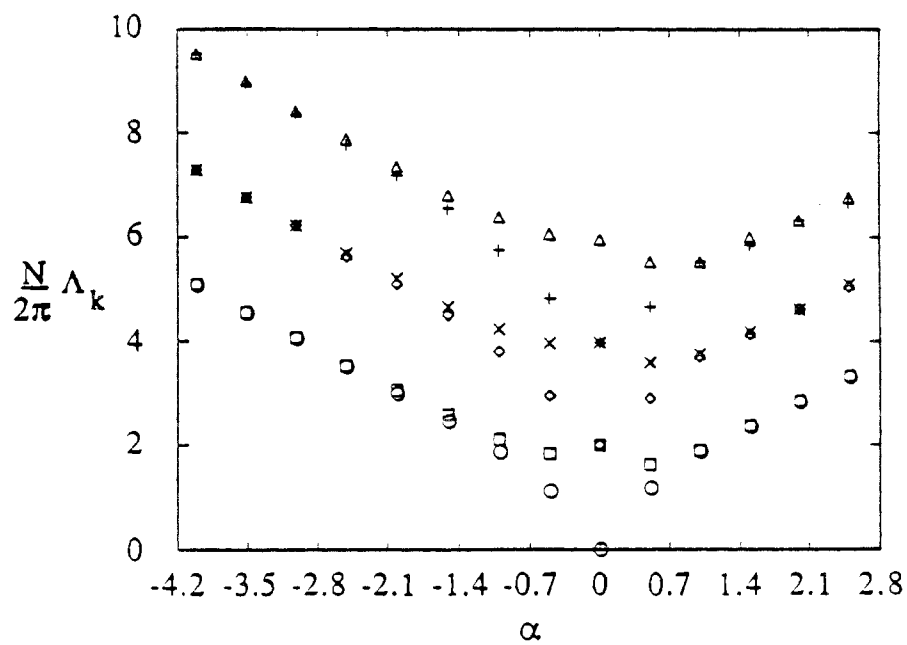


Figure 3.28

Excitations du modèle XY périodique inhomogène ($q = r = 1$).

La discussion se ramène à la précédente. Les premiers gaps, en particulier, conduisent par la relation gap-exposant aux comportements indiqués dans le tableau (3.9).

<i>Opérateur</i>	<i>Gap associé</i>	<i>Exposant</i>
$\sigma_x \sigma_x$	$\frac{N}{2\pi} (\Lambda_0(0,0) + \Lambda_1(0,0))$	$ \alpha - \beta + 1$
$\sigma_y \sigma_y$	$\frac{N}{2\pi} (\Lambda_2(0,0) + \Lambda_3(0,0))$	$ \alpha - \beta + 1$
σ_x	$\frac{N}{2\pi} \Lambda_0(1,0)$	$\begin{matrix} \frac{1}{2}(\alpha - \beta + 1) & \alpha > \beta \\ 0 & \alpha < \beta \end{matrix}$
σ_y	$\frac{N}{2\pi} \Lambda_0(0,1)$	$\begin{matrix} \frac{1}{2}(\beta - \alpha + 1) & \alpha < \beta \\ 0 & \alpha > \beta \end{matrix}$
σ_z	$\frac{N}{2\pi} (\Lambda_0(1,1) + \Lambda_1(1,1))$	$ \alpha - \beta + 1$

Tableau 3.9

Comportement critique de la chaîne XY périodique inhomogène.

On peut de même étudier des chaînes quantiques généralisant celle d'Ising en considérant des modèles avec interactions à deux spins et à m spins. De telles chaînes sont découplées par dualité (TURBAN 1985b) en m chaînes d'Ising en champ transverse et l'on peut ainsi prévoir leurs comportements critiques.

5. Conclusion

Nous avons étudié dans ce chapitre des perturbations marginales inhomogènes imposées à des chaînes quantiques reliées au modèle d'Ising.

Le comportement critique obtenu par application de la relation gap-exposant a pu, dans chaque cas, être confirmé par les méthodes d'effets de taille finie. La relation gap-exposant trouve sa justification dans l'invariance conforme qui exige

par ailleurs l'existence de tours conformes dans le spectre d'un modèle conformément covariant. Les systèmes perturbés que nous avons envisagés présentent effectivement des niveaux régulièrement espacés.

Il faut néanmoins être prudent avant de conclure à la validité de l'invariance conforme dans les cas étudiés. Comme on l'a vu dans le premier chapitre, l'hypothèse de covariance conforme associe à un système bidimensionnel au point critique une algèbre de Lie infinie (Virasoro ou Kac-Moody) dont les représentations irréductibles constituent une description complète des propriétés critiques du système. Or, aucune information précise n'a encore été apportée au sujet d'une éventuelle algèbre conforme associée aux systèmes critiques inhomogènes. Aussi la question de la validité au sens strict de l'invariance conforme reste-t-elle encore en suspens.

L'étude de perturbations marginales étendues dans les systèmes bidimensionnels peut cependant être poursuivie. En imposant à une telle perturbation d'être covariante par dilatation, Loïc Turban a obtenu l'expression générale d'une perturbation marginale étendue sur ruban, perturbation qui est alors invariante par translation dans le temps sur le ruban.

Notons $\Delta\chi(z)$ l'écart aux couplages critiques d'un système bidimensionnel dans le plan $z = \rho e^{i\theta}$, et posons

$$\Delta\chi(z) = \alpha f_\chi(\rho, \theta) \quad (3.97)$$

Dans le changement d'échelle $\rho' = \rho/b$, $\theta' = \theta$, la perturbation (3.97) se transforme suivant

$$\Delta\chi' = b^{y_\chi} \Delta\chi \quad (3.98)$$

soit

$$\alpha' f_\chi(\rho', \theta') = b^{y_\chi} \alpha f_\chi(\rho, \theta)$$

d'où

$$\alpha' = \alpha b^{y_\chi} \frac{f_\chi(\rho, \theta)}{f_\chi(\rho/b, \theta)} \quad (3.99)$$

Pour que la perturbation soit covariante par dilatation, f_χ doit être une fonction homogène de la variable ρ , soit :

$$f_\chi(\lambda\rho, \theta) = \lambda^{-y} f_\chi(\rho, \theta) \quad (3.100)$$

d'où, avec $\lambda = \rho^{-1}$:

$$\alpha' = \alpha b^{y_\chi} \frac{\rho^{-y} f_\chi(1, \theta)}{\left(\frac{\rho}{b}\right)^{-y} f_\chi(1, \theta)} = \alpha b^{y_\chi - y} \quad (3.101)$$

La perturbation étudiée est marginale si α est inchangé par renormalisation, i.e. si $y = y_\chi$.

Par la transformation conforme

$$w(z) = u + iv = \frac{L}{2\pi} \ln z$$

la perturbation (3.97) se transforme maintenant suivant la loi de covariance :

$$\Delta\chi(w) = b(z)^{y_\chi} \Delta\chi(z) = \left(\frac{2\pi\rho}{L}\right)^{y_\chi} \alpha f_\chi(\rho, \theta) \quad (3.102)$$

On en déduit l'expression de la perturbation sur ruban en revenant aux variables

$$u = \frac{L}{2\pi} \ln \rho \quad \text{et} \quad v = \frac{L\theta}{2\pi}$$

soit :

$$\Delta\chi(w) = \alpha \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{y_\chi} \exp\left[\frac{2\pi u}{L}(y_\chi - y)\right] f_\chi(1, \frac{2\pi v}{L}) \quad (3.103)$$

où, dans le cas marginal, f_χ est une fonction homogène en ρ de degré $-y_\chi$, de sorte que :

$$\Delta\chi(w) = \alpha \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{y_\chi} f_\chi(1, \frac{2\pi v}{L}) = \alpha f_\chi\left(\frac{L}{2\pi}, \frac{2\pi v}{L}\right) \quad (3.104)$$

Notons que la perturbation est invariante par translation suivant u .

Dans le cas d'un défaut ellipsoïdal dans le plan par exemple,

$$f_\chi(\rho, \theta) = \frac{1}{\rho^{y_\chi} (\sin^2 \theta + k^2 \cos^2 \theta)^{y_\chi/2}} \quad (3.105)$$

on obtient sur le ruban une perturbation de la forme :

$$\Delta\chi(w) = \alpha \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{y_\chi} \frac{1}{\left[\sin^2 \frac{2\pi v}{L} + k^2 \cos^2 \frac{2\pi v}{L}\right]^{y_\chi/2}} \quad (3.106)$$

en accord avec (3.103).

Avec $k = 0$, on retrouve le défaut linéaire que nous avons étudié :

$$\Delta\chi(w) = \alpha \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{y_\chi} \frac{1}{\left[\sin \frac{2\pi v}{L}\right]^{y_\chi}} \quad (3.107)$$

alors que pour $k = 1$, on obtient le défaut radial étudié par Bariev et Peschel (1990) et Turban (1990) :

$$\Delta\chi(w) = \alpha \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{y_x} \quad (3.108)$$

L'expression (3.104) donne ainsi la forme générale d'une perturbation marginale sur ruban et suggère les directions de travaux ultérieurs.

Annexe C

Spectre d'excitation de la chaîne d'Ising inhomogène avec conditions de bords libres

On présente dans cette annexe le détail des calculs conduisant au spectre asymptotique du modèle inhomogène avec conditions de bords libres dans la limite continue.

La diagonalisation de l'hamiltonien (3.11) se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres pour les excitations Λ_k :

$$\Delta_i(\ell-1)\phi_k(\ell-1) - (\Lambda_k^2 - 1 - \Delta_i^2(\ell-1))\phi_k(\ell) + \Delta_i(\ell)\phi_k(\ell+1) = 0 \quad (C.1)$$

avec les conditions aux limites

$$\Delta_1(0)\phi_k(0) + \Delta_1^2(0)\phi_k(1) = 0 \quad (C.2a)$$

$$\Delta_2(L-1)\phi_k(L) = 0 \quad (C.2b)$$

En posant

$$\varphi(\ell) = (-1)^\ell \phi(\ell) \quad (C.3)$$

l'équation (C.1) devient pour la première moitié de la chaîne ($\Delta_i = \Delta_1$) :

$$\left(1 - \frac{\alpha}{\ell-1}\right)\varphi_1(\ell-1) + \left[\Lambda_k^2 - 1 - \left(1 - \frac{\alpha}{\ell-1}\right)^2\right]\varphi_1(\ell) + \left(1 - \frac{\alpha}{\ell}\right)\varphi_1(\ell+1) = 0 \quad (C.4)$$

lorsque $1 \leq \ell \leq L/2$, et pour la seconde ($\Delta_i = \Delta_2$) :

$$\left(1 - \frac{\alpha}{L-\ell}\right)\varphi_2(\ell-1) + \left[\Lambda_k^2 - 1 - \left(1 - \frac{\alpha}{L-\ell}\right)^2\right]\varphi_2(\ell) + \left(1 - \frac{\alpha}{L-\ell-1}\right)\varphi_2(\ell+1) = 0 \quad (C.5)$$

lorsque $L/2 \leq \ell \leq L-1$.

En introduisant

$$\varphi(\ell+1) - \varphi(\ell) = \frac{1}{L} \frac{d\varphi(z)}{dz} + O(L^{-2}) \quad (C.6a)$$

$$\varphi(\ell+1) - 2\varphi(\ell) + \varphi(\ell-1) = \frac{1}{L^2} \frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + O(L^{-3}) \quad (C.6b)$$

où l'on a utilisé la variable $z = \ell/L$, continue dans la limite thermodynamique. Les équations (C.4) et (C.5) deviennent, à l'ordre dominant en L^{-1} , des équations différentielles du second ordre :

$$\frac{d^2\varphi_1(z)}{dz^2} + \left[(\Lambda_k L)^2 - \frac{\alpha(\alpha-1)}{z^2} \right] \varphi_1(z) = 0 \quad , \quad 0 < z < \frac{1}{2} \quad (C.7a)$$

$$\frac{d^2\varphi_2(z)}{dz^2} + \left[(\Lambda_k L)^2 - \frac{\alpha(\alpha+1)}{(1-z)^2} \right] \varphi_2(z) = 0 \quad , \quad \frac{1}{2} < z < 1 \quad (C.7b)$$

et les conditions aux limites (C.2) s'écrivent :

$$\frac{\alpha}{z} \varphi_1(z) - \frac{d\varphi_1(z)}{dz} = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (C.8a)$$

$$\varphi_2(z) = 0 \quad \text{en } z = 1 \quad (C.8b)$$

En $z = \frac{1}{2}$, l'équation (C.1) développée à l'ordre L^{-2} donne :

$$\text{à l'ordre } L^{-1} : \varphi_1'\left(\frac{1}{2}\right) = \varphi_2'\left(\frac{1}{2}\right) \quad (C.9a)$$

$$\text{à l'ordre } L^{-2} : \varphi_1\left(\frac{1}{2}\right) = \varphi_2\left(\frac{1}{2}\right) \quad (C.9b)$$

En posant $x = \Lambda_k L z$ (respectivement $x = \Lambda_k L(1-z)$), on obtient l'équation différentielle :

$$\varphi'' + \left(1 - \frac{\nu^2 - \frac{1}{4}}{x^2} \right) \varphi = 0 \quad (C.10)$$

dont les solutions $x^{1/2} J_\nu(x)$, où $J_\nu(x)$ est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre ν , permettent d'écrire des solutions particulières de (C.7) sous la forme :

$$\varphi_1^\pm(z) \sim z^{1/2} J_{\pm(\alpha-1/2)}(cz) \quad (C.11a)$$

$$\varphi_2^\pm(z) \sim (1-z)^{1/2} J_{\pm(\alpha+1/2)}(c(1-z)) \quad (C.11b)$$

où $c = \Lambda_k L$.

Le développement en z des fonctions de Bessel (ABRAMOVITZ et STEGUN 1970)

$$J_\nu(z) = z^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k z^{2k}}{k! \Gamma(\nu + k + 1) 2^{\nu+2k}} \quad (C.12)$$

permet, avec la condition aux limites (C.8b), de sélectionner la solution :

$$\varphi_2(z) = B(1-z)^{1/2} J_{\alpha+1/2}(c(1-z)) \quad \text{si } \alpha \geq -\frac{1}{2} \quad (C.13a)$$

$$\varphi_2(z) = B(1-z)^{1/2} J_{-(\alpha+1/2)}(c(1-z)) \quad \text{si } \alpha \leq -\frac{1}{2} \quad (C.13b)$$

En utilisant les relations entre fonctions de Bessel et leurs dérivées (ABRAMOWITZ et STEGUN 1970)

$$J'_\nu(z) = -\frac{\nu}{z} J_\nu(z) + J_{\nu-1}(z) \quad (C.14a)$$

$$J'_\nu(z) = \frac{\nu}{z} J_\nu(z) - J_{\nu+1}(z) \quad (C.14b)$$

la condition aux limites (C.8a) s'écrit :

$$z^{1/2} J_{\pm(\alpha+1/2)}(cz) = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (C.15)$$

et impose le choix :

$$\varphi_1(z) = Az^{1/2} J_{\alpha-1/2}(cz) \quad \text{si } \alpha \geq -1/2 \quad (C.16a)$$

$$\varphi_1(z) = Az^{1/2} J_{-(\alpha-1/2)}(cz) \quad \text{si } \alpha \leq -1/2 \quad (C.16b)$$

Les conditions de continuité (C.9) avec les solutions (C.14) et (C.16) permettent d'écrire un système d'équations linéaires homogènes pour A et B et l'annulation du déterminant fournit une équation pour les excitations Λ_k :

$$\begin{vmatrix} J_p(c/2) & -J_q(c/2) \\ J_p(c/2) + cJ'_p(c/2) & J_q(c/2) + J'_q(c/2) \end{vmatrix} = 0 \quad (C.17)$$

où

$$p = \alpha - 1/2 \quad \text{et} \quad q = \alpha + 1/2 \quad \text{si } \alpha \geq -1/2 \quad (C.18a)$$

$$p = -\alpha + 1/2 \quad \text{et} \quad q = -\alpha - 1/2 \quad \text{si } \alpha \leq -1/2 \quad (C.18b)$$

ce qui conduit à :

$$2J_p(c/2)J_q(c/2) + cJ_p(c/2)J'_q(c/2) + cJ'_p(c/2)J_q(c/2) = 0 \quad (C.19)$$

que l'on peut réécrire sous la forme :

$$J^2(c/2) = J_q^2(c/2) \quad (C.20)$$

Cette équation détermine exactement les excitations Λ_k dans la limite continue. On en déduit une expression asymptotique en utilisant le développement des fonctions de Bessel pour les valeurs élevées de l'argument :

$$J_\nu(z) = \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \cos\left(z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + O(z^{-3/2}) \quad (C.21)$$

qui conduit, dans (C.20), à la condition

$$\sin\left[c - \frac{p+q+1}{2}\pi\right] = 0 \quad (C.22)$$

soit

$$\Lambda_k L = (p+q+2k+1)\frac{\pi}{2} \quad (C.23)$$

Conclusion

L'utilisation des méthodes de l'invariance conforme est devenue systématique dans l'étude du comportement critique des systèmes bidimensionnels comme en atteste une littérature de plus en plus volumineuse sur le sujet ces dernières années.

Ce formalisme a été initialement appliqué à des modèles homogènes avec interactions à courte portée. Ceux-ci remplissent les conditions requises d'invariance par translation, par rotation et par dilatation. Ce n'est pas le cas du modèle d'Ising bidimensionnel perturbé par une ligne de défauts pour lequel la validité de l'invariance conforme a pourtant été établie (1985-1988). La démonstration complète constitue le fruit du travail de plusieurs personnes (Turban, Guimaraës et Drugowich de Felício, Henkel et Patkós) et repose sur trois étapes essentielles :

- une étude de validité de la relation gap-exposant qui permet de déduire les exposants critiques de l'amplitude des longueurs de corrélation,
- une mise en évidence des tours conformes dans le spectre du modèle, ces dernières étant caractéristiques de l'existence de représentations avec vecteurs de plus haut poids,
- l'identification de l'algèbre conforme associée au modèle.

Ces étapes constituent les trois volets de la méthodologie que nous avons adoptée dans cette thèse. Le projet présente un intérêt évident puisqu'il consiste à préciser au mieux

les limites de validité de l'invariance conforme en étudiant des perturbations, dans le modèle d'Ising bidimensionnel, qui brisent une ou plusieurs des symétries mentionnées plus haut. L'hypothèse d'une validité de l'invariance conforme suffisamment générale pour être étendue à des systèmes perturbés est étayée par les résultats antérieurs relatifs aux comportements de surface et à la ligne de défauts. Elle n'est cependant, dans le cas général, le résultat d'aucune approche rigoureuse à ce jour.

Rappelons les résultats essentiels, désormais acquis à l'issue de ce travail.

Nous avons étudié au chapitre deux des perturbations homogènes sur ruban dans le modèle d'Ising bidimensionnel. La première, non pertinente, est localisée en surface, alors que la seconde, pertinente, est étendue à tout un demi-plan. Toutes deux sont homogènes dans la limite hamiltonienne (modèle d'Ising dans un champ transverse), mais correspondent dans la géométrie infinie à des défauts inhomogènes. Une étude préalable, mêlant approches numériques et analytiques, nous a permis d'obtenir le comportement critique associé à chacune de ces perturbations et d'y reconnaître les transitions de surface ordinaire ou extraordinaire selon les valeurs des couplages modifiés. De telles transitions caractérisent les comportements critiques des systèmes perturbés à leur point fixe. Nous avons ensuite montré que les méthodes de l'invariance conforme conduisent effectivement aux exposants de point fixe des systèmes perturbés et nous avons déterminé la forme exacte des spectres qui présentent la structure en échelle attendue. A partir des dégénérescences des états excités nous avons pu identifier l'algèbre conforme associée à chacun de ces modèles ainsi que les opérateurs primaires de la théorie. Ces résultats légitiment l'application de l'invariance conforme dans les cas envisagés.

Dans le troisième chapitre, consacré à des perturbations inhomogènes étendues (modèle de Hilhorst-van Leeuwen et généralisations), nous avons suivi une démarche analogue. Après avoir calculé par les méthodes d'effets de taille finie les exposants thermiques jusqu'alors indéterminés et les exposants magnétiques dont certains étaient déjà connus, nous avons vérifié que l'utilisation de la relation gap-exposant conduisait bien aux mêmes valeurs de ces exposants critiques. La

détermination analytique du spectre, confirmé numériquement, nous a ensuite permis de vérifier l'existence de niveaux régulièrement espacés. Notons néanmoins que les tours conformes ne sont rigoureusement obtenues dans le spectre que lorsque l'on prend soin de transformer convenablement le modèle étudié par la projection conforme usuelle. L'étude des dégénérescences n'a pas permis à ce jour d'identifier une algèbre conforme associée et ceci constitue le dernier point litigieux quant à la validité au sens strict de l'invariance conforme pour ces modèles inhomogènes. Les résultats acquis sont cependant prometteurs et l'on peut espérer qu'une réponse générale au problème de la validité de l'invariance conforme pour les systèmes perturbés soit apportée dans un proche avenir.

Liste des figures

1.1 Diagramme de phase du modèle d'Ising	16
1.2 Modèle de Lenz-Ising à $2d$	19
1.3 Diagramme de phase du modèle d'Ising $2d$ dans l'espace des paramètres β_s, β_t	19
1.4 Diagramme de phase et limite hamiltonienne	22
1.5 Fermeture des gaps au point critique	25
1.6 Auto-similarité d'un système à son point critique	26
1.7 Transformations de renormalisation	27
1.8 Renormalisation vers un point fixe stable	28
1.9 Renormalisation vers une ligne de points fixes stables	30
1.10 Projection du plan complexe sur un cylindre	41
1.11 Excitations du modèle d'Ising homogène	50
1.12 Etat fondamental $E_0(1)$ et état du vide dans la phase de basse température du modèle d'Ising périodique homogène	52
1.13 Construction des états propres de $\mathcal{H}$ à partir de ceux de $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ dans la phase de haute température	53
1.14 Construction des états propres de $\mathcal{H}$ à partir de ceux de $\tilde{\mathcal{H}}(q)$ dans la phase de basse température	54
1.15 Etats $ 0\rangle, \sigma\rangle$ et $ \varepsilon\rangle$	57
1.16 Etats propres du secteur impair construits par l'algèbre conforme	62
1.17 Etats propres du secteur pair construits par l'algèbre conforme	62
2.1 Profils du paramètre d'ordre au voisinage d'une surface dans la théorie de Ginzburg-Landau	69
2.2 Diagramme de phase indiquant les comportements de surface en champ moyen	70
2.3 Renormalisation d'un système perturbé localement	
a. par un défaut non pertinent	74
b. par un défaut pertinent	75

c. par un défaut marginal	76
2.4 Projection sur un ruban d'un système semi-infini perturbé en surface . . .	78
2.5 Ruban perturbé en surface dans la limite hamiltonienne	79
2.6 Exposants magnétique et thermique du modèle d'Ising $2d$	
a. perturbé par un champ transverse de surface (effets de taille finie) . . .	81
b. perturbé par un couplage longitudinal de surface (effets de taille finie) . .	82
2.7 Exposants magnétique et thermique du modèle d'Ising $2d$	
a. perturbé par un champ transverse de surface (invariance conforme) . . .	83
b. perturbé par un couplage longitudinal de surface (invariance conforme) . .	84
2.8 Spectre obtenu numériquement pour une chaîne de $L = 50$ spins ($h, /J, \neq 0$)	85
2.9 Spectre obtenu numériquement pour une chaîne de $L = 50$ spins ($h, = 0$) . .	87
2.10 Illustration de la transformation de dualité	89
2.11 Projection sur ruban d'un système infini présentant un demi-espace perturbé	90
2.12 Correspondance classique $\longleftrightarrow$ quantique dans le cas $M = L/2$	91
2.13 Interfaces non linéaires	92
2.14 Exposants magnétiques de l'interface (effets de taille finie)	95
2.15 Exposant thermique de l'interface (effets de taille finie)	96
2.16 Dégénérescence asymptotique des niveaux $E_0(0)$ et $E_0(1)$	97
2.17 Tours conformes de l'interface	98
2.18 Construction du spectre de $\mathcal{H}$ à partir des énergies d'excitation	100
2.19 Exposants magnétiques de l'interface (invariance conforme)	101
2.20 Exposant thermique de l'interface (invariance conforme)	102
2.21 Transformation de dualité du modèle avec interface	104
3.1 Exposant thermique obtenu par effets de taille finie puis extrapolé à taille infinie	123
3.2 Exposants magnétiques obtenus par effets de taille finie puis extrapolés à taille infinie	124
3.3 Correction au <i>scaling</i> de l'énergie	124
3.4 Correction au <i>scaling</i> de l'aimantation	125
3.5 Excitations dans la limite continue	132

3.6 Gaps du secteur pair dans la limite continue	135
3.7 Gaps du secteur impair dans la limite continue	135
3.8 Comparaison entre les interactions $\lambda(\ell) = 1 - \pi\alpha/(L \sin(\pi\ell/L))$ et $\lambda(\ell) = 1 - \alpha/\ell$	138
3.9 Exposants magnétique et thermique du modèle inhomogène perturbé par un défaut localisé h_0 (effets de taille finie)	139
3.10 Exposants magnétique et thermique du modèle inhomogène perturbé par un défaut localisé h_0 (relation gap-exposant)	139
3.11 Transformation des interactions du type Hilhorst-van Leeuwen en interactions du type Burkhardt-Iglói	140
3.12 Exposant thermique obtenu par effets de taille finie	142
3.13 Exposant magnétique et correction au <i>scaling</i>	143
3.14 Construction des états propres de $\mathcal{H}$ à partir des excitations paires et impaires dans les cas $\alpha > 0$ et $\alpha < 0$	144
3.15 Exposant thermique déduit de la relation gap-exposant puis extrapolé à taille infinie	145
3.16 Exposant magnétique déduit de la relation gap-exposant puis extrapolé à taille infinie	145
3.17 Spectre d'excitation des secteurs pair et impair	149
3.18 Dégénérescence de l'état fondamental dans la phase ordonnée	150
3.19 Secteur pair du spectre pour le modèle périodique	151
3.20 Secteur impair du spectre pour le modèle périodique	153
3.21 Exposants thermique et magnétique déduits de la relation gap-exposant pour un système inhomogène périodique perturbé par un défaut linéaire localisé à l'interface	155
3.22 Découplage d'une chaîne XY en deux chaînes d'Ising	157
3.23 Variation des exposants associés aux grandeurs M_x et M_y	160
3.24 Variation des exposants associés aux grandeurs E_{xx} et E_{yy}	161
3.25 Variation de l'exposant associé à la grandeur S_z	162
3.26 Spectre d'excitations de la chaîne XY avec conditions de bords libres	165
3.27 Exposants magnétiques en fonction de α pour une chaîne XY inhomogène ($\beta = -1$)	166
3.28 Excitations du modèle XY périodique inhomogène ($q = r = 0$)	167
3.29 Excitations du modèle XY périodique inhomogène ($q = r = 1$)	167

Liste des tableaux

1.1 Vecteurs de base aux niveaux 0, 1, 2, 3	38
1.2 Tours conformes des opérateurs σ et ε construites à partir des excitations $\Lambda_k(q)$	59
1.3 Dégénérescences des représentations irréductibles de charge centrale $c = 1/2$	60
1.4 Etats propres linéairement indépendants dégénérés au niveau $N = 3$ du secteur impair (conditions périodiques)	61
1.5 Etats propres linéairement indépendants dégénérés au niveau $N = 3$ du secteur pair (conditions périodiques)	61
1.6 Etats propres linéairement indépendants dégénérés au niveau $N = 3$ (conditions de bords libres)	65
3.1 Premiers gaps du secteur pair lorsque $\alpha \geq \alpha_c$	133
3.2 Premiers gaps du secteur impair lorsque $\alpha \geq \alpha_c$	133
3.3 Premiers gaps du secteur pair lorsque $\alpha \leq \alpha_c$	134
3.4 Premiers gaps du secteur impair lorsque $\alpha \leq \alpha_c$	134
3.5 Premiers gaps du secteur pair pour le modèle périodique	152
3.6 Premiers gaps du secteur impair ($\alpha > 0$) pour le modèle périodique	152
3.7 Exposants critiques de la chaîne XY quantique	162
3.8 Gaps de la chaîne XY	164
3.9 Comportement critique de la chaîne XY périodique inhomogène	168

Références bibliographiques

- ABRAHAM DB (1986). Surface structures and phase transitions. Exact results. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and JL Lebowitz). vol 10, pp 1-74. London : Academic Press.
- ABRAMOWITZ M & STEGUN IA (1970). Handbook of mathematical functions. New-York : Dover.
- AFFLECK I (1986) Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly. *Phys Rev Lett*, **56**, 746-748.
- ALCARAZ FC & BARBER MN (1987) Conformal invariance and the critical behaviour of a quantum spin Hamiltonian with three-spin coupling. *J Phys A*, **20**, 179-188.
- ALCARAZ FC, BARBER MN & BATCHELOR MT (1987) Conformal invariance and the spectrum of the XXZ chain. *Phys Rev Lett*, **58**, 771-774.
- ALCARAZ FC, BARBER MN & BATCHELOR MT (1988) Conformal invariance, the XXZ chain and the operator content of two-dimensional critical systems. *Ann Phys*, **182**, 280-343.
- AU-YANG H (1973) Thermodynamics of an anisotropic boundary of a two-dimensional Ising model. *J Math Phys*, **14**, 937-946.
- AU-YANG H & FISHER ME (1975) Bounded and inhomogeneous Ising models. *Phys Rev B*, **11**, 3469-3487.
- AU-YANG H & FISHER ME (1980) Wall effects in critical systems : scaling in Ising model strips. *Phys Rev B*, **21**, 3956-3970.
- BAAKE M, CHASELON P & SCHLOTTMANN JL (1987) The Ising quantum chain with defects. *Nucl Phys*, **B314**, 625-645.
- BARBER MN (1973) Scaling relations for critical exponents of surface properties of magnets. *Phys Rev B*, **8**, 407-409.
- BARBER MN (1983). Finite-size scaling. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and JL Lebowitz). vol 8, pp 145-266. London : Academic Press.
- BARBER MN, PESCHEL I & PEARCE PA (1984) Magnetization at corners in two-dimensional Ising models. *J Stat Phys*, **37**, 497-527.
- BARIEV RZ (1979) Effect of linear defects on the local magnetization of a plane Ising lattice. *Sov Phys JETP*, **50**, 613-619.
- BARIEV RZ (1989) Correlation functions in the two-dimensional Ising model with large-scale inhomogeneity caused by a line defect. *J Phys A*, **22**, L397-L400.
- BARIEV RZ & MALOV OA (1989) Local magnetization of the two-dimensional Ising model near an inhomogeneous defect. *Phys Lett A*, **136**, 291-293.
- BARIEV RZ & PESCHEL I (1990) Non-universal critical behaviour in planar Ising models with extended, radially symmetric defects. Preprint : Berlin.
- BAXTER RJ (1982) Exactly solved models in statistical mechanics. London : Academic Press.
- BELAVIN AA, POLYAKOV AM & ZAMOLODCHIKOV AB (1984a) Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory. *Nucl Phys*, **B241**, 333-380.
- BELAVIN AA, POLYAKOV AM & ZAMOLODCHIKOV AB (1984b) Infinite conformal symmetry of critical fluctuations in two dimensions. *J Stat Phys*, **34**, 763-774.
- BERCHE B & TURBAN L (1989) Conformal invariance and perturbations in the two-dimensional Ising model : surface defects. *J Stat Phys*, **56**, 589-607.
- BERCHE B & TURBAN L (1990a) Conformal invariance and surface defects in the two-dimensional Ising model : exact results. *J Stat Phys*, **60**, 167-180.

- BERCHE B & TURBAN L (1990b) Critical-off-critical interface in the Ising quantum chain and conformal invariance. To be published in *J Phys A*, **24**.
- BERCHE B & TURBAN L (1990c) Inhomogeneous Ising chain in a transverse field : finite-size scaling and asymptotic conformal spectrum. *J Phys A*, **23**, 3029-3041.
- BETHE HA (1935) Statistical theory of superlattices. *Proc Roy Soc*, **A150**, 552-575.
- BINDER K (1983). Critical behaviour at surfaces. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and JL Lebowitz). vol 8, pp 1-144. London : Academic Press.
- BINDER K (1987) Finite size effects on phase transitions. *Ferroelectrics*, **73**, 43-67.
- BINDER K & HOHENBERG PC (1972) Phase transitions and static spin correlations in Ising models with free surfaces. *Phys Rev B*, **6**, 3461-3487.
- BINDER K & HOHENBERG PC (1974) Surface effects on magnetic phase transitions. *Phys Rev B*, **9**, 2194-2214.
- BINDER K & HOHENBERG PC (1976) Monte Carlo and series expansion investigations of magnetic surfaces. *IEEE Trans Mag*, **Mag-12**, 66-73.
- BINDER K & LANDAU DP (1984) Crossover scaling and critical behavior at the "surface-bulk" multicritical point. *Phys Rev Lett*, **52**, 318-321.
- BLÖTE HWJ, CARDY JL & NIGHTINGALE MP (1986) Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality. *Phys Rev Lett*, **56**, 742-745.
- BLÖTE HWJ & HILHORST HJ (1983) Nonuniversality, exponent asymmetry, and surface magnetization in a inhomogeneous square Ising lattice. *Phys Rev Lett*, **51**, 2015-2018.
- BLÖTE HWJ & HILHORST HJ (1985) Surface critical behaviour of the smoothly inhomogeneous planar Ising model : the Pfaffian method. *J Phys A*, **18**, 3039-3061.
- BOCCARA N & SARMA G (1974) Does magnetic surface order exist ? *J Physique Lett*, **35**, L95-L97.
- BOGOLIUBOV NN (1958) On a new method in the theory of superconductivity. *Nuovo Cimento*, **7**, 794-805.
- BOGOLYUBOV NM, IZERGIN AG & RESHETIKHIN NY (1986) Finite-size effects and critical indices of 1D quantum models. *JETP Lett*, **44**, 521-523.
- BRAGG WL & WILLIAMS EJ (1934) The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys. *Proc Roy Soc*, **A145**, 699-731.
- BRAY AJ, MOORE MA (1977a) Critical behaviour of semi-infinite systems. *J Phys A*, **10**, 1927-1962.
- BRAY AJ & MOORE MA (1977b) Critical behaviour of a semi-infinite system : n -vector model in the large- n limit. *Phys Rev Lett*, **38**, 735-738.
- BRAY AJ & MOORE MA (1977c) Surface critical exponents in terms of bulk exponents. *Phys Rev Lett*, **38**, 1046-1048.
- BREZIN E, LE GUILLOU JC & ZINN-JUSTIN J (1976). Field theoretical approach to critical phenomena. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and MS Green). vol 6, pp 125-247. London : Academic Press.
- BRUSH SG (1967) History of the Lenz-Ising model. *Rev Mod Phys*, **39**, 883-893.
- BURKHARDT TW (1982a) Crossover in the critical behavior of inhomogeneous semi-infinite systems. *Phys Rev B*, **25**, 7048-7051.
- BURKHARDT TW (1982b) Scaling theory of boundary-spin correlations in inhomogeneous critical systems. *Phys Rev Lett*, **48**, 216.
- BURKHARDT TW (1984) Surface critical phenomena in systems with a bulk phase transition. Proceedings of the winter school Karpacz, Poland : preprint.
- BURKHARDT TW (1985) Duality of ordinary and extraordinary surface critical behaviour in the two-dimensional Potts model. *J Phys A*, **18**, L307-L312.
- BURKHARDT TW & CARDY JL (1987) Surface critical behaviour and local operators with boundary-induced critical profiles. *J Phys A*, **20**, L233-L238.
- BURKHARDT TW & EISENRIEGLER E (1977) Renormalization-group approach to the Ising model with a free surface. *Phys Rev B*, **16**, 3213-3222.
- BURKHARDT TW & EISENRIEGLER E (1978) Renormalization-group approach to surface critical behavior in the Ising model. *Phys Rev B*, **17**, 318-323.

- BURKHARDT TW & EISENRIEGLER E (1981) Critical phenomena near free surfaces and defect planes. *Phys Rev B*, **24**, 1236-1243.
- BURKHARDT TW & EISENRIEGLER E (1985) Universal order-parameter profiles in confined critical systems with boundary fields. *J Phys A*, **18**, L83-L88.
- BURKHARDT TW & EISENRIEGLER E (1986) Pair correlations in the antiperiodic Ising strip and conformal invariance. *J Phys A*, **19**, L663-L666.
- BURKHARDT TW, EISENRIEGLER E & GUIM I (1989) Conformal theory of energy correlations in the semi-infinite two-dimensional $O(N)$ model. *Nucl Phys*, **B316**, 559-572.
- BURKHARDT TW & GUIM I (1982) Non-universal and anomalous surface critical behaviour in an inhomogeneous semi-infinite Gaussian model. *J Phys A*, **15**, L305-L310.
- BURKHARDT TW & GUIM I (1984) Surface critical behavior of the smoothly inhomogeneous Ising model. *Phys Rev B*, **29**, 508-510.
- BURKHARDT TW & GUIM I (1985a) Correlation length in Ising strips with free and fixed boundary conditions. *J Phys A*, **18**, L25-L31.
- BURKHARDT TW & GUIM I (1985b) Finite-size scaling of the quantum Ising chain with periodic, free, and antiperiodic boundary conditions. *J Phys A*, **18**, L33-37.
- BURKHARDT TW & GUIM I (1987) Bulk, surface, and interface properties of the Ising model and conformal invariance. *Phys Rev B*, **36**, 2080-2083.
- BURKHARDT TW, GUIM I, HILHORST HJ & VAN LEEUWEN JMJ (1984) Boundary magnetization and spin correlations in inhomogeneous two-dimensional Ising systems. *Phys Rev B*, **30**, 1486-1497.
- BURKHARDT TW & IGLÓI F (1990) Semi-infinite two-dimensional Ising model with marginally inhomogeneous couplings and conformal invariance. *J Phys A*, **23**, L633-L638.
- BURKHARDT TW & XUE T (1990) Density profiles in confined critical systems and conformal invariance. Preprint : Philadelphie.
- CABRERA GG (1990) First order phase transitions in a solid with finite size. *Int J Mod Phys B*, **4**, 1671-1692.
- CAHN JW & HILLIARD JE (1958) Free energy of a non uniform system. *J Chem Phys*, **28**, 258-267.
- CAPELLI A, ITZYKSON C & ZUBER JB (1987) The A-D-E classification of minimal and $A_1^{(1)}$ conformal invariant theories. *Commun Math Phys*, **113**, 1-26.
- CARDY JL (1984a) Conformal invariance and surface critical behavior. *Nucl Phys*, **B240** [FS12], 514-532.
- CARDY JL (1984b) Conformal invariance and universality in finite-size scaling. *J Phys A*, **17**, L385-L387.
- CARDY JL (1984c) Finite-size scaling in strips : antiperiodic boundary conditions. *J Phys A*, **17**, L961-L964.
- CARDY JL (1986a) Conformal invariance and critical behavior. *Physica*, **140A**, 219-224.
- CARDY JL (1986b) Operator content of two-dimensional conformally invariant theories. *Nucl Phys*, **B270** [FS16], 186-204.
- CARDY JL (1986c) Effect of boundary conditions on the operator content of two-dimensional conformally invariant theories. *Nucl Phys*, **B275** [FS17], 200-218.
- CARDY JL (1987a). Conformal invariance. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and JL Lebowitz). vol **11**, pp 55-126. London : Academic Press.
- CARDY JL (1987b) Continuously varying exponents and the value of the central charge. *J Phys A*, **20**, L891-L896.
- CARDY JL (1988a) Finite-size scaling (ed JL Cardy). Amsterdam : Elsevier Science.
- CARDY JL (1988b) Conformal invariance and statistical mechanics. In : *Champs, cordes et phénomènes critiques*, Ecole d'été de physique théorique. Les Houches, 49e session (éd par E. Brézin et J. Zinn-Justin). pp 169-245. Amsterdam : Elsevier Science, 1990.
- CARDY JL & PESCHEL I (1988) Finite-size dependence of the free energy in two-dimensional critical systems. *Nucl Phys*, **B300** [FS22], 377-392.

- COLEMAN S (1971) Dilatations. In : *Aspects of symmetry* (S. Coleman), pp 67-98. Cambridge : Cambridge University Press, 1985.
- CORDERY R (1982) Renormalization-group explanation of nonuniversal decay of boundary-spin correlations. *Phys Rev B*, **48**, 215.
- CURIE P (1891) Quelques remarques relatives à l'équation réduite de van der Waals. In : *Oeuvres de Pierre Curie*. pp 214-219. Paris : Gauthier-Villars, 1908.
- CURIE P (1895) Propriétés magnétiques des corps à diverses températures. Thèse : Paris.
- DAVIES B & PEARCE PA (1990) Conformal invariance and critical spectrum of corner transfer matrices. *J Phys A*, **23**, 1295-1312.
- DERRIDA B & DE SEZE L (1982) Application of phenomenological renormalization in percolation and lattice animals in dimension 2. *J Physique*, **43**, 475-483.
- DIEHL HW (1982) Critical behavior of semi-infinite magnets. *J Appl Phys*, **53**, 7914-7919.
- DIEHL HW (1986). Field-theoretic approach to critical behaviour at surfaces. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and JL Lebowitz). vol 10, pp 75-267. London : Academic Press.
- DIEHL HW, DIETRICH S & EISENRIEGLER E (1983) Universality, irrelevant surface operators, and corrections to scaling in systems with free surfaces and defect planes. *Phys Rev B*, **27**, 2937-2954.
- DIETRICH S & DIEHL HW (1981) Critical behaviour of the energy density in semi-infinite systems. *Z Phys B*, **43**, 315-320.
- DOMB C (1960) On the theory of cooperative phenomena in crystals. *Adv Phys*, **9**, 151-244.
- DOMB C & GREEN MS (1972) Phase transitions and critical phenomena. vol 1. London : Academic Press.
- DOMB C & GREEN MS (1974) Phase transitions and critical phenomena. vol 3. London : Academic Press.
- DOMB C & GREEN MS (1976) Phase transitions and critical phenomena. vol 6. London : Academic Press.
- DOMB C & HUNTER DL (1965) On the critical behaviour of ferromagnets. *Proc Phys Soc*, **86**, 1147-1151.
- DOTSSENKO VLS (1984a) Critical behaviour and associated conformal algebra of the Z_3 Potts model. *Nucl Phys*, **B235** [FS11], 54-74.
- DOTSSENKO VLS (1984b) Critical behaviour and associated conformal algebra of the Z_3 Potts model. *J Stat Phys*, **34**, 781-791.
- DOTSSENKO VLS & FATEEV VA (1984) Conformal algebra and multipoint correlation functions in 2d statistical models. *Nucl Phys*, **B240** [FS12], 312-348.
- DOTSSENKO VLS & FATEEV VA (1985) Four-point correlation functions and the operator algebra in 2d conformal invariant theories with central charge $c \leq 1$. *Nucl Phys*, **B251** [FS13], 691-734.
- FELSAGER B (1981) Geometry, particles and fields. Odense : Odense University Press.
- FERDINAND AE & FISHER ME (1969) Bounded and inhomogeneous Ising models. *Phys Rev*, **185**, 832-846.
- FEYNMAN RP (1948) Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Rev Mod Phys*, **20**, 367-387.
- FISHER ME (1959) The susceptibility of the plane Ising model. *Physica*, **25**, 521-524.
- FISHER ME (1963) Lattice statistics. A review and an exact isotherm for a plane lattice gas. *J Math Phys*, **4**, 278-286.
- FISHER ME (1966) Quantum corrections to critical-point behavior. *Phys Rev Lett*, **16**, 11-14.
- FISHER ME (1967) The theory of equilibrium critical phenomena. *Rep Prog Phys*, **30**, 615-733.
- FISHER ME (1968) Phase transitions and critical phenomena. In : *Contemporary physics. Proc Int Symposium Trieste 7-28 June 1968*. vol 1, pp 19-46. Vienne : International atomic energy agency, 1969.
- FISHER ME (1971) The theory of critical point singularities. In : *Critical phenomena*, Proceedings of the international school of physics "Enrico Fermi". Course 51 (ed by MS Green). pp 1-99. New York : Academic Press.

- FISHER ME (1973a) Critical phenomena in films and surfaces. *J Vac Sci Technol*, **10**, 665-673.
- FISHER ME (1973b) General scaling theory for critical points. In : *Collective properties of physical systems*, Proceedings of the Nobel symposium. n°24 (ed by B Lundqvist and S Lundqvist). pp 16-37. London : Academic Press.
- FISHER ME (1974) The renormalization group in the theory of critical behavior. *Rev Mod Phys*, **46**, 597-616.
- FISHER ME (1986) Phase transitions and criticality : finite-size effects, conformal covariance and other current problems. *J Magn Magn Mat*, **54-57**, 646-648.
- FISHER ME & AU-YANG H (1980) Critical wall perturbations and a local free energy functional. *Physica*, **101A**, 255-264.
- FISHER ME & FERDINAND AE (1967) Interfacial, boundary, and size effects at critical points. *Phys Rev Lett*, **19**, 169-172.
- FISHER ME & DE GENNES PG (1978) Phénomènes aux parois dans un mélange binaire critique. *CR Acad Sc Paris*, **287**, 207-209.
- FISK S & WIDOM B (1969) Structure and free energy of the interface between fluid phases in equilibrium near the critical point. *J Chem Phys*, **50**, 3219-3227.
- FRADKIN E & SUSSKIND L (1978) Order and disorder in gauge systems and magnets. *Phys Rev D*, **17**, 2637-2658.
- FRIEDAN D, QIU Z & SHENKER SH (1984) Conformal invariance, unitarity, and critical exponents in two dimensions. *Phys Rev Lett*, **52**, 1575-1578.
- FRIEDAN D, QIU Z & SHENKER SH (1985) Conformal invariance, unitarity and two dimensional critical exponents. In : *Vertex operators in mathematics and physics. Proceedings of a conference November 10-17, 1983* (ed by J Lepowsky, S Mandelstam and IM Singer). pp 419-449. New York : Springer Verlag.
- FRIEDAN D, QIU Z & SHENKER SH (1986) Conformal invariance and critical exponents in two dimensions. *J Magn Magn Mat*, **54-57**, 655-657.
- FRIEDAN D, SHENKER SH & QIU Z (1987) Conformal invariance and critical exponents in two dimensions. *Physics today*, **40**, 19-20.
- GALLAVOTTI G, MIRACLE-SOLE S & RUELLE D (1968) Absence of phase transitions in one-dimensional systems with hard cores. *Phys Lett*, **26A**, 350-351.
- VON GEHLEN G & RITTENBERG V (1986) The spectra of quantum chains with free boundary conditions and Virasoro algebras. *J Phys A*, **19**, L631-L635.
- VON GEHLEN G, RITTENBERG V & RUEGG H (1985) Conformal invariance and finite one-dimensional quantum chains. *J Phys A*, **19**, 107-109.
- DE GENNES PG (1966) Superconductivity of metals and alloys. Redwood City, Ca : Addison-Wesley, 1989.
- GINSPARG P (1988) Applied conformal field theory. In : *Champs, cordes et phénomènes critiques*, Ecole d'été de physique théorique. Les Houches, 49e session (éd par E. Brézin et J. Zinn-Justin). pp 1-168. Amsterdam : Elsevier Science, 1990.
- GINZBURG VL (1961) Some remarks on phase transitions of the second kind and the microscopic theory of ferroelectric materials. *Sov Phys Solid State*, **2**, 1824-1834.
- GINZBURG VL & LANDAU LD (1950) On the theory of superconductivity. In : *Collected papers of LD Landau* (ed by D Ter Haar). pp 546-568. New York : Pergamon Press, 1965.
- GINZBURG VL & PITAEVSKII LP (1958) On the theory of superfluidity. *Sov Phys JETP*, **34**, 858-861.
- GODDARD P, KENT A & OLIVE D (1986) Unitary representations of the Virasoro and super-Virasoro algebras. *Commun Math Phys*, **103**, 105-119.
- GODDARD P & OLIVE D (1985) Kac-Moody algebras, conformal symmetry and critical exponents. *Nucl Phys*, **B257** [FS14], 226-252.
- GRIFFITHS RB (1970) Dependence of critical indices on a parameter. *Phys Rev Lett*, **24**, 1479-1516.
- GRIMM U (1990) The quantum Ising chain with a generalized defect. *Nucl Phys*, **B340**, 633-658.
- GUIMARAES LG & DRUGOWICH DE FELÍCIO JR (1986) Conformal invariance and non-universality in quantum spin chain with a defect. *J Phys A*, **19**, L341-L346.

- HAMER CJ (1982) Magnetisations from finite-size scaling. *J Phys A*, **15**, L675-L683.
- HAMER CJ & BARBER MN (1980) Finite-size scaling in Hamiltonian field theory. *J Phys A*, **13**, L169-L174.
- HAMER CJ & BARBER MN (1981) Finite-lattice methods in Hamiltonian field theory. *J Phys A*, **14**, 241-257.
- HENKEL M (1987a) Konform Invarianz, Universalität und finite-size scaling im Isingmodell. Thèse : Bonn : Physikalisches Institut ; IR-87-06.
- HENKEL M (1987b) Finite-size scaling and universality in the spectrum of the quantum Ising chain. *J Phys A*, **20**, 995-1010.
- HENKEL M (1990) Applications of the Hamiltonian limit to critical phenomena, finite-size scaling and conformal invariance. In : *Finite-size scaling and numerical simulation of statistical systems* (V Privman ed). pp 353-433. Singapore : World Scientific.
- HENKEL M & PATKÓS A (1987a) Conformal structure in the spectrum of an altered quantum Ising chain. *J Phys A*, **20**, 2199-2210.
- HENKEL M & PATKÓS A (1987b) Critical exponents of defective Ising models and the $U(1)$ Kac-Moody-Virasoro algebras. *Nucl Phys*, **B285** [FS19], 29-44.
- HENKEL M & PATKÓS A (1988) Conformal invariance and line defects in the two-dimensional Ising model. *J Phys A*, **21**, L231-L236.
- HENKEL M, PATKÓS A & SCHLOTTMANN M (1989) The Ising quantum chain with defects. *Nucl Phys*, **B314**, 609-624.
- HILHORST HJ & VAN LEEUWEN JMJ (1981) Nonuniversal and anomalous decay of boundary spin correlations in inhomogeneous Ising systems. *Phys Rev Lett*, **47**, 1188-1190.
- HINRICHSSEN H (1990) The Ising quantum chain with an extended defect. *Nucl Phys*, **B336**, 337-395.
- HUSE DA (1984) Exact exponents for infinitely many new multicritical points. *Phys Rev B*, **30**, 3908-3915.
- IGLÓI F (1987) Conformal invariance and surface critical behaviour of a quantum chain with three-spin interaction. *J Phys A*, **20**, 5319-5324.
- IGLÓI F (1990) Inhomogeneous critical Ising model. *Phys Rev Lett*, **64**, 3035-3037.
- IGLÓI F, BERCHE B & TURBAN L (1990) Critical behavior near a smooth inhomogeneity in the planar Ising model and conformal invariance. *Phys Rev Lett*, **65**, 1773-1776.
- IGLÓI F & INDEKEU JO (1990) Wetting near grain boundaries and defect planes, and its connection with wetting walls and free surfaces. *Phys Rev B*, **41**, 6836-6847.
- IRVING AC, ÓDOR G & PATKÓS A (1989) On the validity of the gap-exponent relation in Ising models with many defect lines. *J Phys A*, **22**, 4665-4672.
- ISING E (1925) Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z Phys*, **31**, 253-258.
- ITZYKSON C & DROUFFE JM (1989) Théorie statistique des champs. 2 vol. Paris : InterEditions ; Meudon : Editions du CNRS.
- ITZYKSON C, SALEUR H & ZUBER JB (1988) Conformal invariance and applications to statistical mechanics (C Itzykson, H Saleur and JB Zuber eds). Singapore : World Scientific.
- ITZYKSON C & ZUBER JM (1986) Two-dimensional conformal invariant theories on a torus. *Nucl Phys*, **B275** [FS17], 580-616.
- JORDAN P & WIGNER E (1928) Über das Paulische Äquivalenzverbot. *Z Phys*, **47**, 631-651.
- JULLIEN R (1981) Transitions de phase à $T = 0$ dans les systèmes quantiques par le groupe de renormalisation dans l'espace réel. *Can J Phys*, **59**, 605-631.
- JULLIEN R & FIELDS JN (1978) Equivalence between a spin 1/2 dimerized XY chain and two independent Ising chains in transverse fields. *Phys Lett*, **69A**, 214-216.
- KADANOFF LP (1966) Scaling laws for Ising models near T_c . *Physics*, **2**, 263-272.
- KADANOFF LP (1971) Critical behavior. Universality and scaling. In : *Critical phenomena*. Proceedings of the international school of physics "Enrico Fermi". Course 51 (ed by MS Green). pp 100-117. New York : Academic Press.

- KADANOFF LP (1976). Scaling, universality and operator algebras. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and MS Green). vol 5a, pp 2-34. London : Academic Press.
- KADANOFF LP, GÖTZE W, HAMBLÉN D, HECHT R, LEWIS EAS, PALCIAUSKAS W, RAYL M & SWIFT J (1967) Static phenomena near critical points : theory and experiment. *Rev Mod Phys*, **39**, 395-431.
- KADANOFF LP, HOUGHTON A & YALABIK ML (1976) Variational approximations for renormalization group transformations. *J Stat Phys*, **14**, 171-203.
- KAGANOV MI & OMEL'YANCHUK AN (1972) Phenomenological theory of phase transition in a thin ferromagnetic plate. *Sov Phys JETP*, **34**, 895-898.
- KAISER C & PESCHEL I (1989) Surface and corner magnetizations in the two-dimensional Ising model. *J Stat Phys*, **54**, 567-579.
- KOGUT JB (1979) An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev Mod Phys*, **51**, 659-713.
- KOLB M & PENSON KA (1986) Conformal invariance and the phase transition of a spin chain with three-spin interaction. *J Phys A*, **19**, L779-L784.
- KRAMERS HA & WANNIER GH (1941) Statistics of the two-dimensional ferromagnet. *Phys Rev*, **60**, 252-276.
- KRÖMER J & PESCH W (1979) The surface critical exponent η_1 in the two dimensional Ising model. *Phys Lett*, **70A**, 223-224.
- KUMAR P (1974) Magnetic phase transition at a surface : mean-field theory. *Phys Rev B*, **10**, 2928-2933.
- LAJZEROWICZ J & PFEUTY P (1971) Solution exacte d'un modèle semi-phénoménologique de changements de phase à deux dimensions. *J Physique*, **32**, suppl C5a, 193-194.
- LAJZEROWICZ J & PFEUTY P (1975) Space-time-dependent spin correlation of the one-dimensional Ising model with a transverse field. Application to higher dimensions. *Phys Rev B*, **11**, 4560-4562.
- LANCZOS C (1950) An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J Res Nat Bur Stand*, **45**, 255.
- LANDAU LD (1936) The theory of phase transitions. *Nature*, **138**, 840-841.
- LANDAU LD (1937) On the theory of phase transition. In : *Collected papers of LD Landau* (ed by D Ter Haar). pp 193-216. New York : Pergamon Press, 1965.
- LANDAU LD & LIFCHITZ E (1974) Mécanique quantique. Moscou : Mir.
- LANDAU LD & LIFCHITZ E (1984) Physique statistique. Moscou : Mir.
- LE BELLAC (1988) Des phénomènes critiques aux champs de jauge. Paris : InterEditions ; Meudon : Editions du CNRS.
- LENZ W (1920) Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern. *Physik Z*, **21**, 613-615.
- LIEB E, SCHULTZ T & MATTIS D (1961) Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann Phys*, **16**, 407-466.
- LUBENSKY TC & RUBIN MH (1975) Critical phenomena in semi-infinite systems. *Phys Rev B*, **12**, 3885-3901.
- LUCK JM (1982) Finite-size scaling and the two-dimensional XY model. *J Phys A*, **15**, L169-L176.
- MA SK (1973) Introduction to the renormalization group. *Rev Mod Phys*, **45**, 589-614.
- MA SK (1976) Modern theory of critical phenomena. Readings, Mass : WA Benjamin.
- MC COY BM & PERK JHH (1980) Two-spin correlation functions of an Ising model with continuous exponents. *Phys Rev Lett*, **44**, 840-844.
- MC COY BM & WU TT (1967) Theory of Toeplitz determinants and the spin correlations of the two-dimensional Ising model. *Phys Rev*, **162**, 436-475.
- MC COY BM & WU TT (1973) The two-dimensional Ising model. Cambridge, Mass : Harvard University Press.
- MILLS DL (1971) Surface effects in magnetic crystals near the ordering temperature. *Phys Rev B*, **3**, 3887-3895.

- NAKANISHI H & FISHER ME (1982) Multicriticality of wetting, prewetting, and surface transitions. *Phys Rev Lett*, **49**, 1565-1568.
- NIEMEIJER TH & VAN LEEUWEN JMJ (1976). Renormalization group for Ising-like spin systems. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and MS Green). vol 6, pp 425-505. London : Academic Press.
- NIGHTINGALE MP (1976) Scaling theory and finite systems. *Physica*, **83A**, 651-672.
- NIGHTINGALE MP & BLÖTE HWJ (1983) The relation between amplitudes and critical exponents in finite-size scaling. *J Phys A*, **16**, L657-L664.
- NIX FC & SHOCKLEY W (1938) Order-disorder transformations in alloys. *Rev Mod Phys*, **10**, 1-71.
- OHNO K & OKABE Y (1984) The $1/n$ expansion for the extraordinary transition of semi-infinite system. *Prog Theor Phys*, **72**, 736-745.
- OKABE Y & OHNO K (1984) Universal critical amplitude ratios and scaling functions for the semi-infinite system with a surface. *Phys Rev B*, **30**, 6573-6577.
- ONSAGER L (1944) Crystal statistics. *Phys Rev*, **65**, 117-149.
- PARISI G (1980) Field-theoretic approach to second-order phase transitions in two- and three-dimensional systems. *J Stat Phys*, **23**, 49-82.
- PATASHINSKII AZ & POKROVSKII VL (1966) Behavior of ordered systems near the transition point. *Sov Phys JETP*, **23**, 292-297.
- PATASHINSKII AZ & POKROVSKII VL (1979) Fluctuation theory of phase transitions. Oxford : Pergamon Press.
- PEIERLS R (1936a) Statistical theory of superlattices with unequal concentrations of the components. *Proc Roy Soc*, **A154**, 207-222.
- PEIERLS R (1936b) Ising's model of ferromagnetism. *Cambridge Phil Soc Proc*, **32**, 477-481.
- PENSON KA, JULLIEN R & PFEUTY P (1982) Phase transitions in systems with multipin interactions. *Phys Rev B*, **26**, 6334-6337.
- PENSON KA & KOLB M (1984) Universality of correlation-length amplitudes and their relation with critical exponents for quantum systems. *Phys Rev B*, **29**, 2854-2856.
- PESCHEL I (1984) Surface magnetization in inhomogeneous two-dimensional Ising lattices. *Phys Rev B*, **30**, 6783-6784.
- PESCHEL I (1985) Some more results for the Ising square lattice with a corner. *Phys Lett*, **110A**, 313-315.
- PESCHEL I (1988) Finite-size scaling of corner transfer matrices for the two-dimensional Ising model. *J Phys A*, **21**, L185-L188.
- PESCHEL I & SCHOTTE KD (1984) Time correlations in quantum spin chains and the X-ray absorption problem. *Z Phys B*, **54**, 305-311.
- PESCHEL I & TRUONG TT (1987) Corner transfer matrices and conformal invariance. *Z Phys B*, **69**, 385-391.
- PFEUTY P (1970a) The one-dimensional Ising model with a transverse field. *Ann Phys*, **57**, 79-90.
- PFEUTY P (1970b) Le modèle d'Ising avec un champ transverse. Thèse : Paris.
- PFEUTY P (1976) The quantum-classical crossover critical behaviour of the Ising model in a transverse field. *J Phys C*, **9**, 3993-4001.
- PFEUTY P (1979) An exact result for the 1D random Ising model in a transverse field. *Phys Lett*, **72A**, 245-246.
- PICHARD JL & SARMA G (1981) Finite-size scaling approach to Anderson localisation.
Part I : *J Phys C*, **14**, L127-L132.
Part II : *J Phys C*, **14**, L617-L625.
- PIKIN SA & TSUKERNIK VM (1965) The thermodynamics of linear spin chains in a transverse magnetic field. *Sov Phys JETP*, **23**, 914-916.
- PLASCAK JA (1984) Critical behaviour at surfaces : variational approach for the free energy. *J Phys A*, **17**, L919-L923.
- POLYAKOV AM (1970) Conformal symmetry of critical fluctuations. *Sov Phys JETP*, **12**, 381-383.

- POLYAKOV AM (1987) Gauge fields and strings. Chur : Harwood Academic.
- PRIVMAN V (1985) Conformal mapping of a periodic strip at criticality. *Phys Rev B*, **32**, 6089-6090.
- PRIVMAN V (1990) Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems (V Privman ed). Singapore : World Scientific.
- PRIVMAN V & FISHER ME (1984) Universal critical amplitudes in finite-size scaling. *Phys Rev B*, **30**, 322-327.
- PRIVMAN V, HOHENBERG PC & AHARONY A (1990) Universal critical-point amplitude relations. To appear in : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and JL Lebowitz), vol 14. Academic Press.
- REEVE JS & GUTTMANN AJ (1980) Critical behavior of the n -vector model with a free surface. *Phys Rev Lett*, **45**, 1581-1583.
- RITTENBERG V (1988) Finite-size scaling and irreducible representations of Virasoro algebras. In : *Infinite-dimensional Lie algebras and their applications* (ed by SN Kass). pp 189-207. Singapore : World Scientific.
- ROCHA-CARIDI A (1984) Vacuum vector representations of the Virasoro algebra. In : *Vertex operators in mathematics and physics. Proceedings of a conference November 10-17, 1983* (ed by J Lepowsky, S Mandelstam and IM Singer). pp 451-473. New York : Springer Verlag, 1985.
- ROOMANY HH, WYLD HW & HOLLOWAY LE (1980) New method for the Hamiltonian formulation for lattice spin systems. *Phys Rev D*, **21**, 1557-1563.
- SAINT-AUBIN Y (1987) Phénomènes critiques en deux dimensions et invariance conforme. Notes de cours : Université de Montréal ; CRM-1472.
- SAVIT R (1980) Duality in field theory and statistical systems. *Rev Mod Phys*, **52**, 453-487.
- SCHIFF LI (1968) Quantum mechanics. New York : Mc Graw-Hill.
- SCHMIDT H (1957) Disordered one-dimensional crystals. *Phys Rev*, **105**, 425-441.
- SHENKER SH (1982) Field theories and phase transitions. In : *Développements récents en théorie des champs et mécanique statistique*, Ecole d'été de physique théorique. Les Houches, 39e session (éd par JB Zuber et R Stora). pp 1-38. Amsterdam : Elsevier Science, 1984.
- STANLEY HE (1971) Introduction to phase transitions and critical phenomena. Oxford : Clarendon Press.
- STANLEY HE (1974). D -vector model or "universality hamiltonian" : properties of isotropically-interacting D -dimensional classical spins. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and MS Green). vol 3, pp 486-569. London : Academic Press.
- STANLEY HE, CHANG TS, HARBUS F & LIU LL (1976) Five introductory lectures on critical phenomena in simple and complex systems : the unifying hypotheses of scaling and universality. In : *Local properties at phase transitions*, Proceedings of the international school of physics "Enrico Fermi". Course 59 (ed by KA Müller and A Rigamonti). pp 45-136. Amsterdam : North Holland.
- STELLA AL & VANDERZANDE C (1990) Surface critical behaviour of some two-dimensional lattice models. *Int J Mod Phys B*, **4**, 1437-1464.
- SUZUKI M (1971) Relationship among exactly soluble models of critical phenomena. *Prog Theor Phys*, **46**, 1337-1359.
- SUZUKI M (1976) Relationship between d -dimensional quantal spin systems and $(d+1)$ -dimensional Ising systems. *Prog Theor Phys*, **56**, 1454-1469.
- SYKES MF, ESSAM JW & GAUNT DS (1965) Derivation of low-temperature expansions for the Ising model of a ferromagnet and an antiferromagnet. *J Math Phys*, **6**, 283-298.
- SYKES MF, ESSAM JW, GAUNT DS & ELLIOT CJ (1973) Derivation of low-temperature expansions for Ising model VI. Three-dimensional lattices-temperature grouping. *J Phys A*, **6**, 1507-1516.
- TAKANO H & SAITO Y (1985) Order parameter and finite-size scaling. *Prog Theor Phys*, **73**, 1369-1376.
- TOULOUSE G & PFEUTY P (1975) Introduction au groupe de renormalisation et à ses applications. Grenoble : Presses universitaires de Grenoble.
- TRUONG TT & PESCHEL I (1988) Diagonalisation of corner transfer matrix by orthogonal polynomials. *J Phys A*, **21**, L1029-L1032.

- TRUONG TT & PESCHEL I (1989) Diagonalisation of finite-size corner transfer matrices and related spin chains. *Z Phys B*, **75**, 119-125.
- TURBAN L (1985a) Conformal invariance and linear defects in the two-dimensional Ising model. *J Phys A*, **18**, L325-L329.
- TURBAN L (1985b) Exact results for quantum chains with multisite interactions. *J Phys A*, **18**, 2313-2324.
- TURBAN L (1990) Radial marginal perturbation of two-dimensional systems and conformal invariance. Preprint : Nancy.
- VAN DER WAALS JD (1988) On the continuity of gaseous and liquid states (ed with an introductory essay by JS Rowlinson). Amsterdam : North-Holland.
- VINCENTINI-MISSONI M (1972). Equilibrium scaling in fluids and magnets. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and MS Green). vol 2, pp 39-78. London : Academic Press.
- VIRASORO MA (1970) Subsidiary conditions and ghosts in dual-resonance models. *Phys Rev D*, **1**, 2933-2936.
- WATSON PG (1972). Surface and size effects in lattice models. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and MS Green). vol 2, pp 101-159. London : Academic Press.
- WEGNER FJ (1976). The critical state, general aspects. In : *Phase transitions and critical phenomena* (ed by C Domb and MS Green). vol 6, pp 7-124. London : Academic Press.
- WIDOM B (1965) Equation of state in the neighborhood of the critical point. *J Chem Phys*, **43**, 3898-3905.
- WILSON KG (1971) Renormalization group and critical phenomena. *Phys Rev B*, **4**, 3174-3205.
- WILSON KG & KOGUT JB (1974) The renormalization group and the ε expansion. *Phys Rep C*, **12**, 75-200.
- WITTLICH TH (1990) Operator content of the Ising model with three-spin coupling. *J Phys A*, **23**, 3825-3834.
- WORTIS M & ŠVRAKIĆ NM (1982) Surface phases and surface phase transitions : a renormalization-group approach. *IEEE Trans Mag*, **Mag-18**, 721-727.
- YANG CN (1952) The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model. *Phys Rev*, **85**, 808-816.
- ZANGWILL A (1988) *Physics at surfaces*. Cambridge : Cambridge University Press.
- ZINN-JUSTIN J (1989) *Quantum field theory and critical phenomena*. Oxford : Clarendon Press.

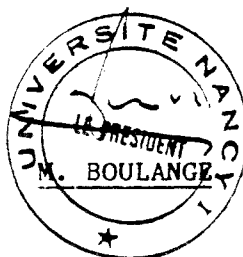
NOM DE L'ETUDIANT : BERCHE BERTRAND

NATURE DE LA THESE : DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE NANCY I EN SCIENCES ET GENIE DES
MATERIAUX

VU, APPROUVE ET PERMIS D'IMPRIMER

NANCY, le - 8 JAN. 1991 ~'6

LE PRESIDENT DE L'UNIVERSITE DE NANCY I



Résumé

D'importants progrès ont été réalisés ces dernières années dans l'étude des phénomènes critiques grâce à l'utilisation de l'hypothèse de covariance conforme des fluctuations auto-similaires au point critique. Ce formalisme a été initialement appliqué à des modèles bidimensionnels homogènes avec interactions à courte portée. Ceux-ci remplissent les conditions requises d'invariance par translation, par rotation et par dilatation.

Cette thèse est consacrée à l'étude de perturbations dans le modèle d'Ising bidimensionnel. Le projet consiste à explorer les limites de validité de l'invariance conforme en imposant au modèle homogène de départ des défauts qui brisent une ou plusieurs des symétries mentionnées plus haut. La méthodologie adoptée repose sur trois étapes essentielles. Elle comprend l'étude de la validité de la relation "gap-exposant", puis la mise en évidence de l'existence de tours conformes dans le spectre et enfin, lorsque c'est possible, l'identification de l'algèbre conforme associée au modèle.

Différentes perturbations sont successivement envisagées :

- perturbation non pertinente introduite par une ligne de défauts sur une surface libre,
- perturbation pertinente associée à l'interface entre un demi-espace critique et un demi-espace non critique,
- perturbations marginales dues à une variation des couplages en loi de puissance depuis une surface ou depuis une ligne en volume.

Les résultats prouvent la validité de l'invariance conforme dans les deux premiers cas. Dans le cas des perturbations étendues marginales, la relation entre gaps et exposants critiques est vérifiée et le spectre obtenu présente la structure en échelle attendue, mais les dégénérescences des niveaux ne correspondent à aucune algèbre conforme connue.

Mots-clés

modèle d'Ising, limite hamiltonienne, exposant critique, effets de taille finie, relation gap-exposant, invariance conforme