



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>



FACULTE DES SCIENCES

U.F.R. Sciences et Techniques de la Matière et des Procédés
Groupe de Formation Doctorale Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux

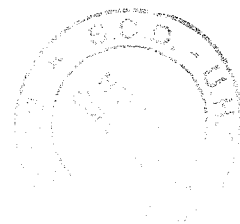
Thèse

présentée pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy 1

en Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux

par **Pierre Emmanuel BERCHE**



Contribution à l'étude des phénomènes critiques dans les systèmes apériodiques : séquences marginales de volume.

Soutenue publiquement devant la Commission d'Examen le 17 décembre 1996

Membres du jury :

Président :	P. Mangin	Ecole des Mines de Nancy, INPL
Rapporteurs :	M. Droz	Université de Genève
	T. Wydro	Université de Metz
Examineurs :	M. Henkel	Université Henri Poincaré, Nancy 1
	P. Pfeuty	Laboratoire Léon Brillouin, CEA Saclay
	L. Turban	Université Henri Poincaré, Nancy 1

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

Remerciements

J'ai élaboré ce travail dans le cadre du Laboratoire de Physique du Solide (U.R.A. 155) de l'Université Henri Poincaré, Nancy 1, dont je remercie le directeur Amand George pour son accueil.

Je tiens ici à exprimer ma profonde reconnaissance envers Maurice Gerl qui, plus que tout autre, par la qualité de ses enseignements et son enthousiasme communicatif, a su me donner l'envie de débiter une thèse en physique.

Philippe Mangin a accepté d'assurer la présidence de ce jury. Je lui en suis très reconnaissant.

Durant ces années, j'ai eu le plaisir de travailler sous la direction de Loïc Turban dont la constante disponibilité m'a grandement facilité la tâche. Je l'en remercie sincèrement.

Toute ma gratitude également à Michel Droz et Tomasz Wydro qui ont accepté d'étudier et d'évaluer ce travail, ainsi qu'à Malte Henkel et Pierre Pfeuty qui ont aimablement accepté de participer au jury.

Je souhaite également remercier Ferenc Iglói pour les conseils fructueux qu'il a bien voulu me donner, principalement sur l'étude en champ moyen.

Au cours de ce travail, les difficultés informatiques auront toujours trouvé une solution rapide grâce à la sagacité et la compétence de Christian Senet que je remercie vivement.

Enfin, c'est avec un grand plaisir que je remercie Bertrand pour la constante attention qu'il a su m'accorder depuis... 25 ans.

Sommaire

	Page
Introduction	7
 Chapitre 1. Désordre et apériodicité dans le modèle d'Ising bidimensionnel - Introduction et revue bibliographique	
1. Introduction	11
2. Notions sur le groupe de renormalisation et hypothèse d'homogénéité	13
2.1. Groupe de renormalisation	13
2.2. Hypothèse d'homogénéité et lois d'échelle	16
2.3. Effets de taille finie	17
2.4. Systèmes anisotropes	18
3. Le modèle d'Ising bidimensionnel	19
3.1. Le modèle classique de Lenz-Ising à deux dimensions	19
3.2. Le modèle d'Ising en champ transverse	21
3.2.1. Limite hamiltonienne	21
3.2.2. Diagonalisation du modèle d'Ising en champ transverse	25
3.2.3. Propriétés locales	27
3.2.4. Fonctions de corrélation de surface	32
4. Systèmes désordonnés et systèmes apériodiques	33
4.1. Généralités sur les systèmes désordonnés	33
4.2. Revue bibliographique sur les systèmes apériodiques	35
4.3. Critère de Luck	36
5. Conclusion	37
 Chapitre 2. Comparaison entre les apériodicités de liaison et de site dans la chaîne d'Ising quantique : aimantation de surface	
1. Introduction	38
2. Apériodicité de liaison	39
2.1. Présentation du problème	39

2.2. Critère de pertinence	40
2.3. Exemples de perturbations non pertinente, marginale et pertinente	43
2.3.1. Résultats généraux	43
2.3.2. Séquence de Thue-Morse	44
2.3.3. Séquence “doublement de période” (Period-Doubling)	45
2.3.4. Séquence de Rudin-Shapiro	48
2.4. Séquences apériodiques marginales de volume	50
2.4.1. Séquence “pliage ternaire” (Three-Folding)	50
2.4.2. Séquence “pliage de papier” (Paper-Folding)	51
3. Apériodicité de site	54
3.1. Présentation du problème	54
3.2. Critère de pertinence	55
3.3. Aimantation de surface pour des séquences marginales	59
3.3.1. Expression générale de la série apériodique	60
3.3.2. Séquence de Thue-Morse	60
3.3.3. Séquence “doublement de période”	64
3.3.4. Séquence “pliage ternaire”	66
4. Conclusion	68

Chapitre 3. Comportement d'échelle anisotrope dans la chaîne d'Ising quantique perturbée par une séquence marginale de volume

1. Introduction	69
2. Perturbations marginales de liaison	70
2.1. Aimantation de surface et énergie de surface	70
2.2. Energies d'excitations	73
2.3. Densité d'énergie libre et chaleur spécifique	77
2.4. Fonctions de corrélation de surface	80
2.5. Densité d'énergie interne de volume	83
2.6. Aimantation de volume	85
2.6.1. Critère de pertinence pour un défaut linéaire en volume dans un système anisotrope	85
2.6.2. Aimantation locale au point critique pour les sites de volume	86
2.6.3. Comportement en température de l'aimantation locale de volume	89
3. Systèmes multicouches. “Cross-over” entre point fixe homogène et point fixe apériodique	91
3.1. Présentation du problème	91
3.2. Aimantation de surface	92
3.3. Longueur de corrélation	94
3.4. Séquence “doublement de période”	96
3.4.1. Aimantation de surface	96
3.4.2. Longueur de corrélation	100

3.5. Séquence “pliage de papier”	102
4. Conclusion	104

Chapitre 4. Chaîne apériodique de spins dans l’approximation de champ moyen

1. Généralités	106
1.1. Introduction	106
1.2. Cadre général de la théorie de Ginzburg-Landau	107
1.3. Comportement critique de surface	108
2. Equations de Ginzburg-Landau discrètes pour la perturbation apériodique de Fibonacci	109
2.1. Formalisme de Landau et équation d’état sur un réseau à une dimension	109
2.2. Perturbation de Fibonacci	111
2.3. Définition des grandeurs thermodynamiques étudiées	112
3. Propriétés magnétiques	114
3.1. Profil du paramètre d’ordre et température critique	114
3.2. Comportement de l’aimantation spontanée de surface et de volume	116
3.3. Susceptibilités et isothermes critiques	121
4. Chaleurs spécifiques	124
5. Discussion	126

Conclusion	130
-------------------	-----

Liste des figures	133
--------------------------	-----

Liste des tableaux	137
---------------------------	-----

Références bibliographiques	139
------------------------------------	-----

Introduction

L'invariance par dilatation est une symétrie présente dans de nombreux phénomènes physiques ; elle y joue alors un rôle très important. On la rencontre lorsqu'un système ne possède aucune échelle de longueur caractéristique, comme c'est le cas au point critique des transitions de phase continues. Un tel système, au voisinage de la température critique, est le siège de fluctuations limitées par la longueur de corrélation, que l'on peut définir comme la portée maximale des effets induits par une perturbation locale (le renversement d'un spin dans un système magnétique par exemple). Les fluctuations ont une structure auto-similaire à l'intérieur du volume de corrélation, c'est-à-dire qu'elles présentent une invariance par dilatation aux échelles de longueur intermédiaires entre le pas du réseau et la longueur de corrélation. Au point critique, cette dernière diverge, conduisant à l'invariance d'échelle et il en résulte un comportement singulier des propriétés physiques, décrites sous la forme de lois de puissance, faisant intervenir des exposants critiques universels.

Bien que les fluctuations critiques aient été observées expérimentalement très tôt, avec l'opalescence critique dès le XIX^{ème} siècle, l'importance de leur rôle n'a été reconnue que bien plus tard et l'essor de la physique des phénomènes critiques, l'un des grands champs d'investigation de la physique moderne, remonte aux trente dernières années.

Négligeant les fluctuations, Landau obtient en 1937 les exposants critiques de champ moyen par une approche phénoménologique des transitions de phase fondée sur un développement de l'énergie libre, supposée régulière, en puissances d'un paramètre d'ordre ϕ (LANDAU 1937). Ces valeurs des exposants avaient précédemment été obtenues dans le cadre de théories de champ moléculaire comme la théorie de Van der Waals pour la transition liquide-gaz, celle de Weiss pour la transition ferromagnétique ou celle de Bragg-Williams pour la transition ordre-désordre. La théorie de Landau s'appuie sur des arguments de symétrie, puisque l'énergie libre ou l'hamiltonien du système doivent posséder les éléments de symétrie de la phase désordonnée. La transition de phase s'accompagne ainsi d'une brisure

spontanée de symétrie lorsque le paramètre d'ordre prend une valeur d'équilibre non nulle.

On constate alors que les exposants critiques, de valeurs non entières en général, permettent de rassembler des systèmes a priori très différents au sein de classes d'universalité (FISHER 1966, GRIFFITHS 1970). On relève par ailleurs des lois d'échelle entre exposants critiques. Tout d'abord formulées par des inégalités sur la base d'arguments thermodynamiques (STANLEY 1971), les lois d'échelle ont été démontrées rigoureusement dès lors que l'on a supposé que la partie singulière de l'énergie libre s'écrivait sous la forme d'une fonction homogène généralisée des variables pertinentes - température réduite ou champ magnétique (WIDOM 1965, DOMB et HUNTER 1965). Cette hypothèse d'homogénéité découle du groupe de renormalisation, technique consistant en une réduction systématique du nombre de degrés de liberté du système, autorisée par l'invariance d'échelle (WILSON 1971). L'idée originelle est apparue dans la méthode des "blocs de spins" introduite par Kadanoff et qui propose, sur un réseau de moments magnétiques en interaction, de remplacer chaque bloc de spins par un spin unique, les interactions initiales étant "renormalisées" au cours de la décimation (KADANOFF 1966). L'un des succès majeurs du groupe de renormalisation a été d'asseoir l'hypothèse d'homogénéité sur des bases théoriques solides, mais aussi de permettre le calcul des exposants critiques (WILSON et KOGUT 1974).

Le concept d'universalité, témoignage d'une profonde unité dans la physique des phénomènes critiques, justifie l'étude de systèmes-modèles, tels que le modèle d'Ising ou le modèle de Heisenberg, puisque les détails comme la forme des interactions ou la symétrie du réseau sont inessentiels pour les propriétés critiques. Ces systèmes-modèles jouent un rôle primordial dans l'étude des phénomènes critiques. Ils admettent dans certains cas des solutions exactes et constituent de plus un champ privilégié d'investigation de nouveaux phénomènes tels que l'influence de perturbations.

Dans le cas de systèmes homogènes, la recherche de solutions exactes est facilitée par l'invariance par translation (modèle d'Ising bidimensionnel (ONSAGER 1944) ou solution du modèle de Heisenberg par l'Ansatz de Bethe (BETHE 1931)). Celle-ci est d'ailleurs une condition nécessaire à l'invariance par transformation conforme au même titre que les symétries de rotation ou de dilatation (POLYAKOV 1970). L'étude des phénomènes critiques dans les systèmes bidimensionnels homogènes et isotropes a accompli des progrès spectaculaires au cours des années quatre-vingts grâce à l'invariance conforme, fournissant une explication aux valeurs fractionnaires des exposants critiques, inventoriant les classes d'universalité... (BELAVIN, POLYAKOV et ZAMOLODCHIKOV 1984, FRIEDAN, QIU et SHENKER 1984, CHRISTE et HENKEL 1993). L'application de ces techniques aux phénomènes critiques de surface ainsi qu'à certaines formes d'inhomogénéités a par la suite donné lieu à une intense activité (CARDY 1984, BERCHE 1991, IGLÓI, PESCHEL et TURBAN 1993). L'invariance de Schrödinger est venue compléter cette description dans le cas des systèmes fortement anisotropes (HENKEL 1992, HENKEL 1994).

L'influence du désordre suscite par ailleurs depuis longtemps un vif intérêt et constitue un enjeu important pour la compréhension des propriétés critiques de systèmes réels. Les méthodes telles que l'invariance conforme y sont inopérantes, puisque les symétries requises sont brisées par les perturbations désordonnées, en particulier l'invariance par translation ou parfois l'invariance par dilatation continue, aussi le recours à l'étude systématique de ces perturbations dans les systèmes-modèles est-il indispensable. L'influence du désordre sur les propriétés critiques du modèle d'Ising a fait l'objet de nombreux travaux (McCoy et Wu 1968*a*, McCoy et Wu 1968*b*, McCoy 1970) avant d'être comprise dans le cas du désordre homogène grâce au critère de Harris (Harris 1974). Il s'agit de déterminer si la perturbation introduite par le désordre est pertinente, c'est-à-dire si elle modifie radicalement le comportement critique du système par rapport au cas homogène. En effet, l'analyse de l'influence de perturbations dans le cadre du groupe de renormalisation conduit à la définition de trois types de perturbations :

- i)* les perturbations pertinentes qui modifient le comportement critique du système alors gouverné par un nouveau point fixe ;
- ii)* les perturbations non pertinentes qui laissent le comportement critique du système inchangé ;
- iii)* les perturbations marginales qui peuvent conduire à un comportement critique non universel, caractérisé par des exposants critiques variables.

Plus récemment, l'influence d'une perturbation aperiodique a également été largement étudiée (Grimm et Baake 1996). En effet, la découverte des quasi-cristaux (Schechtman *et al* 1984) a provoqué un très grand intérêt pour les systèmes quasi-périodiques ou, plus généralement, aperiodiques (Henley 1987, Janssen 1988, Janot, Dubois et de Boissieu 1989, Guyot, Kramer et de Boissieu 1991, Steinhardt et DiVicenzo 1991). Du point de vue théorique, la compréhension des propriétés critiques des systèmes aperiodiques constitue un apport important du fait de leur situation intermédiaire entre les systèmes périodiques et aléatoires. On s'attend à ce que les transitions de phase dans de tels systèmes présentent un comportement critique riche et inhabituel, déterminé par la perturbation aperiodique appliquée. Ainsi, Luck définit un critère permettant de déterminer qualitativement l'influence d'une perturbation aperiodique sur le comportement critique à partir de l'amplitude des fluctuations des interactions dans les systèmes "en couches" (Luck 1993*a*).

Cette thèse s'inscrit directement dans cette problématique et contribue à l'étude de l'influence de perturbations aperiodiques marginales sur les propriétés critiques. Le cas de perturbations marginales s'avère en effet particulièrement intéressant, puisqu'il peut conduire à un comportement critique non universel caractérisé par une variation continue des exposants critiques avec l'amplitude de la modulation aperiodique. Lorsque le point critique est modifié par l'aperiodicité, on parle de perturbations de volume, puisque les propriétés critiques de surface et de volume sont affectées. Il existe également des perturbations de surface laissant inchangé le point critique et n'affectant pas les propriétés de volume (Karevski 1996), mais nous nous limiterons dans cette étude aux séquences aperiodiques de la première

catégorie.

Dans le premier chapitre, on présente succinctement le groupe de renormalisation, l'hypothèse d'homogénéité et la méthode des effets de taille finie à laquelle on se référera fréquemment par la suite. Nous présentons également le modèle d'Ising à deux dimensions et la méthode de diagonalisation dans la limite hamiltonienne. La fin de ce chapitre est consacrée à une revue rapide des travaux effectués sur les systèmes désordonnés et les systèmes aperiodiques.

Le deuxième chapitre concerne l'étude comparative de l'influence des aperiodicités de site et de liaison dans la chaîne d'Ising quantique. Ces deux formes d'aperiodicité correspondent à deux types différents d'interactions entre spins. Dans ce chapitre, on s'intéressera exclusivement à l'aimantation de surface du système, déterminée analytiquement.

On étudie, dans le troisième chapitre, les différentes propriétés critiques de la chaîne d'Ising quantique perturbée par des séquences aperiodiques marginales. Nous verrons en particulier que la modulation aperiodique induit un comportement d'échelle anisotrope avec une anisotropie déterminée par l'amplitude de la perturbation.

Enfin, dans le dernier chapitre, on s'intéresse au comportement d'une chaîne aperiodique de spins dans l'approximation de champ moyen. On étudiera ainsi les propriétés critiques de surface et de volume d'une chaîne aperiodique de spins dans le cadre de la théorie de Ginzburg-Landau en ϕ^4 .

Chapitre 1

Désordre et apériodicité dans le modèle d'Ising bidimensionnel - Introduction et revue bibliographique

1. Introduction

Dans un système thermodynamique, la condition d'équilibre est réalisée par la minimisation de l'énergie libre $F = E - TS$. Par un effet compétitif entre énergie interne et entropie, l'ordre est donc favorisé à basse température.

Si l'on considère un système de particules en interaction, l'apparition de l'ordre est un phénomène critique caractérisé par le développement de singularités dans les fonctions thermodynamiques qui peuvent, par exemple, diverger ou présenter une discontinuité au point critique. L'apparition de ces singularités résulte de l'aspect coopératif de la mise en ordre. En effet, les interactions, généralement à courte portée, propagent l'ordre de proche en proche à grande distance.

La phase ordonnée est en général de symétrie plus basse que la phase désordonnée. On dit alors que le système présente une brisure spontanée de symétrie lors de la transition. Pour distinguer la phase ordonnée de la phase désordonnée, on définit un paramètre d'ordre, de valeur nulle dans la phase désordonnée et non nulle dans la phase ordonnée. Le paramètre d'ordre peut être scalaire, comme dans le cas des systèmes liquide-gaz où il est défini par la différence des densités entre les phases liquide et gazeuse, vectoriel, comme dans le cas d'un système ferromagnétique où il est identifié à l'aimantation spontanée par site, ou tensoriel, comme pour les cristaux liquides.

Dans la limite thermodynamique (lorsque le volume V et le nombre de particules N du système tendent vers l'infini), la longueur de corrélation ξ diverge au point

critique d'une transition du second ordre. A cette divergence est associée une singularité de la densité d'énergie libre du système qui peut alors se décomposer en deux contributions :

$$f(T, H) = f_{\text{reg}}(T, H) + f_{\text{sing}}(T, H) \quad (1.1.1)$$

où le premier terme est régulier et le second singulier au point critique. La partie singulière de la densité d'énergie libre gouverne le comportement des différentes grandeurs thermodynamiques (chaleur spécifique, susceptibilité magnétique, ...). Au voisinage du point critique, ces différentes grandeurs thermodynamiques présentent des comportements en lois de puissance avec des exposants en général non entiers.

On définit ainsi les exposants critiques associés aux grandeurs thermodynamiques suivantes :

paramètre d'ordre	chaleur spécifique	susceptibilité	longueur de corrélation	fonction de corrélation réduite
$\phi(t) \sim t^\beta$	$C_v(t) \sim t^{-\alpha}$	$\chi(t) \sim t^{-\gamma}$	$\xi(t) \sim t^{-\nu}$	$g(r) = \frac{f(r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}$
$\phi(h) \sim h^{1/\delta}$			$\xi(h) \sim h^{-\nu_h}$	

Tableau 1.1.1 Définition du comportement des grandeurs thermodynamiques au voisinage du point critique. t est la température réduite et h le champ magnétique.

Parmi les paramètres associés à une transition de phase, la température critique T_c dépend des détails du modèle (de la forme des interactions ou de la symétrie du réseau par exemple). Ce n'est en revanche pas le cas des exposants critiques définis précédemment, qui ne dépendent que des propriétés de symétrie les plus générales (dimension d'espace et dimension du paramètre d'ordre) (STANLEY 1974, STANLEY *et al* 1976). Cette propriété d'universalité peut s'avérer plus riche encore, puisque certains systèmes différents présentent des comportements critiques analogues définis par des exposants identiques. On dit alors qu'ils appartiennent à la même classe d'universalité (FISHER 1966, KADANOFF *et al* 1967).

Le concept d'universalité joue donc un rôle central dans la compréhension des phénomènes critiques, tout comme l'hypothèse d'homogénéité, fondée sur le groupe de renormalisation que nous présenterons succinctement par la suite.

De plus, la notion d'universalité justifie l'étude des systèmes-modèles tels que le modèle d'Ising, puisque les détails du système sont inessentiels pour les propriétés critiques. On peut noter d'ailleurs que la majeure partie des travaux sur l'influence du désordre a été réalisée dans le cadre du modèle d'Ising. Nous proposerons une rapide vue d'ensemble de ces travaux.

On présentera ensuite sommairement une revue bibliographique des études menées sur les systèmes apériodiques. Ceux-ci jouent un rôle particulièrement intéressant, puisqu'ils sont intermédiaires entre les systèmes désordonnés et les systèmes périodiques. Les systèmes apériodiques présentent par ailleurs l'avantage de permettre d'obtenir de nombreux résultats analytiques.

2. Notions sur le groupe de renormalisation et hypothèse d'homogénéité

2.1. Groupe de renormalisation

La méthode du groupe de renormalisation, issue de la théorie quantique des champs, exploite la covariance par changement d'échelle. En effet, au voisinage d'une transition de phase du second ordre, le système est invariant par changement d'échelle des longueurs jusqu'à une échelle donnée par la longueur de corrélation ξ . Au point critique, la longueur de corrélation diverge, il n'y a plus d'échelle de longueur ; le système présente alors la propriété d'auto-similarité.

L'idée fondamentale du groupe de renormalisation est donc de procéder par éliminations successives des degrés de liberté à courte distance. L'information sur le comportement critique est tirée de l'évolution des couplages au cours de ce processus.

On considère par exemple un système d'hamiltonien :

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\vec{r}} \sum_{\alpha} K_{\alpha} S_{\alpha}(\vec{r}) \quad (1.2.1)$$

où les K_{α} sont les constantes de couplage associées aux opérateurs locaux $S_{\alpha}(\vec{r})$.

Lors d'une dilatation de facteur $b > 1$, les couplages K_{α} sont transformés en K'_{α} selon une loi de renormalisation :

$$\mathbf{K}' = \mathbf{R}_b \mathbf{K}. \quad (1.2.2)$$

Les transformations $\mathbf{R}_b$, lorsque $b > 1$, forment un semi-groupe, ce qui signifie que deux transformations successives avec $b = b_1$ et $b = b_2$ doivent être équivalentes à une dilatation globale $b_1 b_2$:

$$\mathbf{K}'' = \mathbf{R}_{b_2} \mathbf{K}' = \mathbf{R}_{b_2} \mathbf{R}_{b_1} \mathbf{K} = \mathbf{R}_{b_1 b_2} \mathbf{K}. \quad (1.2.3)$$

De telles transformations admettent des points fixes, définis par $\mathbf{K}^* = \mathbf{R}_b \mathbf{K}^*$, dans l'espace des paramètres. Or, la longueur de corrélation ξ se transforme par $\mathbf{R}_b$ selon :

$$\xi(\mathbf{K}') = \xi(\mathbf{K})/b \quad (1.2.4)$$

puisque les longueurs sont divisées par b par renormalisation. A un point fixe, on doit donc avoir :

$$\xi(\mathbf{K}^*) = \xi(\mathbf{K}^*)/b \quad (1.2.5)$$

ce qui implique que la longueur de corrélation ξ est infinie ou nulle.

On définit un point fixe caractérisé par $\xi = \infty$ comme un point fixe critique et un point fixe avec $\xi = 0$ comme un point fixe trivial.

Au voisinage d'un point fixe, on peut écrire l'hamiltonien sous la forme :

$$-\beta\mathcal{H}(\mathbf{K}^{(n)}) = -\beta\mathcal{H}(\mathbf{K}^*) + \sum_{\vec{r}} \sum_{\alpha} \Delta K_{\alpha}^{(n)} S_{\alpha}(\vec{r}) \quad (1.2.6)$$

où $\Delta K_\alpha^{(n)} = K_\alpha^{(n)} - K_\alpha^*$.

Lorsque l'écart au point fixe $\Delta K^{(n)}$ est faible, on peut linéariser la transformation $K^{(n+1)} = \mathbf{R}K^{(n)}$ (TOULOUSE et PFEUTY 1975, NIEMEIJER et VAN LEEUWEN 1976, LE BELLAC 1988, GOLDENFELD 1992), soit :

$$\Delta K_\alpha^{(n+1)} = \sum_\beta T_{\alpha\beta}^* \Delta K_\beta^{(n)}, \quad T_{\alpha\beta}^* = \left. \frac{\partial K_\alpha}{\partial K_\beta} \right|_{\{K^*\}}. \quad (1.2.7)$$

La matrice $\mathbf{T}^*$ peut être diagonalisée. On définit ses vecteurs propres à gauche Φ_i et ses valeurs propres λ_i comme suit :

$$\Phi_i \mathbf{T}^* = \lambda_i \Phi_i$$

soit, à partir de ses composantes :

$$\sum_{\alpha,\beta} \Phi_{i\alpha} T_{\alpha\beta}^* \Delta K_\beta^{(n)} = \underbrace{\sum_\alpha \Phi_{i\alpha} \Delta K_\alpha^{(n+1)}}_{g_i^{(n+1)}} = \lambda_i \underbrace{\sum_\beta \Phi_{i\beta} \Delta K_\beta^{(n)}}_{g_i^{(n)}} \quad (1.2.8)$$

où l'on a introduit les champs d'échelle $g_i^{(n)}$, quantités nulles au point critique, pour lesquels la transformation de renormalisation devient simplement :

$$g_i^{(n+1)} = \lambda_i g_i^{(n)}. \quad (1.2.9)$$

L'équation (1.2.3) impose alors que les valeurs propres λ_i se mettent sous la forme :

$$\lambda_i(b) = b^{y_i} \quad (1.2.10)$$

où y_i est la dimension anormale associée au champ d'échelle g_i .

La trajectoire du système dans l'espace des paramètres dépendra alors du signe des dimensions anormales.

- i) Si $y_i < 0$, le champ d'échelle g_i diminue par renormalisation jusqu'à s'annuler. Le comportement critique dominant n'en dépend pas et g_i est dit non pertinent.
- ii) Si $y_i > 0$, g_i augmente par renormalisation, ce qui éloigne le système du point fixe. Dans ce cas, le champ d'échelle est dit pertinent, il fait évoluer le système vers un nouveau point fixe dans l'espace des paramètres (figure 1.2.1).
- iii) Si $y_i = 0$, le champ d'échelle reste inchangé par dilatation ; il est dit marginal. Cette situation peut conduire à un comportement critique non universel. A un ordre plus élevé, le champ peut être marginalement pertinent ou non pertinent.

Sur la surface critique S_∞ (définie dans l'espace des paramètres comme l'ensemble des points ayant une longueur de corrélation infinie), il existe des points fixes stables, instables et des points fixes cols. En l'absence de variables marginales, le point représentatif du système est donc attiré vers un point fixe K^* stable, puisque les champs non pertinents diminuent par renormalisation.

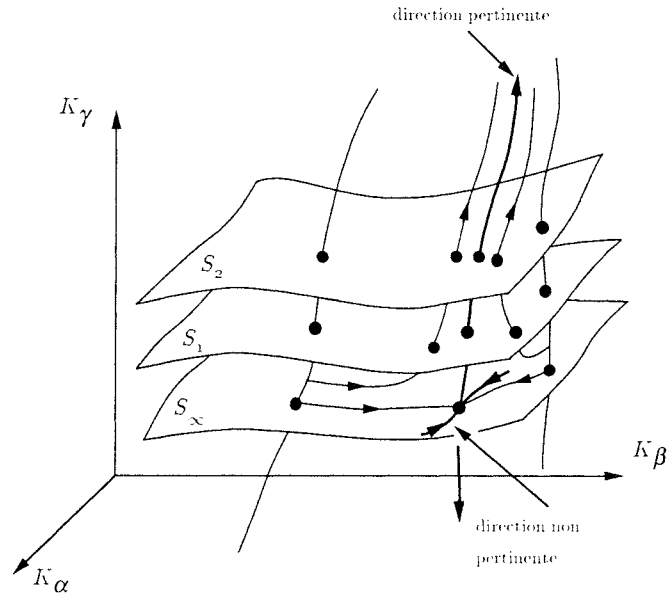


Figure 1.2.1 Trajectoires de renormalisation en présence de champs d'échelle pertinents et non pertinents.

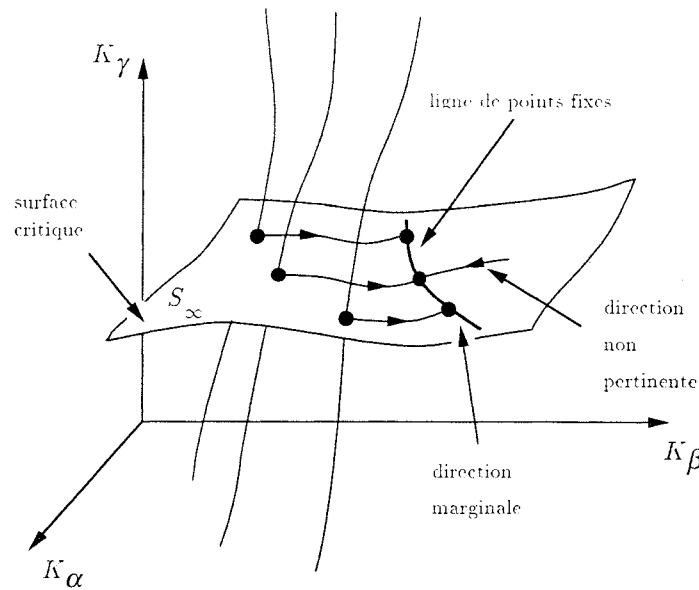


Figure 1.2.2 Renormalisation vers une ligne de points fixes lorsqu'il existe une variable marginale.

Lorsqu'il existe un champ d'échelle marginal, la surface critique comporte une ligne de points fixes. Les exposants critiques dépendent alors continûment de la valeur de la variable marginale (figure 1.2.2).

Les exposants critiques s'expriment tous en fonction de la dimension du système, d , et des dimensions y_i des champs d'échelle pertinents, 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 et la densité d'énergie ϵ d'autre part, où h et t renormalisent en $b^{y_h} h$ et $b^{y_t} t$.

2.2. Hypothèse d'homogénéité et lois d'échelle

On considère un système de paramètre de réseau a que l'on dilate par un facteur arbitraire b :

$$a \longrightarrow a' = ba. \quad (1.2.11)$$

La longueur du système restant invariante, $L'a' = La$, le volume se transforme selon $V' = b^{-d}V$. L'énergie libre totale du système reste également inchangée lors de cette dilatation : $F' = V'f' = Vf$; la densité d'énergie libre se transforme donc comme l'inverse du volume : $f' = b^d f$. La partie singulière de la densité d'énergie libre s'écrit alors comme une fonction homogène généralisée des champs d'échelle t et h :

$$f(t, h) = b^{-d} f(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (1.2.12)$$

On peut ainsi exprimer l'ensemble des exposants critiques en fonction de y_t , y_h et d , et retrouver très aisément les lois d'échelle qui relient les exposants entre eux.

L'expression (1.2.12) de la densité d'énergie libre permet de déduire des formes homogènes généralisées pour les diverses grandeurs thermodynamiques. Par exemple, dans le cas de l'aimantation définie par $m = -\frac{\partial f}{\partial h}$, on obtient :

$$m(t, h) = b^{-d+y_h} m(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (1.2.13)$$

expression compatible avec le comportement en loi de puissance au voisinage du point critique $m(t, 0) \sim t^\beta \sim b^{-\beta y_t}$ pour le choix $b = t^{-1/y_t}$ du facteur de dilatation. On en déduit $\beta y_t = d - y_h$. Les autres égalités entre exposants sont rassemblées dans le tableau 1.2.1.

quantité	comportement	exposant
chaleur spécifique	$C(t, 0) \sim t^{-\alpha}$	$\alpha = 2 - d/y_t$
aimantation	$m(t, 0) \sim t^\beta$	$\beta = \frac{d - y_h}{y_t}$
	$m(0, h) \sim h^{1/\delta}$	$\delta = \frac{y_h}{d - y_h}$
susceptibilité	$\chi(t, 0) \sim t^{-\gamma}$	$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t}$
fonction de corrélation	$G(0, 0, r) \sim r^{-d+2-\eta}$	$\eta = d - 2y_h + 2$
longueur de corrélation	$\xi(t, 0) \sim t^{-\nu}$	$\nu = \frac{1}{y_t}$
	$\xi(0, h) \sim h^{-\nu_h}$	$\nu_h = \frac{1}{y_h}$

Tableau 1.2.1 Définition des exposants critiques à partir de la dimension du système d et des dimensions des champs d'échelle y_t et y_h .

On obtient alors très facilement les lois d'échelle :

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

2.3. Effets de taille finie

Les systèmes étudiés numériquement par la suite sont de taille finie. Dans le cas d'interactions à courte portée, ces systèmes ne peuvent présenter de transition de phase, puisque les singularités des grandeurs physiques n'apparaissent que dans la limite thermodynamique. Cependant, il est possible de déduire les propriétés du 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, FISHER 1973, NIGHTINGALE 1976, HAMER et BARBER 1980, HAMER et BARBER 1981, BARBER 1983, CHRISTE et HENKEL 1993).

Pour traduire l'existence des effets de taille finie dans le comportement des grandeurs thermodynamiques, on définit un nouveau champ d'échelle, $\frac{1}{L}$, qui s'annule au point critique correspondant à $L \rightarrow \infty$. On peut écrire la densité d'énergie libre comme fonction homogène généralisée des champs d'échelle sous la forme :

$$f\left(t, h, \frac{1}{L}\right) = b^{-d} f\left(b^{y_t} t, b^{y_h} h, \frac{b}{L}\right). \quad (1.2.14)$$

On en déduit le comportement des propriétés physiques. Par exemple, une quantité thermodynamique Q caractérisée par un exposant critique ζ , $Q_\infty(t) \sim t^{-\zeta}$, se comportera, sur un système de taille caractéristique L , selon :

$$Q_L(t) = Q(t, L^{-1}) = b^{-x_Q} Q(b^{y_t} t, bL^{-1}) \quad (1.2.15)$$

Au point critique $t = 0$, on a alors :

$$Q_L(L) \sim L^{-x_Q}, \quad (1.2.16)$$

et le comportement en température, lorsque $L \rightarrow \infty$, s'écrit :

$$Q_\infty(t) \sim t^{\frac{x_Q}{y_t}}. \quad (1.2.17)$$

On en déduit la valeur de l'exposant critique $\zeta = -\frac{x_Q}{y_t} = -\nu x_Q$. Cette méthode nous permettra de déterminer les exposants critiques à partir de l'étude de systèmes de taille finie.

2.4. Systèmes anisotropes

La longueur de corrélation ξ d'un système au voisinage de la température critique T_c est la seule longueur pertinente du système. Lorsque la température approche la température critique, la longueur de corrélation ξ diverge selon :

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}. \quad (1.2.18)$$

Pour un système de dimension finie, les effets de taille finie présentés précédemment sont gouvernés par le rapport entre ξ et la dimension linéaire L du système. Ils nécessitent par ailleurs que la relation "d'hyperscaling" entre les exposants critiques soit satisfaite :

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (1.2.19)$$

où d est la dimension du système.

Si cette relation n'est pas vérifiée, le comportement critique asymptotique du système ne sera pas gouverné par une seule longueur divergeant au point critique. On peut ainsi distinguer deux situations différentes :

- i) Pour les systèmes au-dessus de leur dimension critique supérieure d_c , pour lesquels les exposants critiques prennent leur valeur de champ moyen, la relation entre les exposants critiques devient $d\nu > 2 - \alpha$. Dans ce cas, le comportement de taille finie au voisinage de la température critique est gouverné par des longueurs différentes de la longueur de corrélation ξ (BINDER *et al* 1985, BINDER 1985).
- ii) Dans le cas des systèmes anisotropes, la décroissance des fonctions de corrélation dans des directions différentes peut être gouvernée par des longueurs de corrélation qui divergent avec des exposants différents (BINDER et WANG 1989).

On peut considérer, pour illustrer le second cas, un système avec une anisotropie uniaxiale. Les longueurs se transforment alors de façon anormale dans une direction : $l'_{\parallel} = b^{-z} l_{\parallel}$. En particulier, dans le cas de la longueur de corrélation, on a :

$$\begin{aligned} \xi_{\parallel} &\sim t^{-\nu_{\parallel}} \\ \xi_{\perp} &\sim t^{-\nu} \end{aligned} \quad (1.2.20)$$

où $\nu_{\parallel}$ et $\nu = \frac{1}{y_t}$ sont différents.

Dans ce cas, la fonction de corrélation relative à l'opérateur ϕ peut s'écrire :

$$G_{\phi\phi}(r_{\parallel}, r_{\perp}, t) = b^{-2x_{\phi}} G_{\phi\phi} \left(\frac{r_{\parallel}}{b^z}, \frac{r_{\perp}}{b}, b^{1/\nu} t \right) = \xi_{\perp}^{-2x_{\phi}} \tilde{G} \left(\frac{r_{\parallel}}{\xi_{\parallel}}, \frac{r_{\perp}}{\xi_{\perp}} \right) \quad (1.2.21)$$

où l'on a posé $b = t^{-\nu} = \xi_{\perp}$ et $\xi_{\parallel} = \xi_{\perp}^z$, l'exposant d'anisotropie z étant défini par le rapport des exposants associés aux longueurs de corrélation dans les deux directions

$$\nu_{\parallel} = z\nu. \quad (1.2.22)$$

De même, la densité d'énergie libre s'écrit comme une fonction homogène :

$$f\left(t, h, \frac{1}{L}\right) = b^{-(d-1)-z} f\left(b^{y_t} t, b^{y_h} h, \frac{b}{L}\right) \quad (1.2.23)$$

puisque $V = L^{d-1} L_{\parallel}$ donc $V' = b^{-(d-1)-z} V$.

C'est le cas par exemple de systèmes tels que les points de Lifshitz uniaxiaux (HORNREICH, LUBAN et SHTRIKMAN 1975, HORNREICH et BRUCE 1978, GREST et SAK 1978) pour lesquels une nouvelle relation "d'hyperscaling" est nécessaire :

$$\nu_{\parallel} + (d-1)\nu = 2 - \alpha. \quad (1.2.24)$$

3. Le modèle d'Ising bidimensionnel

L'étude de systèmes-modèles est un sujet majeur en physique statistique. Ces systèmes, parmi lesquels le modèle d'Ising est le plus simple, sont intéressants pour leurs propriétés physiques au voisinage du point de transition.

L'hypothèse d'universalité établit en effet que le comportement d'un système au voisinage de son point critique ne dépend que des propriétés très générales comme la dimension et les symétries du modèle. Cela signifie que les systèmes réels, au voisinage des transitions de phase du second ordre, pourront être décrits de façon satisfaisante par des modèles théoriques très simples qui ne contiendront que quelques éléments essentiels.

3.1. Le modèle classique de Lenz-Ising à deux dimensions

Le modèle de Lenz-Ising, introduit par Lenz en 1920 comme une description simplifiée du ferromagnétisme (LENZ 1920), consiste en une assemblée de moments magnétiques $s_{k,l}$, variables réelles pouvant prendre les valeurs ± 1 (en unités μ_B), et situés sur les noeuds d'un réseau. Le réseau représente la structure cristalline dont les noeuds sont occupés par des ions porteurs de moments magnétiques. Le modèle d'Ising correspond à un système de spins 1/2 avec anisotropie axiale extrême. Le modèle a été résolu à une dimension par Ising (ISING 1925) et à deux dimensions par Onsager (ONSAGER 1944).

On associe aux deux directions du réseau une direction spatiale et une direction temporelle. Ce choix trouvera une justification par la suite.

On considère le cas d'un modèle bidimensionnel anisotrope sur un réseau carré. Les couplages d'échange ferromagnétique dans les directions spatiale et temporelle (les interactions sont limitées aux premiers voisins) sont notés J_s et J_t . L'énergie d'une configuration s'écrit alors :

$$S\{s_{k,l}\} = - \sum_{k=1}^{N_t} \sum_{l=1}^L (J_t s_{k,l} s_{k+1,l} + J_s s_{k,l} s_{k,l+1}) \quad J_t > 0, \quad J_s > 0 \quad (1.3.1)$$

où il y a N_t rangées dans la direction temporelle et L colonnes dans la direction spatiale (figure 1.3.1).

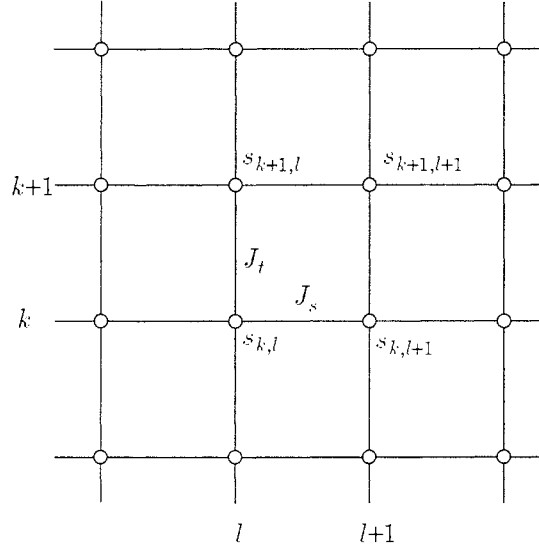


Figure 1.3.1 Modèle de Lenz-Ising à $2d$ sur réseau carré.

On utilise des conditions périodiques dans la direction temporelle : $k + N_t = k$. Le modèle présente une transition de phase du second ordre (singularité des grandeurs thermodynamiques) à température finie. Le point critique est localisé par des arguments de dualité (KRAMERS et WANNIER 1941, SCHULTZ, MATTIS et LIEB 1964) et l'équation de la ligne critique s'écrit :

$$\sinh 2\beta_t^c \sinh 2\beta_s^c = 1, \quad \beta_t = \frac{J_t}{k_B T}, \quad \beta_s = \frac{J_s}{k_B T}. \quad (1.3.2)$$

Elle sépare les phases ferromagnétique et paramagnétique dans l'espace des paramètres (figure 1.3.2).

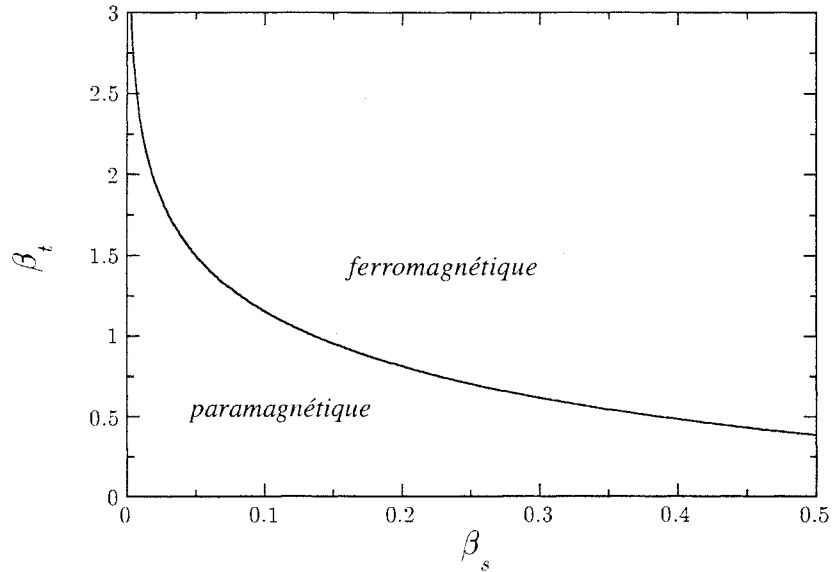


Figure 1.3.2 Diagramme de phase du modèle d'Ising bidimensionnel dans l'espace des paramètres.

L'aimantation spontanée du système s'annule à la température critique et se comporte selon :

$$m_0(T) \sim (T_c - T)^\beta, \quad \beta = \frac{1}{8} \quad (1.3.3)$$

au voisinage du point critique ($T < T_c$). Elle est représentée sur la figure 1.3.3, ainsi que la chaleur spécifique :

$$C(T) = -T \frac{\partial^2 f(T)}{\partial T^2} \quad (1.3.4)$$

qui présente une divergence logarithmique au point critique (ONSAGER 1944).

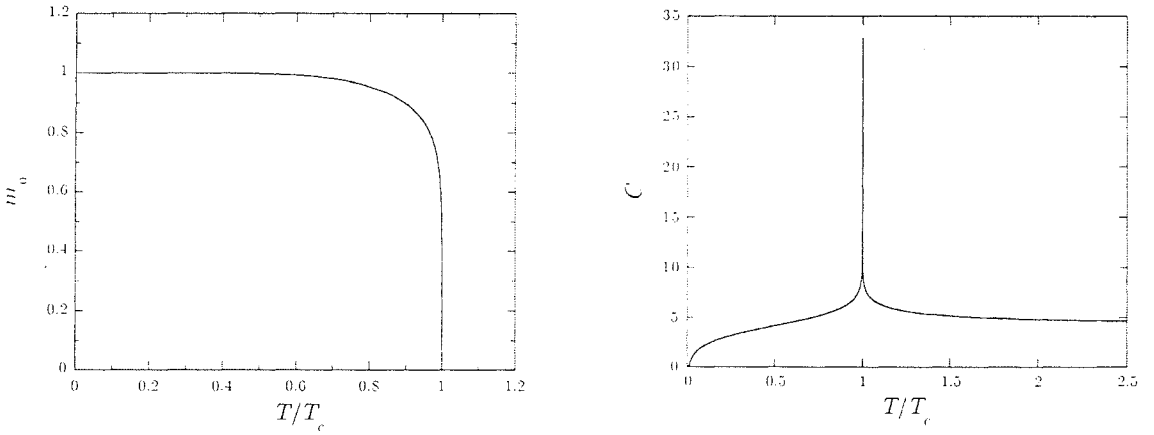


Figure 1.3.3 Aimantation spontanée et chaleur spécifique du modèle d'Ising homogène à deux dimensions.

3.2. Le modèle d'Ising en champ transverse

3.2.1. Limite hamiltonienne

La formulation de Feynman de la mécanique quantique permet d'établir une analogie formelle entre mécanique quantique et physique statistique (FEYNMAN 1948). Dans ce cadre, un système classique de physique statistique peut être traité à partir de la mécanique quantique, l'une des d dimensions d'espace étant générée par l'évolution temporelle du système quantique à $d - 1$ dimensions (KOGUT 1979, POLYAKOV 1987, NEGELE et ORLAND 1988). On peut ainsi reformuler le modèle d'Ising bidimensionnel 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, SUZUKI 1976, FRADKIN et SUSSKIND 1978, KOGUT 1979, JULLIEN 1981, POLYAKOV 1987) (figure 1.3.4).

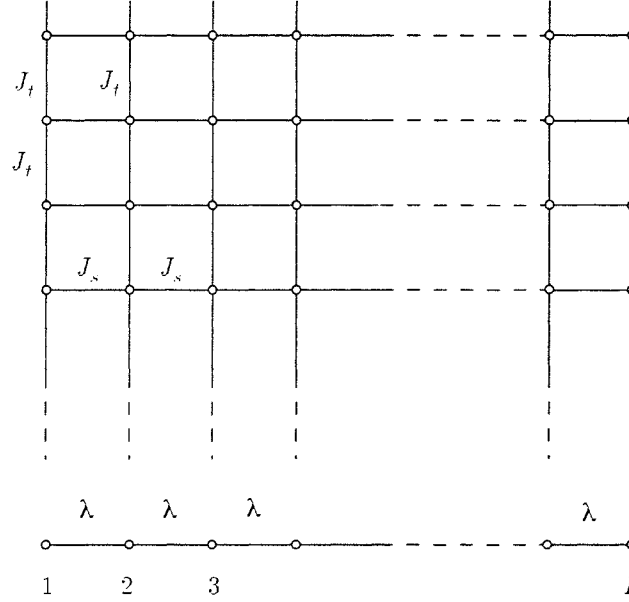


Figure 1.3.4 Modèle d'Ising homogène anisotrope (en haut) et la chaîne quantique correspondante dans la limite anisotrope extrême (en bas).

Pour réaliser cette correspondance, on réécrit l'énergie d'une configuration (1.3.1) en modifiant le zéro des énergies et en incluant la température dans les couplages :

$$S\{s_{k,l}\} = \sum_{k=1}^{N_t} \sum_{l=1}^L \left(\frac{1}{2} \beta_t (s_{k,l} - s_{k+1,l})^2 - \beta_s s_{k,l} s_{k,l+1} \right). \quad (1.3.5)$$

Cette expression est une somme sur les rangées k du réseau :

$$S\{s_{k,l}\} = \sum_{k=1}^{N_t} H(k, k+1)$$

$$H(k, k+1) = \frac{1}{2} \beta_t \sum_{l=1}^L (s_{k,l} - s_{k+1,l})^2 - \beta_s \sum_{l=1}^L s_{k,l} s_{k,l+1} \quad (1.3.6)$$

où l'énergie $H(k, k+1)$ couple deux rangées voisines par l'intermédiaire du premier terme. On définit alors la matrice de transfert $\hat{\mathcal{T}}$ par ses éléments de matrice dans la base des configurations de spins :

$$\langle \{k\} | \hat{\mathcal{T}} | \{k+1\} \rangle = \exp[-H(k, k+1)] \quad (1.3.7)$$

où $|\{k\}\rangle$ représente une configuration de la rangée k . $\hat{\mathcal{T}}$ est une matrice de dimension $2^L \times 2^L$ interprétée comme l'opérateur de transition d'une rangée k à la rangée suivante $k+1$ et que l'on identifie à l'opérateur d'évolution temporelle d'un système quantique :

$$\hat{\mathcal{T}} = e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}} \quad (1.3.8)$$

où $\hbar = 1$, $\tau = it$ est le pas du réseau dans la direction temporelle et $\hat{\mathcal{H}}$ l'hamiltonien que l'on cherche à déterminer. L'amplitude de transition de la rangée k à la rangée $k + 1$ ayant n spins inversés par rapport à la rangée k s'écrit :

$$\langle \{k\} | \hat{\mathcal{T}} | \{k + 1\} \rangle_n = \exp(-2n\beta_t) \exp \left(\beta_s \sum_{l=1}^L s_{k,l} s_{k,l+1} \right). \quad (1.3.9)$$

Dans la limite anisotrope extrême,

$$\beta_s \rightarrow 0, \quad \beta_t \rightarrow \infty \quad (1.3.10)$$

les probabilités de retournement des spins sont faibles et on pose $\beta_s = \lambda e^{-2\beta_t}$, ce qui conduit à écrire les amplitudes de transition à 0, 1, ... n spins inversés :

$$\begin{aligned} \langle \{k\} | \hat{\mathcal{T}} | \{k + 1\} \rangle_0 &= 1 + \lambda e^{-2\beta_t} \sum_{l=1}^L s_{k,l} s_{k,l+1} \\ \langle \{k\} | \hat{\mathcal{T}} | \{k + 1\} \rangle_1 &= e^{-2\beta_t} + O(e^{-4\beta_t}) \\ \langle \{k\} | \hat{\mathcal{T}} | \{k + 1\} \rangle_n &= e^{-2n\beta_t} + O(e^{-2(n+1)\beta_t}). \end{aligned} \quad (1.3.11)$$

On définit sur chaque site l de la rangée k les matrices de Pauli $\hat{\sigma}_l^x$ et $\hat{\sigma}_l^z$, ce qui permet d'identifier les éléments de matrice (1.3.11). Si on choisit de travailler dans la base des états propres de $\hat{\sigma}^x$, l'élément diagonal correspondant à zéro spin inversé s'écrit :

$$\langle \{k\} | (1 + \lambda e^{-2\beta_t} \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_{l+1}^x) | \{k + 1\} \rangle_0.$$

De même, pour l'inversion d'un spin entre les configurations $\{k\}$ et $\{k + 1\}$, on a :

$$\langle \{k\} | e^{-2\beta_t} \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^z | \{k + 1\} \rangle_1.$$

La matrice de transfert peut donc s'écrire sous la forme d'un développement en puissances de $e^{-2\beta_t}$:

$$\hat{\mathcal{T}} = 1 + e^{-2\beta_t} \left(\lambda \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_{l+1}^x + \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^z \right) + e^{-4\beta_t} \sum_{\substack{l,m=1 \\ l \neq m}}^L \hat{\sigma}_l^z \hat{\sigma}_m^z + \dots \quad (1.3.12)$$

La limite anisotrope extrême permet de se limiter aux deux premiers termes et on fait tendre le pas τ du réseau dans la direction temporelle vers 0 pour restaurer le continuum dans cette direction. On a donc :

$$e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}} = 1 - \tau \hat{\mathcal{H}} + O(\tau^2). \quad (1.3.13)$$

En posant alors $\tau = 2 \exp(-2\beta_t) \rightarrow 0$, on obtient l'hamiltonien du modèle d'Ising en champ transverse :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \left(\lambda \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_{l+1}^x + \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^z \right). \quad (1.3.14)$$

On peut relier les paramètres de cet hamiltonien aux couplages initiaux du modèle classique β_t et β_s , en notant que $\hat{\mathcal{H}}$ est proportionnel à l'hamiltonien⁽¹⁾

$$-\frac{1}{2}\beta_s \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_{l+1}^x - \frac{1}{2}\tilde{\beta}_t \sum_{l=1}^L \hat{\sigma}_l^z$$

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

$$\tilde{\beta}_t \simeq \tanh \beta_t = e^{-2\beta_t}. \quad (1.3.15)$$

Le point critique du modèle défini par l'hamiltonien (1.3.14) s'obtient en remarquant que, dans la limite anisotrope extrême, la courbe $\beta_s = e^{-2\beta_t}$ tend asymptotiquement vers la ligne critique (1.3.2) (figure 1.3.5).

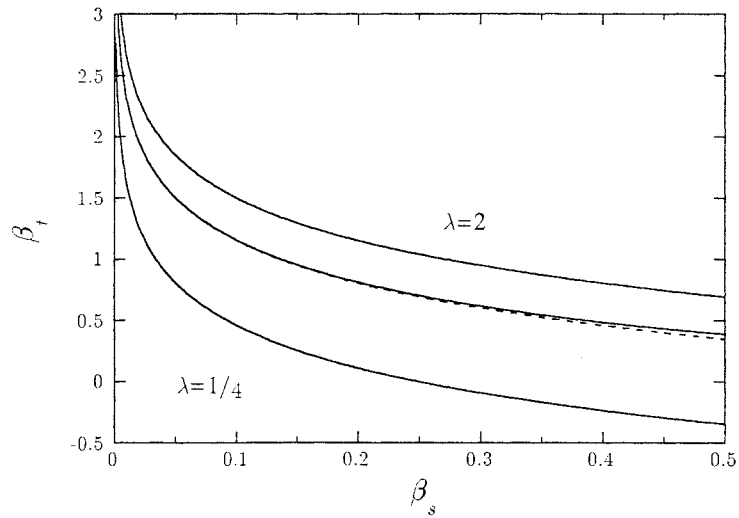


Figure 1.3.5 Diagramme de phase du modèle d'Ising dans la limite anisotrope extrême. La courbe en pointillés représente la limite anisotrope extrême $\beta_s^c e^{2\beta_t^c} = 1$.

(1) On utilise généralement la notation suivante, valable pour une chaîne quantique inhomogène : $\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum J_l \hat{\sigma}_l^x \hat{\sigma}_{l+1}^x - \frac{1}{2} \sum h_l \hat{\sigma}_l^z$ où $J_l = \beta_s(l)/\tilde{\beta}_t$, $h_l = \tilde{\beta}_t(l)/\tilde{\beta}_t$, $J_l = \lambda_l h_l$, $\tilde{\beta}_t(l) = -\frac{1}{2} \ln \tanh \beta_t(l)$ et $\tilde{\beta}_t$ est une constante de référence.

On a donc :

$$\begin{aligned}\lambda_c &= 1 \text{ au point critique} \\ \lambda &> 1 \text{ dans la phase ordonnée} \\ \lambda &< 1 \text{ dans la phase désordonnée}\end{aligned}$$

où λ^{-1} joue le rôle de la température :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\tilde{\beta}_t}{\beta_s}. \quad (1.3.16)$$

Les correspondances entre mécanique quantique et physique statistique sont résumées dans le tableau suivant :

Mécanique quantique	Correspondance	Physique statistique
temps t	$t = -i\tau$	pas du réseau τ
évolution temporelle	$d \rightarrow d + 1$	dimension spatiale supplémentaire
fluctuations quantiques $\hbar$	$\hbar = k_B T$	fluctuations thermiques T
opérateur d'évolution $\hat{U}(t)$	$\hat{U}(-i\tau) = \hat{T}$	matrice de transfert $\hat{T}$
état fondamental E_0	$\tau E_0 = F$	énergie libre F
gap $E_\beta - E_0$	$E_\beta - E_0 = \frac{1}{\xi}$	longueur de corrélation ξ

Tableau 1.3.1 Tableau de correspondance entre mécanique quantique et physique statistique.

3.2.2. Diagonalisation du modèle d'Ising en champ transverse

L'hamiltonien d'Ising en champ transverse (1.3.14) représente un système quantique de L spins de Pauli avec des interactions entre premiers voisins. C'est un problème à N corps que l'on peut résoudre de façon exacte par des méthodes de seconde quantification, puisqu'on peut le transformer en un système de fermions libres. On utilise pour cela les transformations de Jordan-Wigner (JORDAN et WIGNER 1928) et de Bogoljubov-Valatin (BOGOLJUBOV 1958).

La transformation de Jordan-Wigner consiste à exprimer l'hamiltonien en fonction des opérateurs $\hat{c}_l$ et $\hat{c}_l^\dagger$ obéissant aux relations d'anticommutation des fermions : $\{\hat{c}_l^\dagger, \hat{c}_m\} = \delta_{lm}$, $\{\hat{c}_l^\dagger, \hat{c}_m^\dagger\} = \{\hat{c}_l, \hat{c}_m\} = 0$

$$\hat{c}_l = \prod_{j=1}^{l-1} \exp(i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-) \hat{\sigma}_l^- \quad (1.3.17)$$

$$\hat{c}_l^\dagger = \hat{\sigma}_l^+ \prod_{j=1}^{l-1} \exp(-i\pi \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^-) \quad (1.3.18)$$

où les $\hat{\sigma}_l^\pm$ sont les opérateurs échelle habituels :

$$\hat{\sigma}_l^\pm = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_l^x \pm i\hat{\sigma}_l^y). \quad (1.3.19)$$

En inversant les relations (1.3.17) et (1.3.18), on obtient :

$$\hat{\sigma}_l^+ = \hat{c}_l^+ \prod_{j=1}^{l-1} \exp(i\pi \hat{c}_j^+ \hat{c}_j), \quad (1.3.20)$$

$$\hat{\sigma}_l^- = \prod_{j=1}^{l-1} \exp(-i\pi \hat{c}_j^+ \hat{c}_j) \hat{c}_l \quad (1.3.21)$$

et

$$\hat{\sigma}_l^z = 2\hat{c}_l^+ \hat{c}_l - 1. \quad (1.3.22)$$

Si l'on se limite au problème avec conditions de bords libres, l'hamiltonien de la chaîne quantique inhomogène s'écrit alors :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^L (2\hat{c}_l^+ \hat{c}_l - 1) - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{L-1} \lambda(l) (\hat{c}_l^+ - \hat{c}_l) (\hat{c}_{l+1}^+ + \hat{c}_{l+1}). \quad (1.3.23)$$

On diagonalise cet hamiltonien par transformation canonique en introduisant les opérateurs $\hat{\eta}_\alpha$ et $\hat{\eta}_\alpha^+$ (LIEB, SCHULTZ et MATTIS 1961, PFEUTY 1970) :

$$\hat{\eta}_\alpha = \sum_j (g_{\alpha j} \hat{c}_j + h_{\alpha j} \hat{c}_j^+), \quad (1.3.24)$$

$$\hat{\eta}_\alpha^+ = \sum_j (g_{\alpha j} \hat{c}_j^+ + h_{\alpha j} \hat{c}_j) \quad (1.3.25)$$

et $\hat{\mathcal{H}}$ prend alors la forme diagonale :

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha (\hat{\eta}_\alpha^+ \hat{\eta}_\alpha - \frac{1}{2}). \quad (1.3.26)$$

Les énergies d'excitation ε_α obéissent aux relations matricielles suivantes :

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_\alpha = \varepsilon_\alpha \Psi_\alpha, \quad (1.3.27)$$

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B})\Psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \Phi_\alpha \quad (1.3.28)$$

où les vecteurs Φ_α et Ψ_α sont définis par leurs composantes, liées aux coefficients dans (1.3.24) et (1.3.25) :

$$\phi_\alpha(j) = g_{j\alpha} + h_{j\alpha}, \quad (1.3.29)$$

$$\psi_\alpha(j) = g_{j\alpha} - h_{j\alpha}. \quad (1.3.30)$$

En combinant les deux relations matricielles (1.3.27) et (1.3.28), on obtient l'équation aux valeurs propres :

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_\alpha = \varepsilon_\alpha^2 \Phi_\alpha. \quad (1.3.31)$$

Les matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont des matrices réelles, tridiagonales et respectivement symétrique et antisymétrique :

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & \lambda(1) & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \lambda(1) & 2 & \lambda(2) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda(2) & 2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \lambda(L-2) & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \lambda(L-2) & 2 & \lambda(L-1) \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \lambda(L-1) & 2 \end{pmatrix} \quad (1.3.32)$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\lambda(1) & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \lambda(1) & 0 & -\lambda(2) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda(2) & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & -\lambda(L-2) & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \lambda(L-2) & 0 & -\lambda(L-1) \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \lambda(L-1) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.3.33)$$

La résolution du problème nécessite la diagonalisation de la matrice des excitations $(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})$ qui permet d'obtenir le spectre de l'hamiltonien.

3.2.3. Propriétés locales

• AIMANTATION LOCALE :

L'aimantation locale sur le site l d'une chaîne avec conditions de bords libres s'exprime à partir du comportement asymptotique (lorsque $N_t \rightarrow \infty$) de la fonction de corrélation spin-spin :

$$G_\sigma^l(\tau) = \lim_{N_t \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}[\hat{\sigma}_l^x \hat{\mathcal{T}}^\tau \hat{\sigma}_l^x \hat{\mathcal{T}}^{N_t - \tau}]}{\text{Tr} \hat{\mathcal{T}}^{N_t}} = \langle \hat{\sigma}_l^x(0) \hat{\sigma}_l^x(\tau) \rangle = \langle 0 | \hat{\sigma}_l^x(0) \hat{\sigma}_l^x(\tau) | 0 \rangle \quad (1.3.34)$$

où τ est le temps imaginaire et où les opérateurs s'écrivent, dans la représentation de Heisenberg, $\hat{\sigma}_l^x(\tau) = \exp(\tau\hat{\mathcal{H}})\hat{\sigma}_l^x \exp(-\tau\hat{\mathcal{H}})$. On a :

$$\langle 0|e^{\tau\hat{\mathcal{H}}} = e^{\tau E_0} \langle 0|, \quad e^{-\tau\hat{\mathcal{H}}} |0\rangle = e^{-\tau E_0} |0\rangle \quad (1.3.35)$$

où E_0 est l'énergie de l'état fondamental.

Dans la base qui diagonalise l'hamiltonien, on obtient :

$$G_\sigma^l(\tau) = |\langle \sigma | \hat{\sigma}_l^x | 0 \rangle|^2 e^{-\tau(E_\sigma - E_0)} + \sum_{i>1} |\langle i | \hat{\sigma}_l^x | 0 \rangle|^2 e^{-\tau(E_i - E_0)} \quad (1.3.36)$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental et $|\sigma\rangle = \hat{\eta}_1^+ |0\rangle$ l'état excité de plus basse énergie à un fermion. Dans la phase ordonnée, $|\sigma\rangle$ est dégénéré avec l'état fondamental $|0\rangle$ et donne la seule contribution non nulle à $G_\sigma^l(\tau)$ lorsque $\tau \rightarrow \infty$. L'aimantation locale se calcule donc à partir de l'élément de matrice :

$$m(l) = \langle \sigma | \hat{\sigma}_l^x | 0 \rangle \quad (1.3.37)$$

où

$$\hat{\sigma}_l^x = (\hat{c}_l^+ + \hat{c}_l) \prod_{k=1}^{l-1} (1 - 2\hat{c}_k^+ \hat{c}_k) \quad (1.3.38)$$

en utilisant les opérateurs fermions $\hat{c}_l$ et $\hat{c}_l^+$. Or $1 - 2\hat{c}_k^+ \hat{c}_k$ vaut -1 si $\hat{c}^+ \hat{c} = 1$ et 1 si $\hat{c}^+ \hat{c} = 0$. On a donc les identités suivantes :

$$1 - 2\hat{c}_k^+ \hat{c}_k = e^{i\pi \hat{c}_k^+ \hat{c}_k} = (\hat{c}_k^+ + \hat{c}_k)(\hat{c}_k^+ - \hat{c}_k) \quad (1.3.39)$$

d'où l'on déduit :

$$\hat{\sigma}_l^x = \prod_{k=1}^{l-1} [(\hat{c}_k^+ + \hat{c}_k)(\hat{c}_k^+ - \hat{c}_k)] (\hat{c}_l^+ + \hat{c}_l) \quad (1.3.40)$$

puisque $\hat{c}_{k \neq l}$ et $\hat{c}_l$ anticommulent.

On pose alors :

$$\hat{A}_k = \hat{c}_k^+ + \hat{c}_k, \quad (1.3.41)$$

$$\hat{B}_k = \hat{c}_k^+ - \hat{c}_k \quad (1.3.42)$$

et on obtient l'aimantation sous la forme d'un élément de matrice dans l'état fondamental (BERCHE, BERCHE et TURBAN 1996) :

$$m(l) = \langle 0 | \hat{\eta}_1 \hat{A}_1 \hat{B}_1 \hat{A}_2 \hat{B}_2 \dots \hat{A}_{l-1} \hat{B}_{l-1} \hat{A}_l | 0 \rangle. \quad (1.3.43)$$

L'aimantation locale peut être obtenue, comme les fonctions de corrélation, à l'aide du théorème de Wick qui conduit à une somme d'éléments de matrice à deux

opérateurs (LIEB, SCHULTZ et MATTIS 1961, PFEUTY 1970). Il faut donc évaluer ces éléments de matrice. Par exemple :

$$H_j \equiv \langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_j \rangle = \langle 0 | \hat{\eta}_1 \hat{A}_j | 0 \rangle. \quad (1.3.44)$$

En revenant aux opérateurs $\hat{\eta}$:

$$\hat{c}_j^+ = \sum_{\alpha} (g_{\alpha}(j) \hat{\eta}_{\alpha}^+ + h_{\alpha}(j) \hat{\eta}_{\alpha}), \quad (1.3.45)$$

$$\hat{c}_j = \sum_{\alpha} (g_{\alpha}(j) \hat{\eta}_{\alpha} + h_{\alpha}(j) \hat{\eta}_{\alpha}^+) \quad (1.3.46)$$

et en utilisant les relations d'anticommutation des fermions, on obtient :

$$\begin{aligned} \hat{A}_j &= \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(j) (\hat{\eta}_{\alpha}^+ + \hat{\eta}_{\alpha}), \\ \hat{B}_k &= \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(k) (\hat{\eta}_{\alpha}^+ - \hat{\eta}_{\alpha}) \end{aligned} \quad (1.3.47)$$

soit :

$$H_j = \sum_{\alpha} (g_{\alpha}(j) + h_{\alpha}(j)) \langle 0 | \hat{\eta}_1 \hat{\eta}_{\alpha}^+ | 0 \rangle = g_1(j) + h_1(j) \quad (1.3.48)$$

ou :

$$H_j = \phi_1(j). \quad (1.3.49)$$

On obtient de même :

$$H'_j \equiv \langle \hat{\eta}_1 \hat{B}_j \rangle = \psi_1(j), \quad (1.3.50)$$

$$G_{ji} \equiv \langle \hat{B}_i \hat{A}_j \rangle = - \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(i) \phi_{\alpha}(j) = - \langle \hat{A}_i \hat{B}_j \rangle, \quad (1.3.51)$$

$$G'_{ij} \equiv \langle \hat{A}_i \hat{A}_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (1.3.52)$$

$$G''_{ij} \equiv \langle \hat{B}_i \hat{B}_j \rangle = -\delta_{ij}. \quad (1.3.53)$$

En appliquant directement le théorème de Wick, on constate que dans $m(l)$ n'apparaissent jamais de paires $\langle \hat{A}_i \hat{A}_i \rangle$ ou $\langle \hat{B}_i \hat{B}_i \rangle$ qui seraient non nulles. Il ne peut rester que des termes de la forme $\langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_i \rangle \langle \hat{A}_j \hat{B}_k \rangle \langle \hat{\eta}_1 \hat{B}_n \rangle$. De plus, si une paire $\langle \hat{\eta}_1 \hat{B}_n \rangle$ apparaît dans un terme, celui-ci contiendra également une

paire de la forme $\langle \hat{A}_i \hat{A}_j \rangle_{i \neq j}$ nécessairement nulle. On ne peut donc avoir que des termes $\langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_i \rangle \langle \hat{B}_j \hat{A}_k \rangle$ qui contribueront finalement à l'aimantation locale.

Le produit le plus simple de cette forme est :

$$\langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_1 \rangle \langle \hat{B}_1 \hat{A}_2 \rangle \langle \hat{B}_2 \hat{A}_3 \rangle \dots \langle \hat{B}_{l-1} \hat{A}_l \rangle$$

et on doit évaluer toutes les permutations possibles en laissant fixes $\hat{\eta}_1$ et les $\hat{B}_i$, en comptant la signature de la permutation.

Cela revient à écrire un déterminant dont le terme précédent occupe la diagonale :

$$\begin{vmatrix} \langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_1 \rangle & \langle \hat{B}_1 \hat{A}_1 \rangle & \langle \hat{B}_2 \hat{A}_1 \rangle & \dots & \langle \hat{B}_{l-1} \hat{A}_1 \rangle \\ \langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_2 \rangle & \langle \hat{B}_1 \hat{A}_2 \rangle & \langle \hat{B}_2 \hat{A}_2 \rangle & \dots & \langle \hat{B}_{l-1} \hat{A}_2 \rangle \\ \langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_3 \rangle & \langle \hat{B}_1 \hat{A}_3 \rangle & \langle \hat{B}_2 \hat{A}_3 \rangle & \dots & \langle \hat{B}_{l-1} \hat{A}_3 \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \hat{\eta}_1 \hat{A}_l \rangle & \langle \hat{B}_1 \hat{A}_l \rangle & \langle \hat{B}_2 \hat{A}_l \rangle & \dots & \langle \hat{B}_{l-1} \hat{A}_l \rangle \end{vmatrix}$$

On obtient donc finalement :

$$m(l) = \begin{vmatrix} H_1 & G_{1,1} & G_{1,2} & \dots & G_{1,l-1} \\ H_2 & G_{2,1} & G_{2,2} & \dots & G_{2,l-1} \\ H_3 & G_{3,1} & G_{3,2} & \dots & G_{3,l-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_l & G_{l,1} & G_{l,2} & \dots & G_{l,l-1} \end{vmatrix} \quad (1.3.54)$$

Dans le cas particulier du site de surface $l = 1$, on a alors simplement $m_s = \phi_1(1)$.

Lorsque le système est semi-infini ($L \rightarrow \infty$), il est possible d'obtenir une forme analytique de l'aimantation de surface en fonction des couplages (PESCHEL 1984). En effet, pour un système infini, il y a brisure spontanée de symétrie au point critique. Pour $T < T_c$, il existe deux états ferromagnétiques. L'état fondamental est alors doublement dégénéré, ce qui entraîne que $\varepsilon_1 = 0$. On a donc :

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_1 = 0 \quad (1.3.55)$$

soit :

$$\begin{array}{ccc} -\phi_1(1) & -\lambda(1)\phi_1(2) & = 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ -\phi_1(j) & -\lambda(j)\phi_1(j+1) & = 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{array} \quad (1.3.56)$$

On obtient ainsi une relation de récurrence :

$$\phi_1(j) = \phi_1(1) \prod_{k=1}^{j-1} \left(-\frac{1}{\lambda(k)} \right). \quad (1.3.57)$$

En utilisant la condition de normation sur Φ_1 , l'aimantation de surface s'écrit finalement :

$$m_s = \phi_1(1) = \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{k=1}^j \lambda(k)^{-2} \right)^{-1/2}. \quad (1.3.58)$$

Cette relation permettra d'évaluer analytiquement l'aimantation de surface dans de nombreux cas.

La figure 1.3.6 présente la variation de l'aimantation de surface et de volume du modèle d'Ising en champ transverse homogène en fonction du couplage λ .

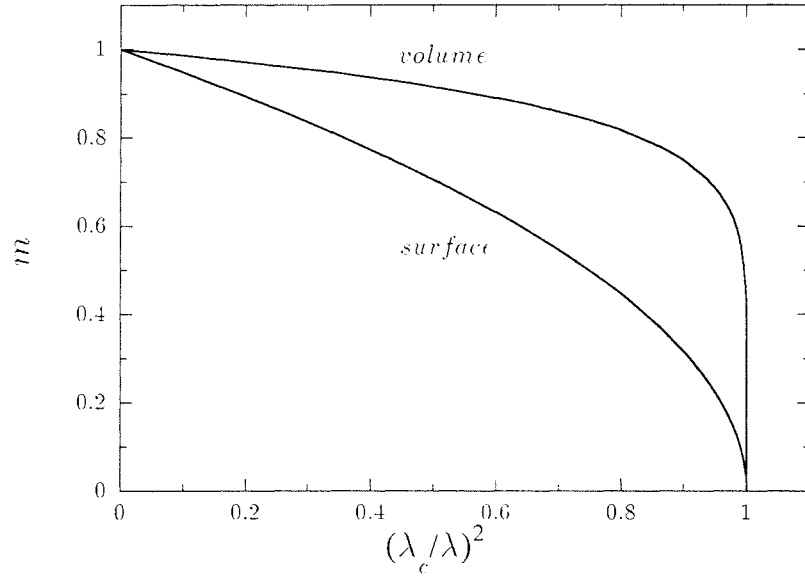


Figure 1.3.6 Aimantation de surface et de volume du modèle d'Ising en champ transverse homogène en fonction de l'analogie de la température.

- DENSITÉ D'ÉNERGIE LOCALE :

La densité d'énergie locale $e(l) = \langle 0 | \hat{\sigma}_l^z | 0 \rangle$ contient en général une partie régulière difficile à extraire. On considère donc plutôt la fonction de corrélation énergie-énergie $G_\epsilon^l(\tau) = \langle \hat{\sigma}_l^z(0) \hat{\sigma}_l^z(\tau) \rangle - e(l)^2$ de dimension d'échelle $2x_\epsilon$. Lorsque l'on travaille dans la base qui diagonalise l'hamiltonien, on obtient :

$$G_\epsilon^l(\tau) = \sum_{i>0} |\langle i | \hat{\sigma}_l^z | 0 \rangle|^2 e^{-\tau(E_i - E_0)} \quad (1.3.59)$$

où $\hat{\sigma}_l^z$ couple uniquement l'état fondamental aux états excités à deux fermions.

Le premier élément de matrice non nul de $\hat{\sigma}_l^z$ concerne donc l'état fondamental et l'état excité à deux fermions de plus basse énergie $|\epsilon\rangle = \hat{\eta}_1^+ \hat{\eta}_2^+ |0\rangle$:

$$e_z(l) = \langle \epsilon | \hat{\sigma}_l^z | 0 \rangle \quad (1.3.60)$$

qui se comportera, par changement d'échelle, comme la densité d'énergie locale e_l . On utilise alors $\hat{\sigma}_l^z = 2\hat{c}_l^+\hat{c}_l - 1$ et la relation d'orthogonalité des états propres de l'hamiltonien pour obtenir :

$$e_z(l) = 2 \langle 0 | \hat{\eta}_2 \hat{\eta}_1 \hat{c}^+(l) \hat{c}(l) | 0 \rangle. \quad (1.3.61)$$

En exprimant $\hat{c}^+(l)\hat{c}(l)$ en fonction des opérateurs $\hat{\eta}^+$ et $\hat{\eta}$, on remarque que les seuls produits d'opérateurs qui ont une contribution non nulle sont les produits du type $\hat{\eta}_\alpha^+ \hat{\eta}_\beta^+$. On utilise à nouveau les relations d'anticommutation des fermions pour obtenir :

$$e_z(l) = \psi_1(l)\phi_2(l) - \phi_1(l)\psi_2(l). \quad (1.3.62)$$

Il est donc nécessaire de connaître les deux premières excitations et les vecteurs propres associés pour déterminer la densité d'énergie locale $e(l)$.

L'expression (1.3.62) prend une forme plus simple dans le cas de la surface où $\psi(1)$ s'exprime en fonction de $\phi(1)$ par :

$$\psi_\alpha(1) = -\varepsilon_\alpha \phi_\alpha(1) \quad (1.3.63)$$

et l'expression de la densité d'énergie de surface devient finalement :

$$e_s = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\phi_1(1)\phi_2(1). \quad (1.3.64)$$

3.2.4. Fonctions de corrélation de surface

- FONCTION DE CORRÉLATION SPIN-SPIN :

La fonction de corrélation de surface spin-spin est définie par :

$$G_\sigma^s(\tau) = \langle \hat{\sigma}_1^x(0) \hat{\sigma}_1^x(\tau) \rangle = \langle 0 | \hat{\sigma}_1^x(0) \hat{\sigma}_1^x(\tau) | 0 \rangle \quad (1.3.65)$$

les opérateurs étant écrits dans la représentation de Heisenberg et $\hat{\sigma}_1^x = \hat{c}_1^+ + \hat{c}_1$.

En inversant à nouveau les transformations de Jordan-Wigner et de Bogoljubov-Valatin, la fonction de corrélation de surface spin-spin s'écrit :

$$\begin{aligned} G_\sigma^s(\tau) &= e^{\tau E_0} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle 0 | [h_\alpha(1)\hat{\eta}_\alpha + g_\beta(1)\hat{\eta}_\beta] e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}} [g_\gamma(1)\hat{\eta}_\gamma^+ + h_\delta(1)\hat{\eta}_\delta^+] | 0 \rangle \\ &= e^{\tau E_0} \sum_{\alpha} e^{-\tau E_\alpha} [g_\alpha^2(1) + 2g_\alpha(1)h_\alpha(1) + h_\alpha^2(1)] \end{aligned} \quad (1.3.66)$$

où le terme entre crochets est égal à $\phi_\alpha^2(1)$. Par ailleurs, le gap $E_\alpha - E_0$ correspond à l'énergie d'excitation ε_α , d'où l'on déduit :

$$G_\sigma^s(\tau) = \sum_{\alpha} \phi_\alpha^2(1) e^{-\varepsilon_\alpha \tau} \quad (1.3.67)$$

qui a les dimensions d'une aimantation au carré.

• FONCTION DE CORRÉLATION ÉNERGIE-ÉNERGIE :

La fonction de corrélation de surface énergie-énergie est définie par :

$$G_\epsilon^s(\tau) = \langle 0 | \hat{\sigma}_1^z(0) \hat{\sigma}_1^z(\tau) | 0 \rangle. \quad (1.3.68)$$

En procédant comme pour les corrélations spin-spin, on obtient :

$$G_\epsilon^s(\tau) = \sum_{\alpha=1}^L \sum_{\beta=\alpha+1}^L [\phi_\alpha(1)\psi_\beta(1) - \phi_\beta(1)\psi_\alpha(1)]^2 e^{-(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta)\tau} \quad (1.3.69)$$

qui peut se réécrire en conditions de bords libres :

$$G_\epsilon^s(\tau) = \sum_{\alpha=1}^L \sum_{\beta=\alpha+1}^L [(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha) \phi_\alpha(1) \phi_\beta(1)]^2 e^{-(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta)\tau}. \quad (1.3.70)$$

4. Systèmes désordonnés et systèmes apériodiques

On présentera dans un premier temps quelques travaux concernant les systèmes désordonnés. Ces études ont conduit au critère de Harris qui permet de déterminer si le désordre peut être pertinent ou non. Nous donnerons ensuite un aperçu bibliographique des différents travaux réalisés sur les systèmes apériodiques sur lesquels nous nous sommes penché au cours de ce travail. Enfin, nous introduirons sommairement le critère de Luck qui constitue une généralisation du critère de Harris dans le cas des systèmes apériodiques en couches.

4.1. Généralités sur les systèmes désordonnés

Luck définit les systèmes désordonnés en physique statistique comme des systèmes régis par une dynamique complexe qui possède au moins deux temps caractéristiques très différents, $\tau_1 \ll \tau_2$ (LUCK 1992). Les degrés de liberté caractérisés par des temps de relaxation courts, de l'ordre de τ_1 , sont les variables dynamiques, tandis que les variables gelées décrivent les degrés de liberté dont le temps caractéristique est de l'ordre de τ_2 .

Il existe en général, dans les systèmes désordonnés, des interactions entre les degrés de liberté des variables dynamiques et ceux des variables gelées. Ces interactions ne respectent donc pas les symétries habituelles des systèmes purs (par exemple, l'invariance par translation) puisqu'elles dépendent des détails microscopiques d'une configuration hors d'équilibre des variables gelées.

Dans le cas des systèmes magnétiques, le désordre peut être induit soit par les couplages d'échange J_n , soit par les champs magnétiques locaux h_n agissant sur chaque spin σ_n (considéré ici comme variable dynamique). Ainsi, le premier cas correspond, par exemple, aux verres de spin pour lesquels les couplages J_n seront

des variables aléatoires alors que le champ magnétique est uniforme ($h_n = H$). Le second cas correspond au modèle en champ magnétique aléatoire pour lequel les champs magnétiques locaux h_n constituent les variables aléatoires, tandis que les couplages J_n conservent tous la même valeur ferromagnétique $J > 0$.

L'intérêt de l'étude des systèmes désordonnés est donc de tenter de se rapprocher de systèmes physiques réels, puisque le désordre peut être induit par l'existence d'impuretés dans un système cristallin par exemple.

L'objet de ces travaux est de déterminer si le désordre ainsi induit modifie le comportement critique par rapport à celui du système pur, c'est-à-dire, dans le langage du groupe de renormalisation, si le désordre est une variable pertinente au point fixe du système pur. En effet, certains auteurs pensaient que le désordre détruisait complètement les fluctuations à grande échelle, faisant ainsi disparaître les singularités des fonctions thermodynamiques (McCoy et Wu 1968a, McCoy 1970, HARRIS 1974).

A l'opposé, Watson puis Domb, par exemple, considéraient que le désordre pouvait produire un changement de la température critique (grandeur non universelle) mais ne pouvait affecter le comportement critique lui-même (WATSON 1970, DOMB 1972).

Historiquement, le modèle d'Ising a été l'un des modèles sur lequel l'influence du désordre a été la plus étudiée en raison de sa simplicité. Parmi les modèles les plus connus, le modèle d'Ising bidimensionnel sur réseau avec des couplages horizontaux aléatoires a fait l'objet de nombreux travaux (McCoy et Wu 1968a, McCoy et Wu 1968b, McCoy 1970, McCoy et Wu 1973, AU-YANG et McCoy 1974, NIEUWENHUIZEN et ORLAND 1989).

Dans ce modèle (appelé modèle de McCoy-Wu), les couplages verticaux prennent une valeur constante tandis que les couplages horizontaux prennent des valeurs aléatoires, tout en restant uniformes à l'intérieur de chaque colonne (figure 1.4.1).

Les résultats obtenus sur le modèle de McCoy-Wu montrent que la singularité logarithmique de la chaleur spécifique du modèle pur disparaît du fait du désordre et que la chaleur spécifique reste finie au point de transition.

Plus tard, on a réalisé qu'une situation intermédiaire pouvait se produire et que le désordre pouvait faire apparaître un nouveau comportement critique au voisinage proche de la température de transition (HARRIS et LUBENSKY 1974).

Harris a alors développé un critère qui permettait de prévoir qualitativement l'effet d'un désordre homogène à partir des exposants critiques du système pur (HARRIS 1974, HARRIS et LUBENSKY 1974, GRINSTEIN et LUTHER 1976, SHAPIR et AHARONY 1981). Ce critère montre que le désordre est une variable pertinente, c'est-à-dire qu'il modifie le comportement critique du système si l'exposant de la chaleur spécifique du système pur α est positif (lorsque la relation "d'hyperscaling" est vérifiée). Dans le cas contraire, le désordre est non pertinent et il n'affecte pas le comportement critique.

Dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel, où l'on a une singularité logarithmique de la chaleur spécifique, $\alpha = 0$, le critère de Harris ne permet pas de conclure.

On peut également noter que le critère de Harris peut être adapté au désordre

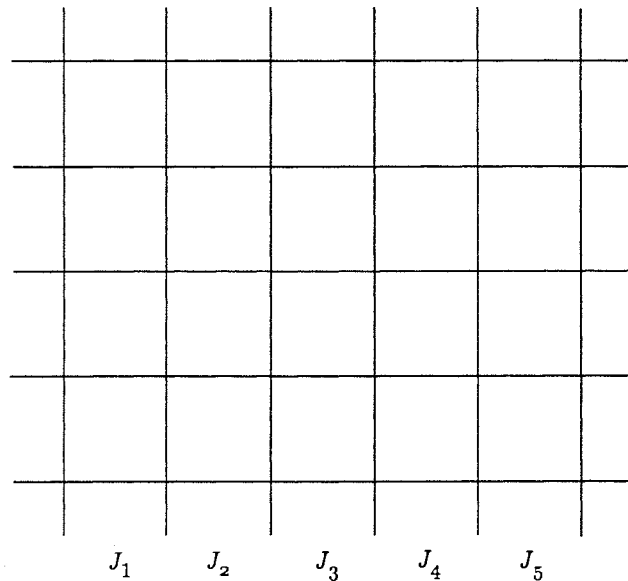


Figure 1.4.1 Réseau de McCoy-Wu : distribution de couplages aléatoires horizontaux J_i .

“en couches”. En effet, dans le cas du modèle de McCoy-Wu, le désordre s’avère pertinent.

4.2. Revue bibliographique sur les systèmes apériodiques

Nous proposons à présent un aperçu général des travaux menés sur les systèmes apériodiques (GRIMM et BAAKE 1996), et plus particulièrement sur le modèle d’Ising. Nous avons vu précédemment qu’une des formes principales de désordre consistait en l’introduction de variables aléatoires. Nous allons nous pencher maintenant sur une autre façon de briser la périodicité en nous intéressant aux systèmes apériodiques.

Dans les systèmes apériodiques, il existe en fait un ordre à grande échelle même si le système n’est plus périodique (c’est pourquoi le terme de désordre n’est pas véritablement adapté à ce type de système). Un exemple typique peut être le modèle d’Ising avec des couplages définis à partir de séquences de substitution, donc de façon parfaitement déterministe.

Les études numériques de différents systèmes sur le réseau bidimensionnel de Penrose (modèle d’Ising (GODRÈCHE, LUCK et ORLAND 1986, OKABE et NIIZEKI 1988a, OKABE et NIIZEKI 1988b, SØRENSEN, JARIĆ et RONCHETTI 1991), problème de percolation (SAKAMOTO *et al* 1989, ZHANG et DE’BELL 1993), statistiques de marches aléatoires et de marches auto-évitantes (LANGIE et IGLÓI 1992)) ont montré qu’ils présentent le même comportement critique que sur un réseau périodique. Ce comportement universel a également été obtenu à trois dimensions (OKABE et NIIZEKI 1990). Il existe cependant des influences spécifiques de l’ordre local sur la température critique (BHATTACHARJEE 1994, LEDUE, LANDAU et TEILLET 1995) et sur la frustration dans les systèmes anti-ferromagnétiques (OKABE et NIIZEKI 1988a,

OKABE et NIIZEKI 1988b, OITMAA, AYDIN et JOHNSON 1990, DUNEAU, DUNLOP et OGUEY 1993).

En revanche, il a été montré qu'une modulation aperiodique des couplages jouait un rôle déterminant dans les problèmes d'interfaces à deux dimensions avec un exposant de rugosité qui varie continûment pour la séquence de Fibonacci (HENLEY et LIPOWSKY 1987, GARG et LEVINE 1987).

Les travaux effectués dans le cadre du modèle d'Ising bidimensionnel se limitent à une modulation aperiodique dans une direction et sont de ce point de vue analogues au modèle de McCoy-Wu.

Pour les séquences de Fibonacci (DORIA et SATIJA 1988, IGLÓI 1988, TRACY 1988a, BENZA 1989, CECCATTO 1989, HENKEL et PATKÓS 1992) et de Thue-Morse (DORIA, NORI et SATIJA 1989, LIN et TAO 1990), les études menées révèlent un comportement critique proche de celui du système périodique. Cependant, à partir de deux exemples de substitution à trois lettres, Tracy a montré que l'on pouvait aboutir à des comportements critiques très différents pour des modulations aperiodiques différentes (TRACY 1988b). Ceci a été confirmé par l'étude de modèles construits sur des séquences généralisées de Fibonacci (BENZA, KOLÁR et ALI 1990, YOU et YANG 1990, LIN et TAO 1992a) ou de Thue-Morse (LIN et TAO 1992b) où l'influence du choix des conditions initiales de la substitution a été mentionnée (LIN et TAO 1992a, YOU, YAN et ZHONG 1992, TURBAN et BERCHE 1993).

Finalement, comme nous le verrons au paragraphe suivant, la situation a été éclaircie en 1993 par Luck, qui a énoncé un critère généralisant le critère de Harris et permettant de déterminer si une modulation aperiodique donnée du modèle d'Ising bidimensionnel devait être pertinente ou non (LUCK 1993a, LUCK 1993b).

4.3. Critère de Luck

Nous avons vu que des comportements critiques variés pouvaient être obtenus sur le modèle d'Ising à $2d$ en fonction de la perturbation aperiodique appliquée. C'est dans ce contexte que Luck a proposé un critère de pertinence adapté aux systèmes aperiodiques (LUCK 1993a).

De même que pour le critère de Harris dans les systèmes aléatoires, l'amplitude des fluctuations des couplages, sur une échelle donnée par la longueur de corrélation, est primordiale pour le comportement critique.

On considère le modèle d'Ising en champ transverse pour lequel les interactions entre couches $K_2(k)$ obéissent à une modulation aperiodique tandis que les interactions parallèles à la surface sont constantes : $K_1(k) = K_1^{(2)}$.

Nous nous intéressons ici, pour simplifier le problème, à des substitutions ne faisant intervenir que deux lettres, A et B . Il est bien évidemment possible de généraliser cette présentation à des substitutions impliquant plus de deux lettres (TURBAN, IGLÓI et BERCHE 1994).

Une modulation aperiodique des interactions perpendiculaires à la surface est générée par substitutions itératives sur deux lettres A et B : $A \rightarrow S(A)$, $B \rightarrow S(B)$, conduisant après n itérations à une séquence du type

$$A B A B A A B A B A A B \dots$$

(2) Les constantes de couplage K_1 et K_2 introduites ici correspondent aux interactions β_t et β_s de la section précédente. La notation utilisée ici est plus conforme à l'usage.

A chaque lettre A ou B on associe une valeur K_A ou K_B correspondant à λ_A ou λ_B dans la limite hamiltonienne. On peut montrer que les fluctuations des couplages induisent, dans le système, une perturbation thermique $\overline{\delta t}$ à l'échelle de la longueur de corrélation donnée par $\overline{\delta t} \sim \xi^{\omega-1}$ où ω est un exposant gouvernant les fluctuations de la séquence⁽³⁾. En ramenant cette perturbation à l'écart au point critique t , il en résulte un comportement

$$\frac{\overline{\delta t}}{t} \sim t^{-\phi}, \quad \phi = 1 + \nu(\omega - 1) \quad (1.4.1)$$

où ν est l'exposant associé à la longueur de corrélation et ϕ l'exposant de "cross-over". Celui-ci gouverne, dans le langage du groupe de renormalisation, le comportement pertinent ou non de la perturbation.

5. Conclusion

Cette thèse s'inscrit dans le cadre de l'étude de l'influence de perturbations aperiodiques sur les propriétés critiques du modèle d'Ising bidimensionnel dans la limite anisotrope extrême. On peut classer ces perturbations aperiodiques en deux catégories :

- i) Les perturbations aperiodiques de surface qui ne modifient pas les propriétés critiques de volume du système et qui laissent le point critique du système inchangé. C'est le cas, par exemple, de la séquence aperiodique de Fredholm (KAREVSKI, PALÁGYI et TURBAN 1995, KAREVSKI 1996) qui constitue une réalisation discrète de la perturbation inhomogène de Hilhorst et van Leeuwen (HILHORST et VAN LEEUWEN 1981).
- ii) Les perturbations aperiodiques de volume qui modifient le point critique du système. Ces perturbations affectent les propriétés critiques de surface et de volume du système. Notre travail concerne exclusivement cette seconde catégorie.

(3) Ces arguments seront détaillés au chapitre suivant.

Chapitre 2

Comparaison entre les apériodicités de liaison et de site dans la chaîne d'Ising quantique : aimantation de surface

1. Introduction

Nous étudions, dans ce chapitre, l'aimantation de surface du modèle d'Ising en champ transverse avec plusieurs perturbations apériodiques. Nous présenterons tout d'abord l'apériodicité de liaison qui correspond, dans les systèmes magnétiques, à une distribution apériodique des atomes transmettant l'interaction par un mécanisme d'échange indirect (super-échange). Nous illustrerons le critère de Luck en rappelant des résultats antérieurs relatifs à trois types de perturbations, pertinente, marginale et non pertinente, avant d'examiner plus en détail le cas de nouvelles séquences marginales. On s'intéressera ensuite à l'apériodicité de site pour laquelle la distribution apériodique concerne les moments magnétiques qui interagissent par l'intermédiaire d'un mécanisme d'échange direct. On montrera, grâce à une extension du critère de Luck, que, pour une séquence apériodique donnée, la perturbation peut être plus efficace pour le problème de site que pour le problème de liaison.

2. Apériodicité de liaison

2.1. Présentation du problème

On considère le modèle d'Ising bidimensionnel en couches, représenté sur la figure 2.2.1, avec des interactions $K_1(k)$ parallèles à la surface et $K_2(k)$ entre les couches k et $k + 1$.

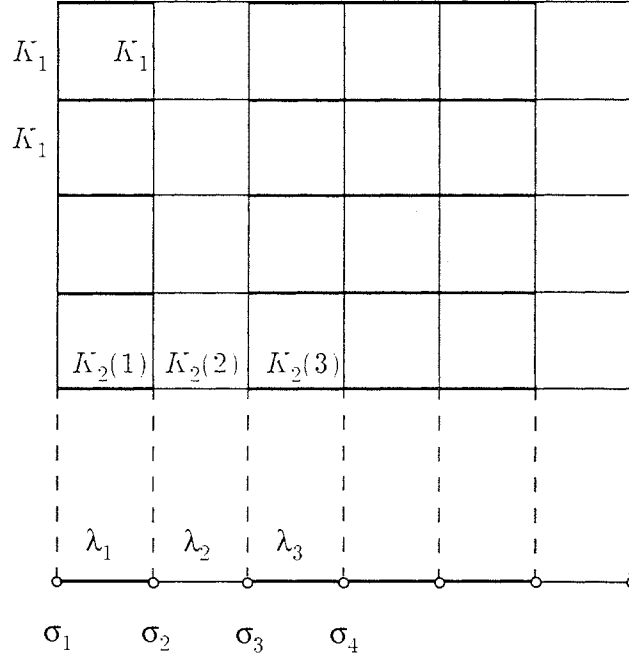


Figure 2.2.1 Modèle d'Ising en couches aperiodiques (en haut) et la chaîne quantique d'Ising correspondante dans la limite anisotrope extrême (en bas).

Dans tout ce qui suit, les interactions sont limitées aux premiers voisins⁽¹⁾. La limite anisotrope extrême correspond à $K_1(k) \rightarrow \infty$, $K_2(k) \rightarrow 0$ en conservant constant le rapport $\lambda_k = K_2(k)/K_1^*(k)$, $K_1^*(k) = -1/2 \ln \tanh K_1(k)$. En introduisant un couplage de référence constant K_1^* , le couplage dual peut s'écrire $h_k K_1^*$ où h_k est le champ transverse. L'opérateur de transfert de rangée à rangée $\exp(-2K_1^* \hat{\mathcal{H}})$ fait intervenir l'hamiltonien d'une chaîne quantique de spins 1/2. On définit les interactions entre spins $J_k = h_k \lambda_k$ qui permettent d'écrire l'hamiltonien d'Ising en champ transverse sous la forme :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} [h_k \hat{\sigma}_k^z + J_k \hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_{k+1}^x], \quad (2.2.1)$$

(1) On peut montrer que la prise en compte d'interactions en seconds voisins conduit à un critère de pertinence analogue à celui du problème de site qui sera discuté ultérieurement.

le modèle classique bidimensionnel étant semi-infini, la somme sur k va jusqu'à l'infini. On rappelle que l'aimantation de surface de la chaîne quantique d'Ising s'écrit :

$$m_s = \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{k=1}^j \lambda_k^{-2} \right)^{-1/2} \quad (2.2.2)$$

où les couplages J_k et h_k présents dans $\hat{\mathcal{H}}$ n'interviennent ici que par leur rapport λ_k . L'expression de m_s est donc la même que pour une chaîne quantique d'Ising avec $h_k = 1$ et une interaction effective entre deux spins λ_k .

Une telle reparamétrisation de l'hamiltonien n'est plus possible lorsque des excitations non nulles apparaissent, c'est-à-dire si le champ transverse dépend de k . En général, l'influence des deux interactions doit donc être considérée.

Dans le problème de liaison, les interactions parallèles à la surface sont constantes, $K_1(k) = K_1$ donc $h_k = 1$, et $\lambda_k = K_2(k)/K_1^*$ ne dépend de l'indice de la couche k que par l'intermédiaire de l'interaction entre couches.

2.2. Critère de pertinence

La suite des couplages $K_2(k)$ est déterminée par une séquence de lettres A et B auxquelles on associe, dans la limite hamiltonienne, deux types de valeurs $\lambda_A = \lambda$ et $\lambda_B = \lambda r$.

Les couplages de la séquence apériodique s'écrivent sous la forme :

$$\lambda_k = \lambda r^{f_k} \quad (2.2.3)$$

où les f_k , valant 0 ou 1, sont associés aux lettres A et B . Le nombre de couplages perturbés de la séquence est donné par :

$$n_j = \sum_{k=1}^j f_k.$$

Une séquence est construite à partir de règles d'inflation sur les lettres A et B . Par exemple :

$$\begin{aligned} S(A) &= ABA \\ S(B) &= BA. \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

Si la séquence est initiée par la lettre A , après n étapes, on obtient :

$$\begin{aligned} n=0 & \quad A \\ n=1 & \quad ABA \\ n=2 & \quad ABABAABA \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

Si elle est initiée par B , on a :

$$\begin{aligned} n=0 & \quad B \\ n=1 & \quad BA \\ n=2 & \quad BAABA \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

Les propriétés d'une séquence donnée sont obtenues à partir de sa matrice de substitution $\mathbf{M}_1$ dont les colonnes contiennent le nombre de lettres A, B dans $S(A), S(B)$ respectivement (QUEFFÉLEC 1987) :

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} n_A^{S(A)} & n_A^{S(B)} \\ n_B^{S(A)} & n_B^{S(B)} \end{pmatrix}. \quad (2.2.5)$$

Les nombres L_n^A et L_n^B de A et B dans la séquence après n substitutions sont donnés par les éléments de matrice correspondants dans $\mathbf{M}_1^n$. Par exemple, si la substitution est initiée par la lettre A , c'est-à-dire avec les substitutions $A \rightarrow S(A) \rightarrow S(S(A)) \dots$, L_n^A est donné par l'élément de matrice $(\mathbf{M}_1^n)_{11}$ tandis que la longueur de la séquence est $L_n = \sum_i (\mathbf{M}_1^n)_{i1}$.

Si on note $\mathbf{V}_\alpha$ les vecteurs propres à droite de la matrice de substitution avec les valeurs propres associées Λ_α , $\mathbf{M}_1 \mathbf{V}_\alpha = \Lambda_\alpha \mathbf{V}_\alpha$, les longueurs L_n , L_n^A et L_n^B sont asymptotiquement proportionnelles à Λ_1^n où Λ_1 est la plus grande valeur propre de la matrice de substitution⁽²⁾.

La densité asymptotique de lettres A s'exprime à partir des composantes du vecteur propre correspondant dans la base $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ en insérant dans la définition $L_n^A = \langle + | \mathbf{M}_1^n | + \rangle$ la relation de fermeture

$$L_n^A = \sum_\alpha \langle + | \mathbf{M}_1^n | \alpha \rangle \langle \alpha | + \rangle \simeq \Lambda_1^n |\langle + | 1 \rangle|^2, \quad n \rightarrow \infty.$$

De même, le nombre de lettres B vaut

$$L_n^B = \langle - | \mathbf{M}_1^n | + \rangle \simeq \Lambda_1^n \langle - | 1 \rangle \langle 1 | + \rangle, \quad n \rightarrow \infty$$

d'où l'on déduit

$$\rho_\infty^A = 1 - \rho_\infty^B = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{L_n^A}{L_n} = \frac{\langle + | 1 \rangle}{\langle + | 1 \rangle + \langle - | 1 \rangle} = \frac{V_1(1)}{V_1(1) + V_1(2)}. \quad (2.2.6)$$

Les fluctuations des interactions à l'échelle L_n sont reliées à la seconde plus grande valeur propre (en module) de la matrice de substitution Λ_2 . Dans le cas d'une chaîne d'Ising quantique apériodique avec une séquence à deux lettres et un couplage moyen $\bar{\lambda}$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \lambda_A &= \bar{\lambda} - \rho_\infty^B \delta_1, \\ \lambda_B &= \bar{\lambda} + \rho_\infty^A \delta_1 \end{aligned}$$

(2) Λ_1 est donc toujours supérieure à 1.

où δ_1 est l'amplitude de la modulation aperiodique : $\delta_1 = \lambda_B - \lambda_A = \lambda(r-1)$. Après n substitutions correspondant à une chaîne de longueur $L_n \sim \Lambda_1^n$, les fluctuations des interactions s'écrivent :

$$\Delta_1(L_n) = \sum_{k=1}^{L_n} (\lambda_k - \bar{\lambda}) \simeq \delta_1 \Lambda_2^n \simeq \delta_1 L_n^{\omega_1}. \quad (2.2.7)$$

L'exposant de "divagation" (DUMONT 1990), $\omega_1 = \ln |\Lambda_2| / \ln \Lambda_1$, gouverne le comportement des fluctuations des couplages entre couches. D'après l'équation (2.2.7), on constate qu'une séquence générée par substitution peut avoir des fluctuations, soit bornées, soit divergentes, en fonction du module de Λ_2 .

Si $|\Lambda_2| < 1$, la substitution a la propriété de Pisot-Vijayaraghavan (GODRÈCHE et LUCK 1990, GODRÈCHE et LUCK 1992), les fluctuations sont alors bornées et la séquence est quasi-périodique.

Si $|\Lambda_2| \geq 1$, la substitution est non-Pisot et les fluctuations divergent.

La modulation aperiodique introduit une perturbation thermique autour de la valeur du couplage moyen $\bar{\lambda}$ qui, pour une longueur L , est donnée par la moyenne :

$$\overline{\delta\lambda_1}(L) = \frac{\Delta_1(L)}{L} = \delta_1 L^{\omega_1-1}. \quad (2.2.8)$$

Un changement d'échelle par un facteur $b = L/L'$ conduit à la densité renormalisée :

$$\overline{\delta\lambda'_1}(L') = \delta'_1 \left(\frac{L}{b}\right)^{\omega_1-1} = b^{1/\nu} \delta_1 L^{\omega_1-1} \quad (2.2.9)$$

où ν est l'exposant de la longueur de corrélation en volume. L'amplitude de la perturbation δ_1 obéit donc à la loi d'échelle (LUCK 1993b, IGLÓI 1993) :

$$\delta'_1 = b^{\Phi_1/\nu} \delta_1 \quad (2.2.10)$$

où Φ_1 est l'exposant de "cross-over" : $\Phi_1 = 1 + \nu(\omega_1 - 1)$. On retrouve ainsi le critère de Luck dans le cas d'une aperiodicité de liaison en fonction du signe de Φ_1 ou du signe de ω_1 , puisque ν vaut 1 dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel.

En effet, lorsque Φ_1 est positif, la perturbation croît par changement d'échelle, ce qui conduit à un nouveau point fixe avec un comportement critique modifié : on dit alors que la modulation aperiodique est pertinente.

Si Φ_1 est négatif, la perturbation décroît par changement d'échelle et le comportement critique du système est le même que dans le cas du système homogène : la modulation aperiodique est non pertinente.

Enfin, lorsque $\Phi_1 = 0$, la modulation est dite marginale et les exposants critiques varient continûment avec l'amplitude de la perturbation. Le système présente alors un comportement critique non universel.

2.3. Exemples de perturbations non pertinente, marginale et pertinente

Récemment, différents travaux ont été réalisés sur les perturbations apériodiques de chaînes quantiques d'Ising. Ils confirment le critère de Luck. Ainsi, l'aimantation de surface a été étudiée dans le cas de séquences non pertinentes (Fibonacci, Thue-Morse et Thue-Morse généralisée), marginale ("doublement de période") et pertinente (Rudin-Shapiro). Dans ce dernier cas, l'aimantation de surface, déterminée analytiquement, présente une singularité essentielle ou une transition du premier ordre (IGLÓI et TURBAN 1994).

Après avoir donné quelques résultats généraux, nous présentons ici rapidement, à titre d'exemple, les résultats obtenus avec une perturbation apériodique non pertinente (Thue-Morse), une perturbation marginale ("doublement de période") et une perturbation pertinente (Rudin-Shapiro).

2.3.1. Résultats généraux

Pfeuty a montré que le couplage critique du modèle d'Ising inhomogène pouvait être déterminé avec la condition de l'annulation du gap dans le spectre d'excitations (PFEUTY 1979). En effet, dans la phase ordonnée, en-dessous du point critique, l'état fondamental est doublement dégénéré, donc le couplage critique correspond à l'apparition d'une excitation nulle lorsque la symétrie est brisée. Cette condition peut s'écrire :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^L (\lambda_k)_c^{1/L} = 1 \quad (2.2.11)$$

c'est-à-dire, dans le cas d'une perturbation apériodique :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \lambda_c r^{n_L/L} = 1 \quad (2.2.12)$$

donc $\lambda_c = r^{-\rho_\infty}$ où $\rho_\infty = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{n_L}{L}$ est la densité asymptotique de couplages perturbés.

Par ailleurs, l'aimantation de surface s'obtient à partir de :

$$m_s = \phi_1(1) = \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{k=1}^j \lambda_k^{-2} \right)^{-1/2} = [S(\lambda, r)]^{-1/2} \quad (2.2.13)$$

où :

$$S(\lambda, r) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} r^{-2n_j}. \quad (2.2.14)$$

La série apériodique $S(\lambda, r)$ gouverne le comportement critique. On peut remarquer que l'argument r^2 intervient dans l'expression $S(\lambda, r)$. Les propriétés critiques seront donc les mêmes pour des valeurs négatives ou positives de r . Par la suite, on se placera systématiquement dans le cas $r > 0$ pour les figures des exposants critiques.

2.3.2. Séquence de Thue-Morse

La séquence binaire de Thue-Morse (DEKKING, MENDÈS-FRANCE et VAN DER POORTEN 1983a) est générée à partir des substitutions à deux lettres $A \rightarrow AB$ et $B \rightarrow BA$ ou :

$$\begin{cases} 0 \rightarrow 01 \\ 1 \rightarrow 10 \end{cases} \quad (2.2.15)$$

La séquence obtenue en commençant par 0 est :

$$\begin{aligned} n = 0 & \quad 0 \\ n = 1 & \quad 01 \\ n = 2 & \quad 0110 \\ n = 3 & \quad 01101001 \\ n = 4 & \quad 0110100110010110 \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

Sa matrice de substitution

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.2.16)$$

a pour valeurs propres $\Lambda_1 = 2$ et $\Lambda_2 = 0$. L'exposant de "divagation" $\omega_1 = \ln |\Lambda_2| / \ln \Lambda_1$ vaut donc $-\infty$: on est dans le cas d'une modulation apériodique non pertinente. La densité asymptotique de la séquence de Thue-Morse $\rho_\infty = 1/2$ conduit au couplage critique $\lambda_c = r^{-1/2}$. Turban, Iglói et Berche ont montré que la somme $S(\lambda, r)$ pouvait s'écrire, dans le cas de la séquence de Thue-Morse (TURBAN, IGLÓI et BERCHE 1994) :

$$S(\lambda, r) = \frac{1 + r(\lambda_c/\lambda)^2}{1 - (\lambda_c/\lambda)^4} + (r^{-1} - r)(\lambda/\lambda_c)^2 \Sigma[(\lambda_c/\lambda)^4] \quad (2.2.17)$$

avec :

$$\Sigma(x) = \sum_{k=1}^{\infty} f_k x^k = x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2^k} \prod_{p=0}^k (1 - x^{2^p})}{(1 - x^{2^k})(1 - x^{2^{k+1}})}. \quad (2.2.18)$$

Au voisinage du point critique, la contribution dominante à $S(\lambda, r)$ provient des deux premiers termes de $\Sigma(x)$, ce qui conduit à :

$$m_s = \frac{2t^{1/2}}{\lambda_c + \lambda_c^{-1}} \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1 - \lambda_c^2}{1 + \lambda_c^2} \right)^2 t + O(t^2) \right] \quad (2.2.19)$$

où t est l'écart en température au point critique⁽³⁾ :

$$t = 1 - (\lambda_c/\lambda)^2. \quad (2.2.20)$$

(3) Dans ce chapitre et dans le suivant, on définit une température réduite t , positive dans la phase de basse température.

L'aimantation de surface est représentée sur la figure 2.2.2 (TURBAN, IGLÓI et BERCHE 1994).

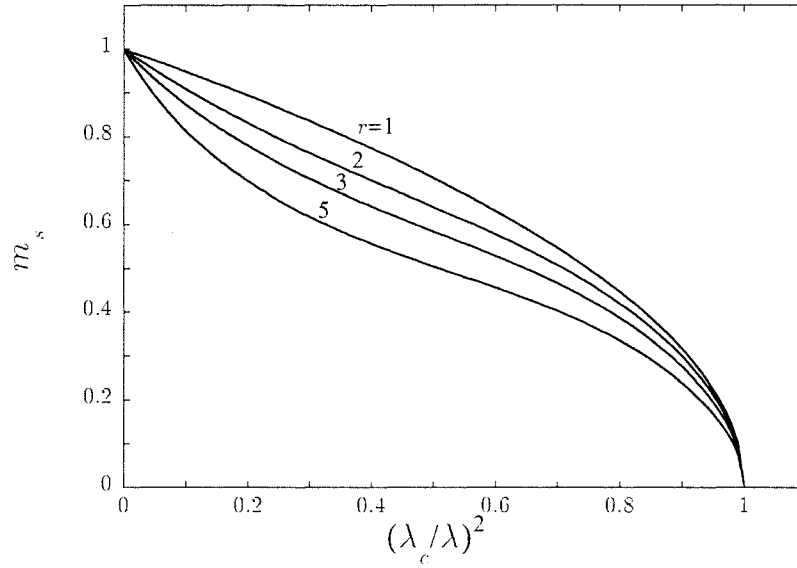


Figure 2.2.2 Aimantation de surface pour la séquence de Thue-Morse en fonction de $1 - t = (\lambda_c/\lambda)^2$ pour différentes valeurs de r . L'exposant critique $\beta_s = 1/2$ conserve la même valeur que pour le système homogène alors que l'amplitude critique dépend de r .

On constate, d'après l'expression (2.2.19), que l'exposant de l'aimantation de surface prend la valeur $\beta_s = 1/2$, comme on pouvait le prévoir à partir du signe de l'exposant ω_1 . L'amplitude de m_s est simplement modulée par la valeur du rapport des couplages r (TURBAN et BERCHE 1993).

2.3.3. Séquence “doublement de période” (Period-Doubling)

La séquence “doublement de période” (Period-Doubling, abrégé PD pour les figures et tableaux) est générée par la substitution suivante (LUCK 1993a, COLLET et ECKMANN 1980) :

$$\begin{cases} 1 \rightarrow 10 \\ 0 \rightarrow 11 \end{cases} \quad (2.2.21)$$

dont les premières étapes sont :

$$\begin{aligned} n=0 & \quad 1 \\ n=1 & \quad 10 \\ n=2 & \quad 1011 \\ n=3 & \quad 10111010 \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

Les valeurs propres de la matrice de substitution sont $\Lambda_1 = 2$, $\Lambda_2 = -1$, donc $\omega_1 = 0$; la densité asymptotique $\rho_\infty = 2/3$ donne le couplage critique $\lambda_c = r^{-2/3}$.

Dans le cas de la séquence “doublement de période”, la somme $S(\lambda, r)$ permettant de calculer l’aimantation de surface peut se mettre sous la forme d’un produit infini (TURBAN, IGLÓI et BERCHE 1994) :

$$S(\lambda, r) = \prod_{k=1}^{\infty} \left[1 + \lambda_c \left(\frac{\lambda_c}{\lambda} \right)^{2^{2k-1}} \right] \left[1 + \lambda_c^{-1} \left(\frac{\lambda_c}{\lambda} \right)^{2^{2k}} \right]. \quad (2.2.22)$$

L’aimantation de surface est représentée sur la figure 2.2.3.

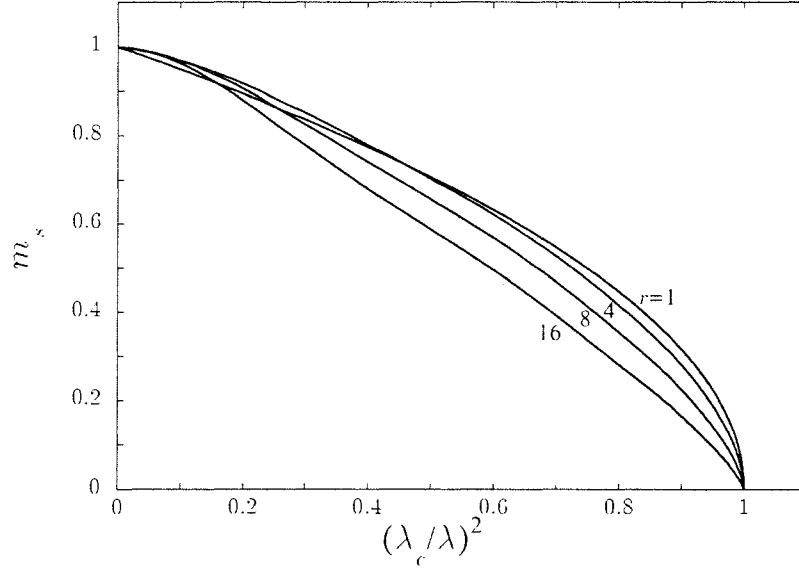


Figure 2.2.3 Aimantation de surface pour la séquence “doublement de période”. L’exposant β_s varie de façon continue avec le rapport des interactions r .

Iglói a présenté une méthode permettant de déterminer l’exposant critique ω associé à une grandeur singulière $f(x) \sim (1 - x/x_0)^\omega$ à partir du développement en puissances de $u = x/x_0$ (IGLÓI 1986).

On peut ainsi déterminer la forme analytique de β_s en fonction du rapport des couplages r . On définit pour cela la somme $S(u)$ représentant $S(\lambda, r)$ et qui peut s’écrire en puissances de $u = (\lambda_c/\lambda)^2$. D’après (2.2.13), $S(u)$ doit présenter une singularité en loi de puissance près du point critique sous la forme :

$$S(u) \sim (1 - u)^{-2\beta_s}. \quad (2.2.23)$$

On peut montrer que, dans ce cas, la série tronquée $S_L(u)$ donnée par les L premiers termes de $S(u)$ se comporte, pour les grandes valeurs de L , comme $L^{2\beta_s}$ au point critique $u = 1$. On peut alors vérifier que les l premiers termes dans le produit infini (2.2.22) contiennent exactement les $L = 2^{2l}$ premiers termes de la série. On obtient donc :

$$S_{L=2^{2l}}(1) = [(1 + \lambda_c)(1 + \lambda_c^{-1})]^l \sim (2^{2l})^{2\beta_s} \quad (2.2.24)$$

et on peut déterminer l'exposant magnétique de surface :

$$\beta_s = \frac{\ln[(1 + \lambda_c)(1 + \lambda_c^{-1})]}{4 \ln 2} = \frac{\ln[r^{1/3} + r^{-1/3}]}{2 \ln 2}. \quad (2.2.25)$$

L'exposant critique associé à l'aimantation de surface varie de façon continue avec le rapport des interactions r comme on pouvait le prévoir à partir de la valeur nulle de ω_1 et d'après le critère de Luck.

On peut remarquer que, d'après la théorie des effets de taille finie (BARBER 1983), pour une chaîne de taille L finie au point critique, $m_s(L)$ décroît comme $L^{-x_{ms}}$ où $x_{ms} = \beta_s/\nu$ est la dimension anormale de l'aimantation de surface. Les sommes (2.2.13) et (2.2.14) doivent donc s'arrêter lorsque $j = L$, si bien que la série tronquée considérée précédemment se comporte aussi comme $L^{2x_{ms}}$. Il vient alors $x_{ms} = \beta_s$ et $\nu = 1$: la modulation aperiodique marginale ne modifie pas l'exposant de la longueur de corrélation. Ce résultat restera vrai pour toutes les séquences marginales. Il est en effet imposé par la condition de marginalisme qui doit demeurer valide pour le système perturbé et, comme ω_1 est constant et fixé par la substitution, l'exposant ν doit l'être également.

La variation de β_s en fonction de r pour la séquence "doublement de période" est représentée sur la figure 2.2.4⁽⁴⁾.

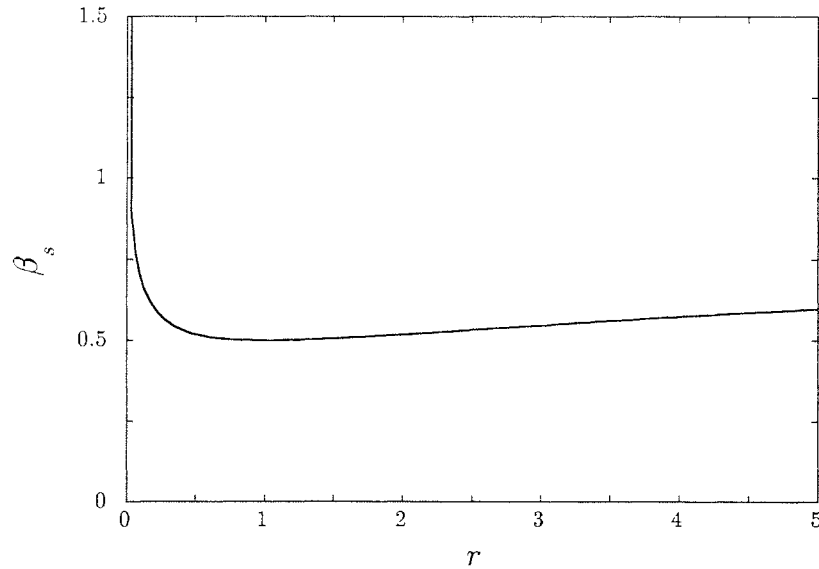


Figure 2.2.4 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s pour la séquence marginale "doublement de période" en fonction du rapport des couplages r . Pour cette perturbation aperiodique, la singularité est toujours plus douce que dans le système homogène et la transition de surface est du second ordre quelle que soit la valeur de r .

(4) L'invariance $r \rightarrow \frac{1}{r}$ dans l'expression de β_s est liée à la forme symétrique de la séquence.

2.3.4. Séquence de Rudin-Shapiro

La séquence de Rudin-Shapiro est générée par une substitution à quatre lettres (LUCK 1993a, DEKKING, MENDÈS-FRANCE et VAN DER POORTEN 1983a) : $A \rightarrow AB$, $B \rightarrow AC$, $C \rightarrow DB$ et $D \rightarrow DC$ ou :

$$\begin{cases} 00 & \rightarrow 0001 \\ 01 & \rightarrow 0010 \\ 10 & \rightarrow 1101 \\ 11 & \rightarrow 1110 \end{cases} \quad (2.2.26)$$

On initie la séquence par la lettre A et on obtient, après n étapes :

$$\begin{aligned} n=0 & \quad 00 \\ n=1 & \quad 0001 \\ n=2 & \quad 00010010 \\ n=3 & \quad 0001001000011101 \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

Les valeurs propres de la matrice de substitution sont $\Lambda_1 = 2$, $\Lambda_{2,3} = \pm\sqrt{2}$ et $\Lambda_4 = 0$, donc $\omega_1 = 1/2$ et $\rho_\infty = 1/2$. Le couplage critique vaut : $\lambda_c = r^{-\rho_\infty} = r^{-1/2}$. L'aimantation de surface, déterminée numériquement (TURBAN, IGLÓI et BERCHE 1994), est représentée sur la figure 2.2.5 pour $r < 1$ et $r > 1$.

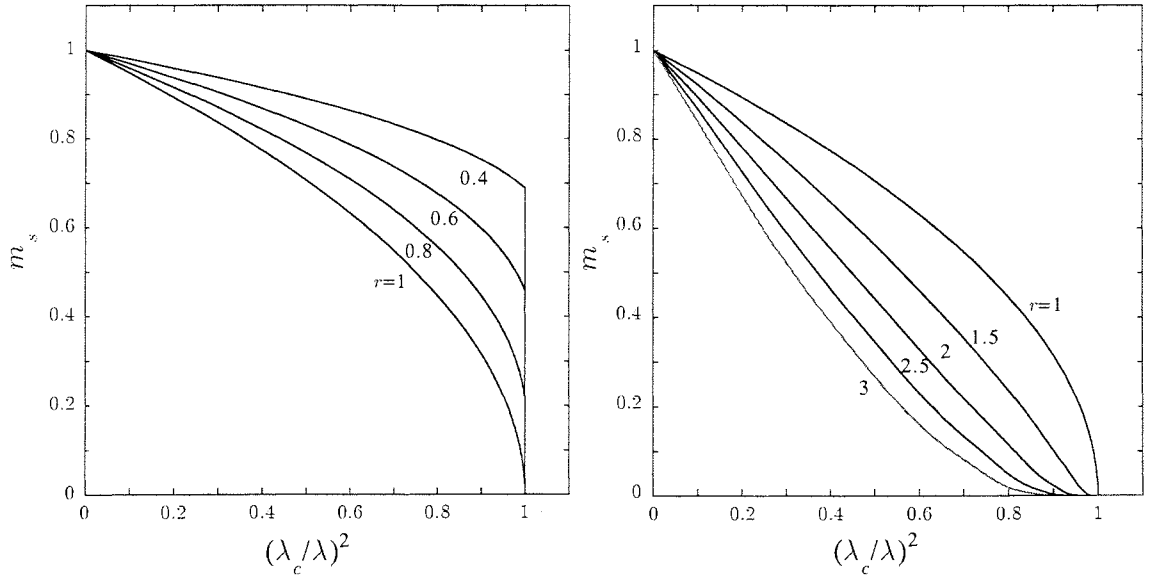


Figure 2.2.5 Aimantation de surface pour la séquence de Rudin-Shapiro. Le renforcement des couplages au voisinage de la surface conduit à une transition de surface du premier ordre pour $r < 1$ et l'aimantation s'annule avec une singularité essentielle au point critique quand $r > 1$.

Lorsque $r < 1$, on constate que le système présente une transition de surface du premier ordre avec une discontinuité de l'aimantation de surface liée à une augmentation locale des couplages par rapport à leur valeur moyenne. En effet, la surface étant unidimensionnelle, elle ne peut s'ordonner à température finie en l'absence d'interactions de portée infinie. Pour un système dont la surface serait de dimension 2 ou plus, on attendrait une mise en ordre de la surface à une température supérieure à celle de volume. Pour $r > 1$ en revanche, l'aimantation de surface s'annule avec une singularité essentielle au point critique, c'est-à-dire plus faible qu'une singularité en loi de puissance. La forme analytique de l'aimantation de surface au voisinage du point critique a été déterminée sous la forme (IGLÓI et TURBAN 1994) :

$$m_s \sim \exp \left[-\frac{A^2 (r-1)^2}{8t} \right]. \quad (2.2.27)$$

On constate, à partir de ces exemples, que l'on a effectivement des comportements critiques variés en fonction du signe de l'exposant de "cross-over" de la perturbation aperiodique appliquée et que le critère de Luck est confirmé.

On peut d'ailleurs s'intéresser à l'allure des fluctuations des couplages données en (2.2.7) pour les trois types de séquences aperiodiques.

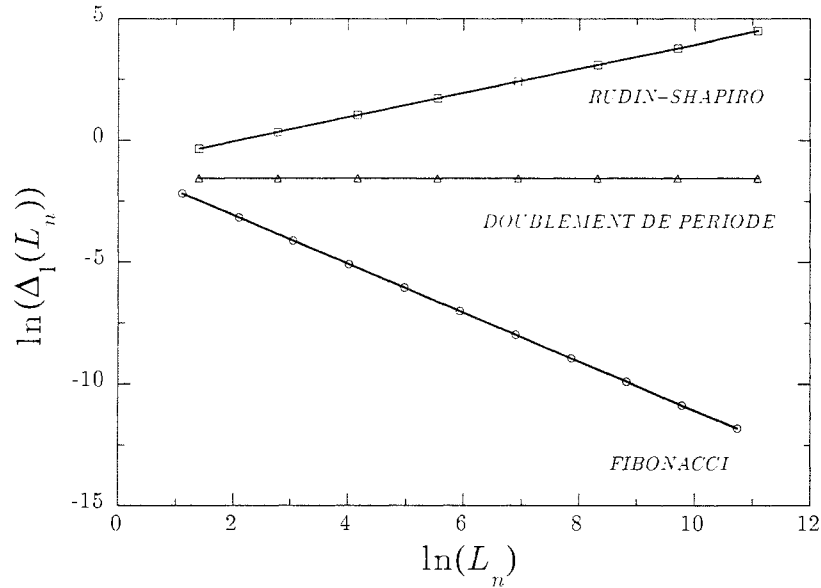


Figure 2.2.6 Variation des fluctuations des couplages en fonction de la taille de la chaîne quantique (en log-log) pour les séquences de Fibonacci (non pertinente), "doublement de période" (marginale) et Rudin-Shapiro (pertinente). Les tailles des séquences aperiodiques sont choisies pour respecter la symétrie de chacune des séquences.

On a représenté pour cela sur la figure 2.2.6 la variation de $\ln(\Delta_1(L_n))$ en fonction de $\ln(L_n)$ pour les séquences de Fibonacci ($\omega_1 = -1$), "doublement de période" ($\omega_1 = 0$) et Rudin-Shapiro ($\omega_1 = 1/2$). On vérifie ainsi l'importance des fluctuations des couplages de la perturbation appliquée sur le comportement critique du système.

2.4. Séquences apériodiques marginales de volume

Dans l'ensemble de ce travail, nous nous sommes principalement intéressé aux séquences marginales caractérisées par un exposant de “cross-over” nul. Outre la séquence “doublement de période” présentée précédemment, notre étude a également porté sur les perturbations de volume “pliage ternaire” (Three-Folding, abrégé TF pour les figures et tableaux) et “pliage de papier” (Paper-Folding ou PF) que nous allons traiter maintenant. Ces trois perturbations sont définies comme des perturbations de volume du fait de l'influence de la perturbation qui s'étend sur la totalité de la chaîne quantique (avec une densité asymptotique de défauts ρ_∞ non nulle) contrairement au cas des perturbations de surface, comme la séquence de Fredholm par exemple (KAREVSKI, PALÁGYI et TURBAN 1995).

2.4.1. Séquence “pliage ternaire” (Three-Folding)

La séquence “pliage ternaire” (DEKKING, MENDÈS-FRANCE et VAN DER POORTEN 1983b) est générée par les substitutions $S(0) = 010$, $S(1) = 011$. En commençant par 0, après quatre étapes on obtient :

$$0 \ 1 \ \underline{0} \ 0 \ 1 \ \underline{1} \ 0 \ 1 \ \underline{0} \ 0 \ 1 \ \underline{0} \ 0 \ 1 \ \underline{1} \ 0 \ 1 \ \underline{1} \ 0 \ 1 \ \underline{0} \ 0 \ 1 \ \underline{1} \ 0 \ 1 \ \underline{0} \quad (2.2.28)$$

La séquence se répète elle-même si l'on garde tous les troisièmes termes (soulignés), ce qui conduit aux relations de récurrence suivantes :

$$f_{3k} = f_k, \quad f_{3k+1} = 0, \quad f_{3k+2} = 1, \quad (2.2.29)$$

$$n_{3k} = n_k + k, \quad n_{3k+1} = n_k + k, \quad n_{3k+2} = n_k + k + 1. \quad (2.2.30)$$

En itérant n_{3k} , on obtient $n_{3^p} = \frac{1}{2}(3^p - 1)$, ce qui donne asymptotiquement $\rho_\infty = \frac{1}{2}$ et $\lambda_c = r^{-1/2}$. Les valeurs propres de la matrice de substitution, $\Lambda_1 = 3$, $\Lambda_2 = 1$, amènent à l'exposant de “divagation” $\omega_1 = 0$, c'est-à-dire à un comportement marginal pour le modèle d'Ising bidimensionnel. L'aimantation de surface a été déterminée analytiquement (BERCHE, BERCHE et TURBAN 1996). Pour cela, on remarque que la somme $S(\lambda, r) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} r^{-2n_j}$ peut être décomposée en trois sommes qui, en utilisant les relations (2.2.29), amènent à la relation de récurrence :

$$\begin{aligned} S(\lambda, r) &= (1 + \lambda^{-2} + r^{-2} \lambda^{-4}) S(\lambda^3 r, r) \\ &= \prod_{p=0}^{\infty} (1 + \lambda_p^{-2} + r^{-2} \lambda_p^{-4}) \end{aligned} \quad (2.2.31)$$

où $\lambda_p = \lambda_c (\lambda / \lambda_c)^{3^p}$.

Le comportement critique peut être obtenu en utilisant la méthode de “scaling” déjà présentée pour la séquence “doublement de période” (IGLÓI 1986). Les n premiers facteurs du produit infini contiennent les $L = 3^n$ premiers termes de la série tronquée :

$$S_{L=3^n}(u) = \prod_{p=0}^{n-1} \left[1 + ru^{3^p} + (u^2)^{3^p} \right] \quad (2.2.32)$$

d'où l'on déduit l'exposant β_s en examinant la valeur de $S_{L=3^n}(u)$ au point critique $u = 1$:

$$\beta_s = \frac{\ln(2+r)}{2\ln 3}. \quad (2.2.33)$$

La variation de β_s en fonction de r est représentée sur la figure 2.2.7.

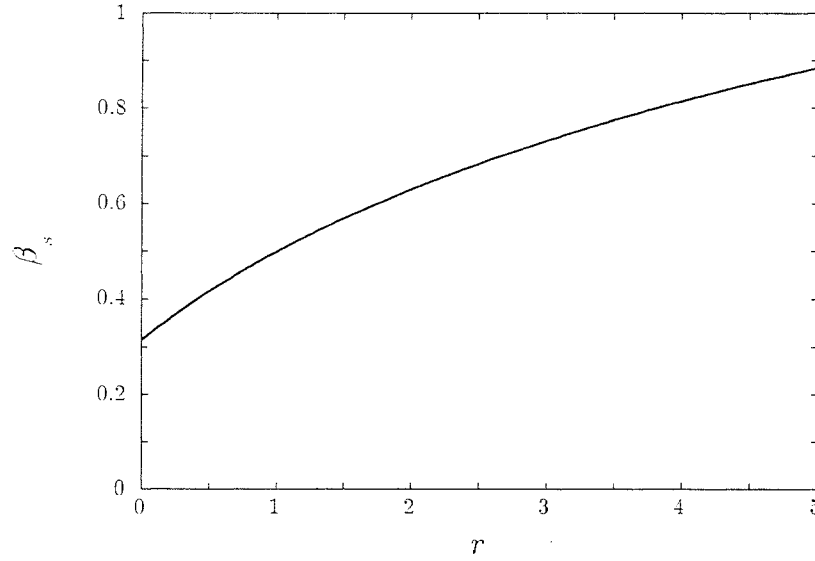


Figure 2.2.7 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s pour la séquence “pliage ternaire” en fonction du rapport des couplages r .

On peut remarquer que la valeur de l'exposant β_s est inférieure à $1/2$ lorsque $r < 1$. Dans ce cas, la singularité de l'aimantation de surface est donc renforcée par la modulation aperiodique.

2.4.2. Séquence “pliage de papier” (Paper-Folding)

La séquence “pliage de papier” (DEKKING, MENDÈS-FRANCE et VAN DER POORTEN 1983a) résulte du pliage récurrent d'un morceau de papier, le côté droit sur le côté gauche, comme le montre la figure 2.2.8 pour les premières étapes.

Après dépliage, on obtient une succession de plis vers le haut et vers le bas. Si l'on associe 1 à un pli vers le haut et 0 à un pli vers le bas, on obtient, après quatre plis, la séquence suivante :

$$1 \ 1 \ 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \quad (2.2.34)$$

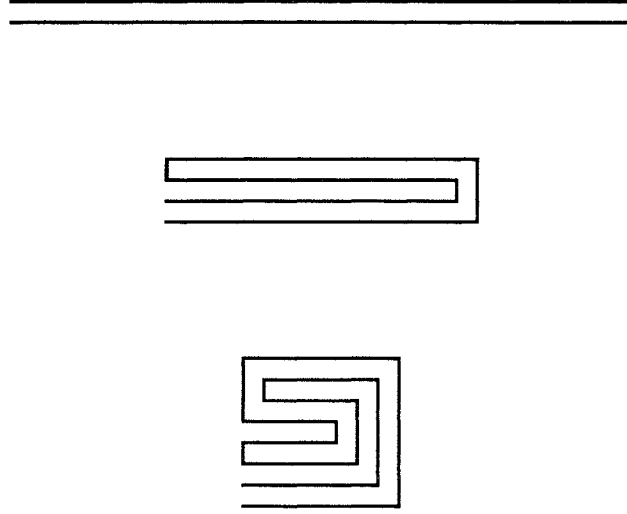


Figure 2.2.8 Illustration du procédé permettant d'obtenir la séquence "pliage de papier" : en pliant n fois le côté droit d'un morceau de papier sur le côté gauche, on obtient, après dépliage, une succession de plis vers le haut et vers le bas qui suivent la séquence "pliage de papier".

La séquence à droite du pli central est l'image dans un miroir de la séquence à gauche, avec chaque chiffre f_k remplacé par son complément $1 - f_k$. Par conséquent, la densité asymptotique est $\rho_\infty = \frac{1}{2}$ et le couplage critique $\lambda_c = r^{-1/2}$.

La même séquence peut être générée en utilisant les substitutions à deux chiffres $S(00) = 1000$, $S(01) = 1001$, $S(10) = 1100$ et $S(11) = 1101$. Si l'on commence par 11, la séquence résultante ne diffère de la précédente que par son dernier chiffre supplémentaire, 1, qui n'affecte pas le comportement critique.

Les valeurs propres de la matrice de substitution, $\Lambda_1 = 2$, $\Lambda_2 = 1$, amènent à un exposant de "divagation" qui s'annule, $\omega_1 = 0$, donc la perturbation en couches correspondante dans le modèle d'Ising à deux dimensions est marginale. Les sites pairs soulignés en (2.2.34) reproduisent la séquence, tandis que les sites impairs sont alternativement 1 ou 0. On a donc :

$$f_{2k} = f_k, \quad f_{2k+1} = \frac{1}{2}[1 + (-1)^k],$$

$$n_{2k} = \frac{k}{2} + \frac{1 - (-1)^k}{4} + n_k, \quad n_{2k+1} = \frac{k}{2} + \frac{3 + (-1)^k}{4} + n_k. \quad (2.2.35)$$

Pour déterminer l'aimantation de surface, on écrit $S(\lambda, r)$ sous la forme (BERCHE, BERCHE et TURBAN 1996) :

$$\begin{aligned} S(\lambda, r) &= \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^{-2(2k+1)} r^{-2n_{2k+1}} + \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^{-2(2k)} r^{-2n_{2k}} \\ &= S_{\text{impair}}(\lambda, r) + S_{\text{pair}}(\lambda, r). \end{aligned} \quad (2.2.36)$$

En séparant les valeurs impaires et paires de k dans les deux sommes et en utilisant les relations de récurrence (2.2.35), on obtient les équations couplées suivantes :

$$\begin{aligned} S_{\text{impair}}(\lambda, r) &= \lambda^{-2} r^{-1} S_{\text{impair}}(\lambda^2 r^{1/2}, r) + \lambda^{-2} r^{-2} S_{\text{pair}}(\lambda^2 r^{1/2}, r), \\ S_{\text{pair}}(\lambda, r) &= r^{-1} S_{\text{impair}}(\lambda^2 r^{1/2}, r) + S_{\text{pair}}(\lambda^2 r^{1/2}, r). \end{aligned} \quad (2.2.37)$$

Ces relations peuvent être écrites sous forme matricielle $V_0 = \prod_{p=0}^{k-1} \mathbf{T}_p V_k$ avec :

$$\mathbf{V}_p = \begin{pmatrix} S_{\text{impair}}(\lambda_p, r) \\ S_{\text{pair}}(\lambda_p, r) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_p = \begin{pmatrix} \lambda_p^{-2} r^{-1} & \lambda_p^{-2} r^{-2} \\ r^{-1} & 1 \end{pmatrix}, \quad \lambda_p = \lambda_c \left(\frac{\lambda}{\lambda_c} \right)^{2^p}. \quad (2.2.38)$$

Dans la phase ordonnée $\lambda > \lambda_c$ et $\lim_{p \rightarrow \infty} \mathbf{V}_p = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, si bien que, compte tenu de (2.2.37) :

$$S(\lambda, r) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \left[\prod_{p=0}^{\infty} \mathbf{T}_p \right] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.2.39)$$

qui permet d'obtenir analytiquement l'aimantation de surface.

Le comportement critique peut être obtenu en utilisant à nouveau la méthode d'analyse due à Iglói.

La forme de la matrice en (2.2.38) est telle que, si l'on garde les n premiers facteurs du produit infini de l'équation (2.2.39), on obtient :

$$S_L(u) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \left[\prod_{p=0}^{n-1} \begin{pmatrix} u^{2^p} & \lambda_c^2 u^{2^p} \\ \lambda_c^2 & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.2.40)$$

avec $L = 2^n$. Au point critique $u = 1$, la matrice devient indépendante de p , si bien que la forme de la contribution dominante à la série tronquée est facilement obtenue par diagonalisation :

$$S_{L=2^n}(1) \sim (2^n)^{2\beta_s} \sim (1 + \lambda_c^2)^n \quad (2.2.41)$$

où le dernier terme est la $n^{\text{ième}}$ puissance de la plus grande valeur propre de $\mathbf{T}_p$. Finalement, l'exposant de l'aimantation de surface peut s'écrire :

$$\beta_s = \frac{\ln(1 + r^{-1})}{2 \ln 2}. \quad (2.2.42)$$

La variation de β_s en fonction de r est représentée sur la figure 2.2.9.

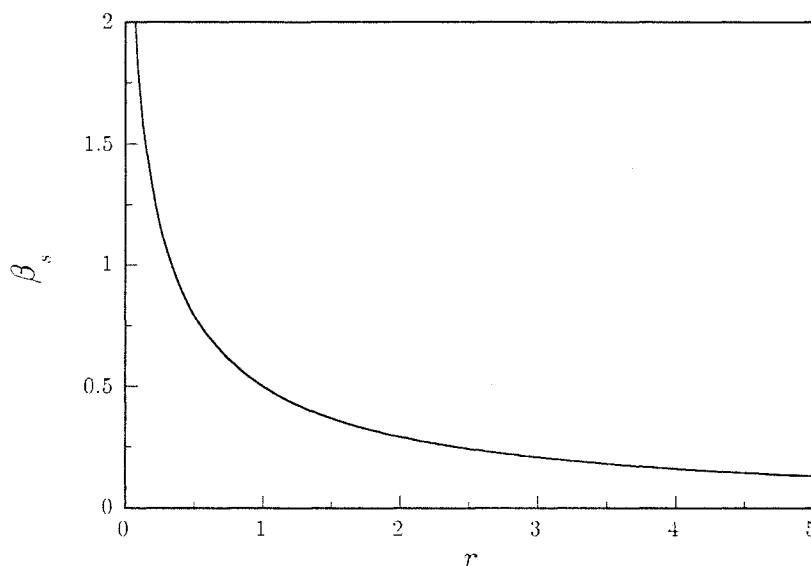


Figure 2.2.9 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s pour la séquence "pliage de papier" en fonction du rapport des couplages r .

Contrairement au cas de la séquence "pliage ternaire", la singularité de l'aimantation de surface pour la séquence "pliage de papier" est renforcée lorsque $r > 1$.

3. Apériodicité de site

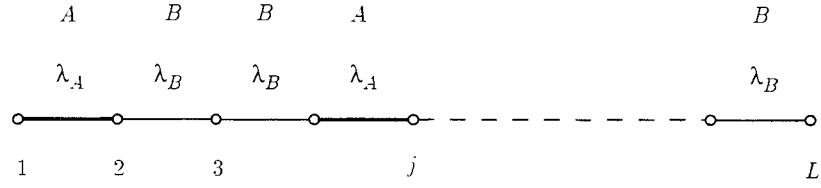
3.1. Présentation du problème

Contrairement au problème de liaison présenté précédemment, dans le problème de site, les moments magnétiques sont distribués apériodiquement et interagissent par l'intermédiaire d'un mécanisme d'échange direct. Les couplages dépendent donc de la nature des deux atomes concernés par l'interaction, toujours limitée aux premiers voisins.

Le couplage effectif $\lambda_k = K_2(k)/K_1^*(k)$ comprend à la fois l'interaction verticale à l'intérieur de la couche k et l'interaction horizontale entre les couches k et $k + 1$. La modulation apériodique ne se combine donc pas, de façon générale, en un seul paramètre effectif et on doit considérer séparément son effet sur le champ transverse et sur l'interaction entre deux spins. Le champ transverse pourrait prendre les valeurs h_A et h_B comme λ_k dans le problème de liaison.

Par conséquent, la valeur de λ_k dépend de la nature des deux couches et est généralement asymétrique. Les deux situations correspondant au problème de liaison et au problème de site sont représentées sur la figure 2.3.1.

liaison



site

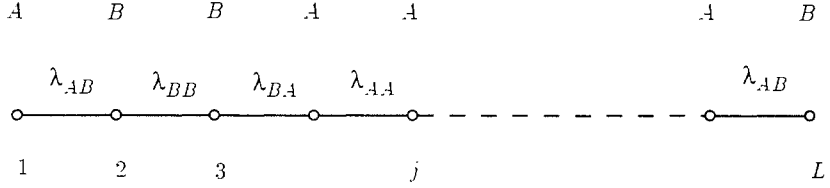


Figure 2.3.1 Représentation schématique des problèmes de liaison et de site.

3.2. Critère de pertinence

On s'intéresse à nouveau à des substitutions ne faisant intervenir que deux lettres A et B qui correspondent aux deux espèces magnétiques distribuées selon la séquence apériodique avec des couches contenant des atomes A et B . Les couplages effectifs λ_{AA} , λ_{AB} , λ_{BA} et λ_{BB} dépendent donc de la nature des deux couches concernées dans l'interaction par l'intermédiaire des couplages à l'intérieur des couches et entre les couches. Afin de déterminer le nombre de liaisons de chaque type dans la séquence après n substitutions, L_n^{AA} , L_n^{AB} , L_n^{BA} et L_n^{BB} , on définit une nouvelle matrice de substitution à deux lettres :

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} n_{AA}^{S(A[A])} & n_{AA}^{S(A[B])} & n_{AA}^{S(B[A])} & n_{AA}^{S(B[B])} \\ n_{AB}^{S(A[A])} & n_{AB}^{S(A[B])} & n_{AB}^{S(B[A])} & n_{AB}^{S(B[B])} \\ n_{BA}^{S(A[A])} & n_{BA}^{S(A[B])} & n_{BA}^{S(B[A])} & n_{BA}^{S(B[B])} \\ n_{BB}^{S(A[A])} & n_{BB}^{S(A[B])} & n_{BB}^{S(B[A])} & n_{BB}^{S(B[B])} \end{pmatrix} \quad (2.3.1)$$

où $n_{AB}^{S(B[A])}$ est le nombre de liaisons AB dans la séquence générée par $S(B)$ complétée par la première lettre de $S(A)$. Si on réutilise la séquence générée par la substitution (2.2.4), les substitutions à deux lettres deviennent :

$$S(A[A]) = ABA[A]$$

$$S(A[B]) = ABA[B]$$

$$S(B[A]) = BA[A]$$

$$S(B[B]) = BA[B].$$

La matrice de substitution est donc, dans ce cas particulier :

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3.2)$$

Comme dans le problème de liaison, les éléments de matrice de chaque colonne de $\mathbf{M}_2^n$ donnent le nombre de liaisons de chaque sorte (L_n^{ij} ; $i, j = A, B$) après n substitutions. Ces nombres sont donnés dans les deux premières (dernières) colonnes si la séquence est initiée par A (B).

En raison des effets de terminaison, une des valeurs de chaque colonne diffère d'une unité de la véritable valeur du nombre de liaisons dans la séquence. Pour $n = 2$, par exemple :

$$\mathbf{M}_2^2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 & 1 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3.3)$$

Les deux premières colonnes correspondent à une séquence commencée par A à la deuxième itération et conduisent à : $L_2^{AA} = 1$, $L_2^{AB} = 3$, $L_2^{BA} = 3$ et $L_2^{BB} = 0$.

Comme la somme des nombres de liaisons commençant par une lettre donnée (c'est-à-dire avec A , les liaisons AA et AB) donne le nombre d'apparitions de cette lettre dans la séquence pour le problème de liaison, les éléments de matrice de $\mathbf{M}_1$ peuvent être retrouvés en prenant la somme des deux premiers éléments et la somme des deux derniers éléments dans chaque colonne de $\mathbf{M}_2$. La même relation existe aussi entre les éléments de $\mathbf{M}_2^n$ et $\mathbf{M}_1^n$.

On définit par Ω_α les valeurs propres et $\mathbf{W}_\alpha$ les vecteurs propres à droite de $\mathbf{M}_2$: $\mathbf{M}_2 \mathbf{W}_\alpha = \Omega_\alpha \mathbf{W}_\alpha$. Les nombres de liaisons L_n^{ij} ($i, j = A, B$) dans la séquence après n itérations sont toujours proportionnels à la $n^{\text{ième}}$ puissance de la plus grande valeur propre Ω_1 . En utilisant les vecteurs propres associés, on obtient les densités asymptotiques de liaison :

$$\begin{aligned} \rho_\infty^{AA} &= \frac{W_1(1)}{\sum_{i=1}^4 W_1(i)}, & \rho_\infty^{AB} &= \frac{W_1(2)}{\sum_{i=1}^4 W_1(i)}, \\ \rho_\infty^{BA} &= \frac{W_1(3)}{\sum_{i=1}^4 W_1(i)}, & \rho_\infty^{BB} &= \frac{W_1(4)}{\sum_{i=1}^4 W_1(i)}. \end{aligned}$$

Les premières valeurs propres des deux matrices correspondant au problème de liaison ($\mathbf{M}_1$) et au problème de site ($\mathbf{M}_2$) sont les mêmes, puisque la longueur de la séquence L après n itérations est toujours égale à la somme des nombres L_n^{ij} . En utilisant alors les relations existant entre les éléments de matrice de $\mathbf{M}_2$ et $\mathbf{M}_1$, l'équation séculaire de $\mathbf{M}_2$ peut être factorisée. Le premier facteur redonne

l'équation séculaire de $\mathbf{M}_1$, si bien que $\Omega_1 = \Lambda_1$ et Λ_2 appartient aussi au spectre de $\mathbf{M}_2$. Les deux dernières valeurs propres de $\mathbf{M}_2$ viennent du second facteur et s'écrivent :

$$\Omega_\alpha = \frac{1}{2} \left[a + b \pm \sqrt{(a - b)^2 + 4cd} \right] \quad (2.3.4)$$

où :

$$\begin{aligned} a &= n_{AA}^{S(A[A])} - n_{AA}^{S(A[B])} \\ b &= n_{BA}^{S(B[A])} - n_{BA}^{S(B[B])} \\ c &= n_{BA}^{S(A[A])} - n_{BA}^{S(A[B])} \\ d &= n_{AA}^{S(B[A])} - n_{AA}^{S(B[B])}. \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

Comme les coefficients définis en (2.3.5) représentent des différences entre les nombres de liaisons de séquences qui, au plus, diffèrent par leur dernière liaison, ils valent 0 ou ± 1 . Ils sont complètement déterminés par les première et dernière lettres dans $S(A)$ et $S(B)$. Les deux valeurs propres sont donc égales à 0 ou ± 1 . Si les deux substitutions commencent par la même lettre, les coefficients et les valeurs propres Ω_α s'annulent. Les autres cas figurent dans le tableau 2.3.1.

$S(A)$	$A \dots A$	$A \dots A$	$A \dots B$	$A \dots B$	$B \dots A$	$B \dots A$	$B \dots B$	$B \dots B$
$S(B)$	$B \dots A$	$B \dots B$	$B \dots A$	$B \dots B$	$A \dots A$	$A \dots B$	$A \dots A$	$A \dots B$
a	1	1	0	0	-1	-1	0	0
b	0	1	0	1	0	-1	0	-1
c	1	0	1	0	-1	0	-1	0
d	0	0	1	1	0	0	-1	-1
Ω_α	1, 0	1, 1	1, -1	1, 0	-1, 0	-1, -1	1, -1	-1, 0

Tableau 2.3.1 Coefficients de l'équation séculaire (2.3.4) avec les valeurs propres correspondantes pour des substitutions commençant par différentes lettres.

Les fluctuations des couplages λ_k peuvent être déduites de la matrice de substitution, comme dans le problème de liaison, en travaillant dans la base des vecteurs propres à droite $\mathbf{W}_\alpha$. Le couplage moyen $\bar{\lambda}$ est donné dans le problème de site par :

$$\bar{\lambda} = \rho_\infty^{AA} \lambda_{AA} + \rho_\infty^{AB} \lambda_{AB} + \rho_\infty^{BA} \lambda_{BA} + \rho_\infty^{BB} \lambda_{BB}. \quad (2.3.6)$$

Les fluctuations des interactions, pour une chaîne de longueur L_n , sont toujours reliées à la seconde plus grande valeur propre de $\mathbf{M}_2$ en module, Ω_2 :

$$\Delta_2(L_n) = \sum_{k=1}^{L_n} (\lambda_k - \bar{\lambda}) \simeq \delta_2 \Omega_2^n \simeq \delta_2 L_n^{\omega_2}. \quad (2.3.7)$$

Dans ce cas, l'amplitude de la perturbation δ_2 est une combinaison linéaire des différences de couplages $\lambda_{AA} - \lambda_{AB}$, $\lambda_{AA} - \lambda_{BA}$, $\dots$, et l'exposant de "divagation" peut s'écrire :

$$\omega_2 = \frac{\ln |\Omega_2|}{\ln \Lambda_1}. \quad (2.3.8)$$

Si la substitution est non-Pisot, $\Omega_2 = \Lambda_2$ et l'exposant de "divagation" pour le problème de site est le même que pour le problème de liaison. Dans le cas inverse, l'exposant de "divagation" change si $|\Omega_2| = 1 > |\Lambda_2|$. Une séquence non pertinente pour le problème de liaison peut donc devenir marginale pour le problème de site.

L'amplitude de la modulation aperiodique δ_2 du problème de site obéit à la loi d'échelle :

$$\delta'_2 = b^{\omega_2 - 1 + 1/\nu} \delta_2 = b^{\Phi_2/\nu} \delta_2 \quad (2.3.9)$$

où $\Phi_2 = 1 + \nu(\omega_2 - 1)$.

Comme on l'a mentionné en introduction de cette section, on doit considérer, dans le problème de site, l'influence de la modulation aperiodique, à la fois sur le champ transverse et sur l'interaction entre deux spins. Le comportement de la perturbation sur le champ transverse est contrôlé par Φ_1 , tandis que la perturbation de l'interaction à deux spins est gouvernée par Φ_2 .

Mais, comme $\omega_2 \geq \omega_1$, le comportement critique dans le problème de site dépendra du signe de Φ_2 . Le tableau 2.3.2 donne les deux plus grandes valeurs propres des matrices de substitution et les exposants de fluctuations pour quelques séquences aperiodiques typiques.

séquence	Fibonacci	Thue-Morse	"doublement de période"	"pliage ternaire"
$S(A)$	B	AB	BB	ABA
$S(B)$	BA	BA	BA	ABB
Λ_1	τ^*	2	2	3
$ \Lambda_2 $	τ^{-1}	0	1	1
$ \Omega_2 $	τ^{-1}	1	1	1
ω_1	-1	$-\infty$	0	0
ω_2	-1	0	0	0
problème de liaison	non pertinent	non pertinent	marginal	marginal
problème de site	non pertinent	marginal	marginal	marginal

Tableau 2.3.2 Comparaison entre les problèmes de liaison et de site pour quelques séquences typiques. Les deux dernières lignes se réfèrent au modèle d'Ising à deux dimensions.

* $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ est le nombre d'or.

On constate que les perturbations apériodiques de liaison et de site sont non pertinentes pour la séquence de Fibonacci, tandis que la perturbation de site devient marginale pour la séquence de Thue-Morse. Les séquences suivantes sont non-Pisot, donc la perturbation se comporte de la même façon pour les deux problèmes. Les séquences “doublement de période” et “pliage ternaire” conduisent à des perturbations marginales, mais les exposants non universels doivent a priori être différents pour les problèmes de liaison et de site.

La détermination du couplage critique est obtenue à partir de la relation :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^L \left(\frac{J_k}{h_k} \right)_c^{1/L} = \lim_{L \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^L (\lambda_k)_c^{1/L} = 1$$

en utilisant la paramétrisation suivante : $\lambda_{AA} = \lambda$, $\lambda_{AB} = \lambda u$, $\lambda_{BA} = \lambda v$ et $\lambda_{BB} = \lambda r$. En raison de la contribution du champ transverse, λ_{AB} est généralement différent de λ_{BA} . Le $k^{\text{ième}}$ couplage effectif peut donc s'écrire :

$$\lambda_k = \lambda r^{f_k f_{k+1}} u^{f_{k+1} - f_k f_{k+1}} v^{f_k - f_k f_{k+1}} \quad (2.3.10)$$

et le couplage critique est défini par :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} u^{\frac{f_{L+1} - f_1}{L}} \lambda_c s^{\frac{n_L}{L}} \left(\frac{r}{s} \right)^{\frac{m_L}{L}} = 1 \quad (2.3.11)$$

où $s = uv$ et

$$m_j = \sum_{k=1}^j f_k f_{k+1}. \quad (2.3.12)$$

Donc $\lambda_c = s^{-\rho_\infty} (s/r)^{\kappa_\infty}$, $\kappa_\infty = \lim_{L \rightarrow \infty} m_L/L$ ou :

$$\lambda_c = u^{-\rho_\infty^{AB}} v^{-\rho_\infty^{BA}} r^{-\rho_\infty^{BB}}. \quad (2.3.13)$$

3.3. Aimantation de surface pour des séquences marginales

Nous présentons les résultats obtenus pour les séquences de Thue-Morse (non pertinente dans le cadre du problème de liaison, marginale dans le cadre du problème de site), “doublement de période” (marginale dans les deux cas) et “pliage ternaire” (marginale dans les deux cas) (TURBAN, BERCHE et BERCHE 1994).

3.3.1. Expression générale de la série apériodique

Dans le cas du problème de site, l'aimantation de surface s'exprime par :

$$m_s = [\Sigma(\lambda, r, s, u)]^{-1/2} \quad (2.3.14)$$

où

$$\Sigma(\lambda, r, s, u) = u^{2f_1} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} \left(\frac{r}{s}\right)^{-2m_j} s^{-2n_j} u^{-2f_{j+1}} \quad (2.3.15)$$

avec $m_0 = 0$.

En utilisant l'identité $a^{f_k} = 1 + (a - 1)f_k$, ($f_k = 0, 1$), on peut écrire la somme sous la forme :

$$\Sigma(\lambda, r, s, u) = u^{2f_1} \left[\Sigma_1\left(\lambda, \frac{r}{s}, s\right) + (u^{-2} - 1)\Sigma_2\left(\lambda, \frac{r}{s}, s\right) \right] \quad (2.3.16)$$

avec :

$$\begin{aligned} \Sigma_1(\lambda, x, y) &= \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} x^{-2m_j} y^{-2n_j}, \\ \Sigma_2(\lambda, x, y) &= \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} x^{-2m_j} y^{-2n_j} f_{j+1}. \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

Dans le cas $s = r$, c'est-à-dire $\lambda_{AB}\lambda_{BA} = \lambda_{AA}\lambda_{BB}$, le comportement critique est le même que pour le problème de liaison. En effet, $\Sigma_1(\lambda, 1, r) = S(\lambda, r) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} r^{-2n_j}$, et en utilisant l'identité

$$f_{j+1} = \frac{r^{-2f_{j+1}} - 1}{r^{-2} - 1} \quad (f_{j+1} = 0, 1), \quad (2.3.18)$$

on obtient :

$$\Sigma(\lambda, r, r, u) = u^{2(f_1-1)} \frac{1-u^2}{1-r^2} \left[\left(\lambda^2 r^2 + \frac{u^2 - r^2}{1-u^2} \right) S(\lambda, r) - \lambda^2 r^2 \right]. \quad (2.3.19)$$

Dans ce cas, le comportement critique est à nouveau gouverné par $S(\lambda, r)$.

3.3.2. Séquence de Thue-Morse

Dans le problème de site, les densités asymptotiques de liaison de la séquence de Thue-Morse sont :

$$\begin{aligned} \rho_{\infty}^{AA} &= \rho_{\infty}^{BB} = 1/6, \\ \rho_{\infty}^{AB} &= \rho_{\infty}^{BA} = 1/3, \end{aligned} \quad (2.3.20)$$

ce qui conduit au couplage critique : $\lambda_c = r^{-1/6} s^{-1/3}$.

A partir des relations récursives de la séquence de Thue-Morse

$$\begin{aligned} f_{2p} &= 1 - f_p, \\ f_{2p+1} &= f_{p+1}, \end{aligned} \quad (2.3.21)$$

on peut écrire :

$$m_{2j} = m_{2j+1} = n_{j+1} - m_j. \quad (2.3.22)$$

La même relation est valable pour des termes pairs et impairs, puisque $f_{2k+1}f_{2k+2} = 0$. Les sommes Σ_1 et Σ_2 de l'équation (2.3.17) vérifient les équations fonctionnelles suivantes :

$$\Sigma_i(\lambda, x, y) = \sum_{j=1,2} a_{ij} \Sigma_j(\lambda^2 y, x^{-1} \cdot x) \quad i = 1, 2 \quad (2.3.23)$$

avec :

$$\begin{aligned} a_{11} &= 1 + \lambda^{-2} \\ a_{12} &= x^{-2} - \lambda^{-2} + (\lambda x y)^{-2} - 1 \\ a_{21} &= \lambda^{-2} \\ a_{22} &= x^{-2} - \lambda^{-2} \end{aligned}$$

qui sont obtenues en décomposant les sommes en termes pairs et impairs. Par itération, avec des pas $k \geq 1$, les arguments des sommes Σ_i deviennent :

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \lambda^{2^k} x^{[2^{k-1} + (-1)^k]/3} y^{2^{k-1}}, \\ x_k &= y_k^{-1} = x^{(-1)^k}, \end{aligned} \quad (2.3.24)$$

et les équations fonctionnelles (2.3.23) peuvent alors s'écrire sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \Sigma_1(\lambda_k, x_k, y_k) \\ \Sigma_2(\lambda_k, x_k, y_k) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_k \begin{pmatrix} \Sigma_1(\lambda_{k+1}, x_{k+1}, y_{k+1}) \\ \Sigma_2(\lambda_{k+1}, x_{k+1}, y_{k+1}) \end{pmatrix}$$

avec :

$$\mathbf{T}_k = \begin{pmatrix} 1 + \lambda_k^{-2} & x_k^{-2} - 1 \\ \lambda_k^{-2} & x_k^{-2} - \lambda_k^{-2} \end{pmatrix} \quad k \geq 1. \quad (2.3.25)$$

Donc :

$$\begin{pmatrix} \Sigma_1(\lambda_1, x_1, y_1) \\ \Sigma_2(\lambda_1, x_1, y_1) \end{pmatrix} = \prod_{k=1}^{\infty} \mathbf{T}_k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.3.26)$$

en raison de la forme des Σ_i quand $k \rightarrow \infty$. Les relations (2.3.16), (2.3.25) et (2.3.26) permettent de calculer l'aimantation de surface m_s représentée sur la figure 2.3.2 en fonction de $(\lambda_c/\lambda)^2$.

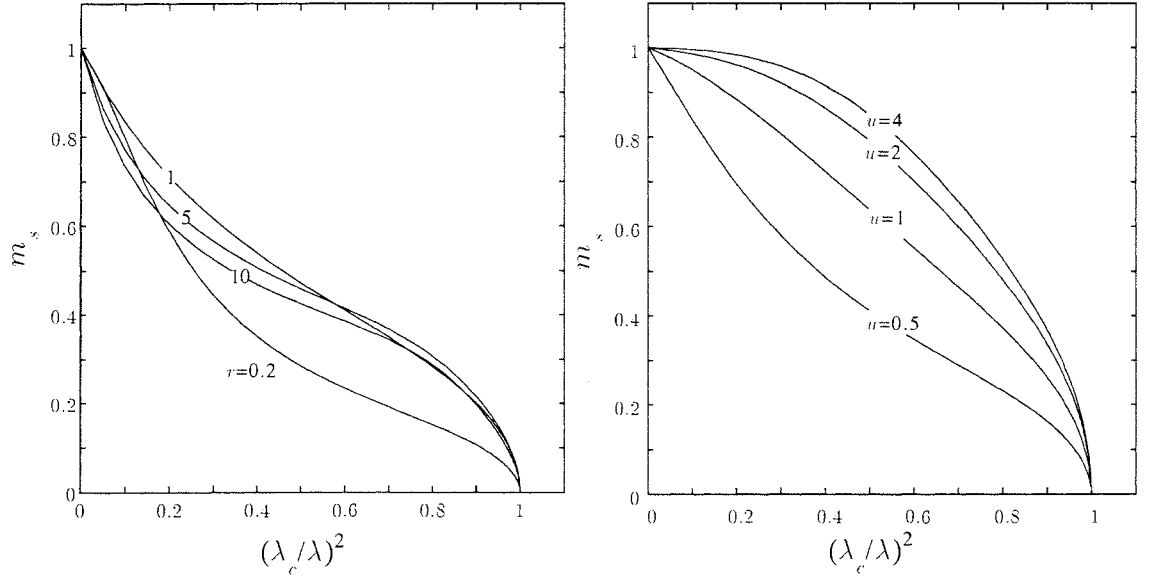


Figure 2.3.2 Dépendance en température de l'aimantation de surface pour la séquence de Thue-Morse dans le cadre du problème de site. Le premier cas représente plusieurs valeurs de r , avec $u = 0.5$ et $s = 1$. Le second représente plusieurs valeurs de u , avec $r = 0.5$ et $s = 1$.

Il semble difficile d'obtenir une expression analytique explicite de l'aimantation de surface, puisque la forme de la matrice $\mathbf{T}_k$ dépend de l'indice k . Cependant, il est possible d'évaluer l'expression de l'exposant magnétique de surface β_s en étudiant la dépendance en L de la série tronquée $\Sigma_L(z)$ au point critique $z = (\lambda_c/\lambda)^2 = 1$ (IGLÓI 1986). Les équations (2.3.24) s'écrivent, en fonction des arguments r/s et s :

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \left(\frac{r}{s}\right)^{(-1)^k/3} \left(\frac{\lambda}{\lambda_c}\right)^{2^k}, \\ x_k &= y_k^{-1} = \left(\frac{r}{s}\right)^{(-1)^k}, \end{aligned} \quad (2.3.27)$$

de telle sorte que, au point critique $(\lambda/\lambda_c = 1)$, les éléments de matrice de $\mathbf{T}_k$ ne dépendent de k que par l'intermédiaire de $(-1)^k$. On utilise alors le produit $\mathbf{U} = \mathbf{T}_{2p-1} \mathbf{T}_{2p}$ avec :

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 2 + w + w^2 & (w^{-1} - w)(1 + w + w^{-1}) \\ w + w^2 & (1 - w)(2 + w) \end{pmatrix} \quad (2.3.28)$$

et $w = (r/s)^{2/3}$.

En prenant $L = 2^{2l}$, on obtient les L premiers termes de $\Sigma_L(z)$ comme facteurs indépendants de L en gardant les $2l$ premiers termes du produit infini de l'équation (2.3.26). Du fait de leur expression, les éléments de matrice de $\mathbf{T}_k$ appartiennent à la première colonne de la matrice résultant du produit fini. En utilisant l'expression

de $\mathbf{U}$, ils sont alors donnés par :

$$\mathbf{U}^l \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

au point critique. Après diagonalisation, on obtient :

$$\Sigma_L(1) \sim (2^{2l})^{2\beta_s} \sim (w^{1/4} + w^{-1/4})^{2l} \quad (2.3.29)$$

où le dernier terme est la $l^{\text{ème}}$ puissance de la plus grande valeur propre de $\mathbf{U}$. Finalement, l'exposant de l'aimantation de surface s'exprime par :

$$\beta_s = \frac{\ln[(rs^{-1})^{1/6} + (rs^{-1})^{-1/6}]}{2 \ln 2}. \quad (2.3.30)$$

L'exposant de l'aimantation de surface est représenté en fonction de r/s sur la figure 2.3.3.

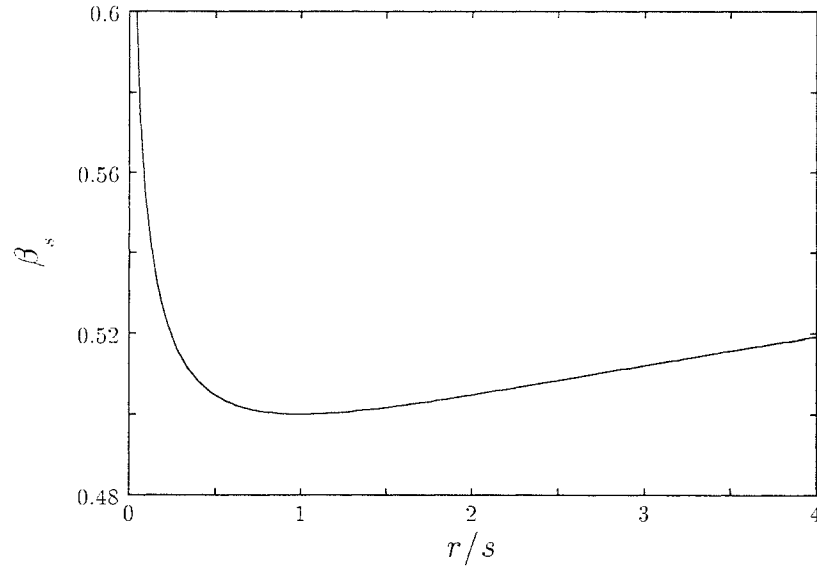


Figure 2.3.3 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s en fonction de r/s pour la séquence de Thue-Morse dans le cadre du problème de site.

La valeur minimum $\beta_s = 1/2$ correspondant au système homogène et au comportement du problème de liaison est atteinte pour $r = s$.

Cela confirme donc que la séquence de Thue-Morse, qui est non pertinente dans le cadre du problème de liaison, devient effectivement marginale pour le problème de site avec un exposant de l'aimantation de surface non universel et dépendant de l'amplitude des couplages.

3.3.3. Séquence “doublement de période”

Dans le problème de site, le couplage critique de la séquence “doublement de période” est donné par :

$$\lambda_c = (rs)^{-1/3} \quad (2.3.31)$$

puisque les densités asymptotiques de liaison sont :

$$\rho_\infty^{AB} = \rho_\infty^{BA} = \rho_\infty^{BB} = \frac{1}{3}, \quad \rho_\infty^{AA} = 0. \quad (2.3.32)$$

A partir des relations récursives $f_{2p} = 1 - f_p$, $f_{2p+1} = 1$, on peut écrire :

$$m_{2j} = 2j - 2n_j, \quad m_{2j+1} = 2j + 1 - 2n_j - f_{j+1}.$$

En décomposant les sommes données en (2.3.17) en termes pairs et impairs et en utilisant l'identité

$$a^{f_k} = \frac{b-a}{b-1} + \frac{a-1}{b-1} b^{f_k} \quad (f_k = 0, 1), \quad (2.3.33)$$

on obtient :

$$\Sigma_i(\lambda, x, y) = a_i + b_i S[(\lambda xy)^2, (x^2 y)^{-1}] \quad i = 1, 2 \quad (2.3.34)$$

où :

$$\begin{aligned} a_1 &= -(\lambda xy)^2 \frac{x^2 - 1}{x^4 y^2 - 1} \\ b_1 &= 1 + (\lambda y)^{-2} \frac{x^2 y^2 - 1}{x^4 y^2 - 1} + (\lambda xy)^2 \frac{x^2 - 1}{x^4 y^2 - 1} \\ a_2 &= \frac{(\lambda xy)^2}{x^4 y^2 - 1} \\ b_2 &= 1 + \frac{\lambda^{-2} x^2 - (\lambda xy)^2}{x^4 y^2 - 1}. \end{aligned}$$

En reprenant l'expression de S du problème de liaison donnée en (2.2.14), ces relations, avec $x = r/s$, $y = s$ et l'équation (2.3.16), donnent finalement :

$$\Sigma(\lambda, r, s, u) = a + b S \left[\lambda^2 r^2, \frac{s}{r^2} \right]; \quad (2.3.35)$$

$$\begin{aligned} a &= \lambda^2 r^2 \frac{s^2 - r^2 u^2}{r^4 - s^2} \\ b &= 1 + \frac{\lambda^{-2}(r^2 - u^2) + \lambda^2 r^2 (r^2 u^2 - s^2)}{r^4 - s^2}. \end{aligned} \quad (2.3.36)$$

Cette dernière relation, avec l'équation (2.2.22), permet de calculer l'aimantation de surface pour le problème de site ; elle est représentée sur la figure 2.3.4.

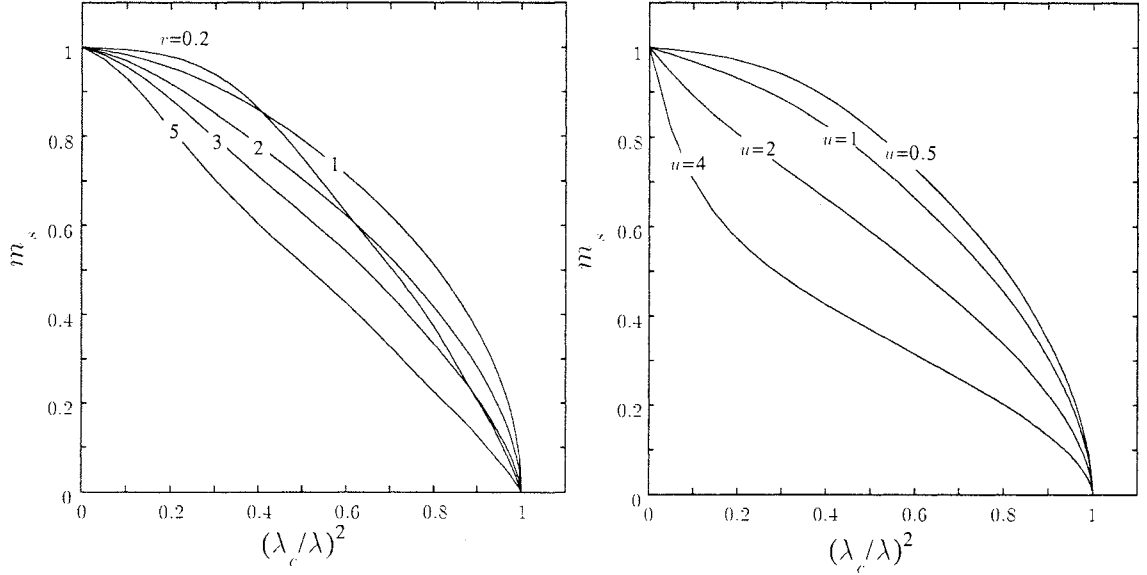


Figure 2.3.4 Dépendance en température de l'aimantation de surface pour la séquence “doublement de période” dans le cadre du problème de site. Le premier cas représente plusieurs valeurs de r , avec $u = 0.5$ et $s = 1$. Le second représente plusieurs valeurs de u , avec $r = 0.5$ et $s = 1$.

Le comportement critique de l'aimantation de surface pour le problème de site est gouverné par la singularité de $S(\lambda', r')$ dans l'expression (2.3.35), à $\lambda'_c = r^{-2/3}$, avec $\lambda' = \lambda^2 r^2$, $r' = s r^{-2}$. Le couplage critique satisfait donc $\lambda_c^2 r^2 = (s r^{-2})^{-2/3}$ en accord avec (2.3.31). En changeant λ_c en $\lambda'_c = (s r^{-2})^{-2/3}$ dans l'équation (2.2.25), on obtient l'expression analytique de l'exposant de l'aimantation de surface pour le problème de site :

$$\beta_s = \frac{\ln[(r^2 s^{-1})^{1/3} + (r^2 s^{-1})^{-1/3}]}{2 \ln 2}. \quad (2.3.37)$$

La variation de β_s en fonction de r^2/s est représentée sur la figure 2.3.5.

On remarque que, lorsque $r = s$, l'exposant critique est le même que pour le problème de liaison. Par ailleurs, la valeur de l'exposant correspondant au système homogène $\beta_s = 1/2$ est obtenue lorsque $s = uv = r^2$ et $\lambda_c = r^{-1}$. Ce résultat est lié à l'absence de paires AA dans la séquence “doublement de période”.

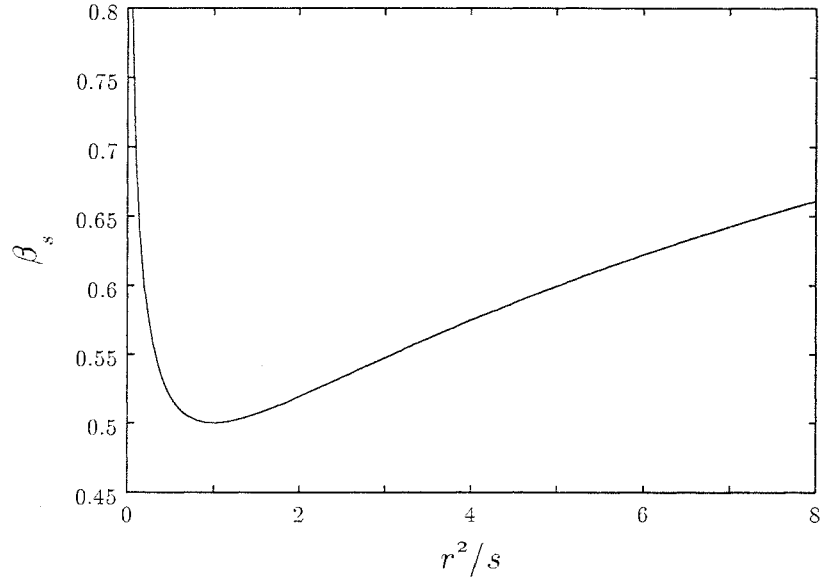


Figure 2.3.5 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s en fonction de r^2/s pour la séquence "doublement de période" dans le cadre du problème de site.

3.3.4. Séquence "pliage ternaire"

Dans le problème de site, les densités asymptotiques de liaison de la séquence "pliage ternaire"

$$\rho_\infty^{AA} = \rho_\infty^{BB} = \frac{1}{6}, \quad \rho_\infty^{AB} = \rho_\infty^{BA} = \frac{1}{3}, \quad (2.3.38)$$

conduisent au couplage critique :

$$\lambda_c = r^{-1/6} s^{-1/3}. \quad (2.3.39)$$

A partir des relations récursives (2.2.29), on obtient :

$$m_{3j} = n_j, \quad m_{3j+1} = n_j, \quad m_{3j+2} = n_j + f_{j+1}. \quad (2.3.40)$$

En décomposant à nouveau les sommes (2.3.17), on peut écrire :

$$\Sigma_i(\lambda, x, y) = a_i + b_i S(\lambda^3 y, xy) \quad i = 1, 2 \quad (2.3.41)$$

avec :

$$\begin{aligned} a_1 &= \lambda^2 \frac{1 - x^{-2}}{(xy)^{-2} - 1} \\ b_1 &= 1 + \lambda^{-2} + \lambda^{-4} y^{-2} \frac{(xy)^{-2} - x^{-2}}{(xy)^{-2} - 1} + \lambda^2 \frac{x^{-2} - 1}{(xy)^{-2} - 1} \\ a_2 &= \frac{\lambda^2}{x^2 - 1} \frac{x^{-2} - 1}{(xy)^{-2} - 1} \\ b_2 &= \lambda^{-2} + \frac{\lambda^{-4} y^{-2}}{x^2 - 1} \frac{x^{-2} - 1}{(xy)^{-2} - 1} - \frac{\lambda^2}{x^2 - 1} \frac{x^{-2} - 1}{(xy)^{-2} - 1}. \end{aligned}$$

On obtient finalement l'expression de $\Sigma(\lambda, r, s, u)$ permettant de calculer l'aimantation de surface pour le problème de site sous la forme :

$$\Sigma(\lambda, r, s, u) = a + bS(\lambda^3 s, r) \quad (2.3.42)$$

$$\begin{aligned} a &= \lambda^2 \frac{1 - x^{-2}}{(xy)^{-2} - 1} \left[1 - \frac{u^{-2} - 1}{x^2 - 1} \right] \\ b &= 1 + \lambda^{-2} + \lambda^{-4} y^{-2} \frac{(xy)^{-2} - x^{-2}}{(xy)^{-2} - 1} + \lambda^2 \frac{x^{-2} - 1}{(xy)^{-2} - 1} \\ &\quad + (u^{-2} - 1) \left[\lambda^{-2} + \frac{\lambda^{-4} y^{-2}}{x^2 - 1} \frac{x^{-2} - 1}{(xy)^{-2} - 1} - \frac{\lambda^2 (x^{-2} - 1)}{(x^2 - 1)[(xy)^{-2} - 1]} \right]. \end{aligned} \quad (2.3.43)$$

L'aimantation de surface de la séquence “pliage ternaire” est représentée sur la figure 2.3.6 pour le problème de site.

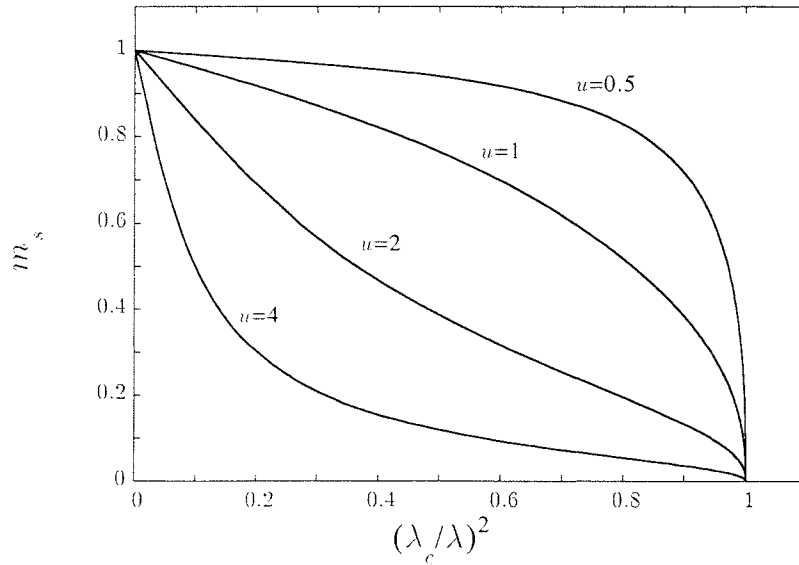


Figure 2.3.6 Dépendance en température de l'aimantation de surface pour la séquence “pliage ternaire” dans le cadre du problème de site.

On détermine l'exposant β_s pour le problème de site de la même façon que pour la séquence “doublement de période” en remarquant que le comportement critique de l'aimantation de surface est gouverné par la singularité de $S(\lambda', r')$ dans l'expression (2.3.42) à $\lambda'_c = r^{-1/2}$, avec $\lambda' = \lambda^3 s$, $r' = r$. Le couplage critique satisfait donc $\lambda_c^3 s = r^{-1/2}$, en accord avec (2.3.39). En changeant λ_c en $\lambda'_c = r^{-1/2}$ dans l'expression $\beta_s = \ln(2 + \lambda_c^{-2})/2 \ln 3$, on obtient :

$$\beta_s = \frac{\ln(2 + r)}{2 \ln 3}. \quad (2.3.44)$$

L'exposant de l'aimantation de surface de la séquence “pliage ternaire” est le même dans le problème de liaison et dans le problème de site.

4. Conclusion

Nous avons présenté, dans ce chapitre, les résultats exacts obtenus pour l'aimantation de surface du modèle d'Ising en champ transverse perturbé par des séquences apériodiques marginales. Nous avons pu vérifier le critère de pertinence énoncé par Luck, puisque nous avons obtenu des exposants critiques qui dépendent continûment de l'amplitude de la modulation apériodique dans le cas où l'exposant de divagation ω est nul. Par ailleurs, nous avons pu mener une étude comparative de l'influence de l'apériodicité en fonction de la forme prise par l'interaction (mécanisme d'échange direct ou indirect). Ainsi, nous avons constaté que, pour une séquence apériodique donnée, l'apériodicité de site peut être plus dangereuse que l'apériodicité de liaison.

Chapitre 3

Comportement d'échelle anisotrope dans la chaîne d'Ising quantique perturbée par une séquence marginale de volume

1. Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions de façon plus détaillée des systèmes d'Ising apériodiques en couches à deux dimensions dans la limite anisotrope extrême. Trois séquences marginales sont à nouveau examinées : “doublement de période”, “pliage de papier” et “pliage ternaire”. Nous verrons que l'apériodicité induit un comportement d'échelle anisotrope (BERCHE *et al* 1995, BERCHE, BERCHE et TURBAN 1996).

L'aimantation de surface a été déterminée analytiquement pour ces trois suites au chapitre précédent. Le comportement anisotrope est vérifié numériquement pour les énergies d'excitations du système, la densité d'énergie libre, les fonctions de corrélation de surface, l'aimantation de volume et la densité d'énergie de volume. Nous verrons que les différents exposants critiques du système sont directement reliés à l'exposant d'anisotropie. On présentera également les systèmes multicouches pour lesquels on mettra en évidence l'existence d'un “cross-over” entre le comportement gouverné par le point fixe homogène et celui gouverné par le point fixe apériodique. Enfin, nous vérifierons le comportement anisotrope de ces systèmes multicouches à partir de l'étude de la longueur de corrélation.

2. Perturbations marginales de liaison

2.1. Aimantation de surface et énergie de surface

Nous allons étudier les comportements de l'aimantation de surface et de la densité d'énergie de surface pour les séquences “doublement de période”, “pliage de papier” et “pliage ternaire” dans le cadre du problème de liaison. On rappelle la suite obtenue pour ces trois séquences après trois substitutions :

i) “doublement de période” (COLLET et ECKMANN 1980)

$$1\ 0\ 1\ 1\ 1\ 0\ 1\ 0$$

ii) “pliage de papier” (DEKKING, MENDÈS-FRANCE et VAN DER POORTEN 1983b)

$$1\ 1\ 0\ 1\ 1\ 0\ 0\ 1\ 1\ 1\ 0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 1$$

iii) “pliage ternaire” (DEKKING, MENDÈS-FRANCE et VAN DER POORTEN 1983a)

$$0\ 1\ 0\ 0\ 1\ 1\ 0\ 1\ 0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 1\ 1\ 0\ 1\ 1\ 0\ 1\ 0\ 0\ 1\ 1\ 0\ 1\ 0$$

Pour ces trois séquences, on obtient pour l'aimantation de surface une transition du second ordre avec des exposants $\beta_s(r)$ qui varient de façon continue avec le rapport des interactions. Le comportement non universel est dû à la valeur nulle de ω qui, avec $\nu = 1$ pour le modèle d'Ising bidimensionnel, conduit à des perturbations marginales pour les trois séquences. On peut remarquer, comme nous l'avons déjà souligné au chapitre précédent, que la valeur inchangée $\nu = 1$ de l'exposant de la longueur de corrélation est imposée par le critère de marginalisme qui reste satisfait pour le système perturbé et permet d'obtenir des exposants variables. β_s est donc égal à la dimension anormale de l'aimantation de surface x_{ms} avec, sur la surface gauche :

$$x_{ms} = \frac{\ln(r^{1/3} + r^{-1/3})}{2 \ln 2} \text{ (PD)}, \quad x_{ms} = \frac{\ln(1 + r^{-1})}{2 \ln 2} \text{ (PF)}, \quad x_{ms} = \frac{\ln(2 + r)}{2 \ln 3} \text{ (TF)}. \quad (3.2.1)$$

Pour les trois séquences étudiées, la dimension magnétique anormale $\bar{x}_{ms}$ sur la surface droite est obtenue en échangeant les couplages perturbés et non perturbés, ce qui conduit à :

$$\bar{x}_{ms} = x_{ms} \text{ (PD)}, \quad \bar{x}_{ms} = \frac{\ln(1 + r)}{2 \ln 2} \text{ (PF)}, \quad \bar{x}_{ms} = \frac{\ln(2 + r^{-1})}{2 \ln 3} \text{ (TF)}. \quad (3.2.2)$$

En effet, les séquences “pliage de papier” et “pliage ternaire” vues à partir du côté droit sont simplement obtenues en échangeant les chiffres 0 et 1 si on ne tient pas compte du dernier chiffre (une ligne de défauts en surface étant

non pertinente⁽¹⁾). Pour la séquence “doublement de période” qui, excepté le dernier chiffre, est symétrique, les deux dimensions anormales sont les mêmes. Des expressions similaires, fonctions de K_1 et K_2 , sont obtenues dans les systèmes classiques bidimensionnels correspondants (IGLÓI, LAJKÓ et SZALMA 1995).

La variation des dimensions anormales x_{ms} en fonction de r est représentée sur la figure 3.2.1 pour les trois séquences marginales.

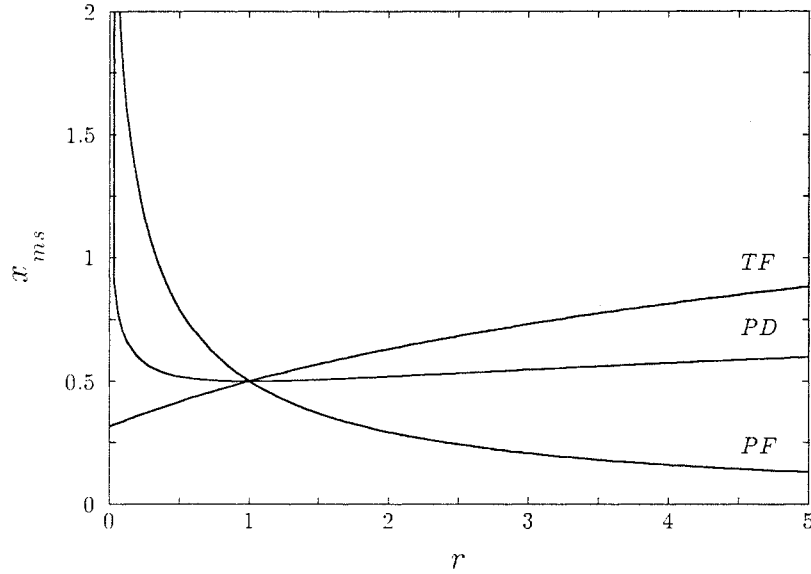


Figure 3.2.1 Variation des dimensions anormales x_{ms} en fonction du rapport des couplages r pour les séquences marginales “doublement de période”, “pliage de papier” et “pliage ternaire”.

Les exposants x_{ϵ_s} associés à la densité d'énergie de surface ϵ_s ont également été déterminés numériquement par effets de taille finie au point critique en calculant l'énergie de surface pour différentes tailles de la chaîne ($L = 2^2$ à 2^{16} pour les séquences PD et PF et $L = 3$ à 3^{10} pour la séquence TF) et en extrapolant à taille infinie à l'aide de l'algorithme BST (HENKEL et SCHÜTZ 1988). Ces exposants sont donnés dans le tableau 3.2.1.

Les valeurs extrapolées sont en accord avec la relation

$$x_{\epsilon_s} = 3x_{ms} + \bar{x}_{ms}. \quad (3.2.3)$$

Pour obtenir l'exposant correspondant à la surface droite, il suffit d'échanger x en $\bar{x}$.

La variation de x_{ϵ_s} en fonction de r pour les trois séquences marginales est représentée sur la figure 3.2.2.

(1) Se reporter à la discussion donnée au §2.6.1.

r	PD		PF		TF	
	x_{es}	$3x_{ms} + \bar{x}_{ms}$	x_{es}	$3x_{ms} + \bar{x}_{ms}$	x_{es}	$3x_{ms} + \bar{x}_{ms}$
0.2	2.396 71(1)	2.396 711	4.009(1)	4.008 961	1.962(3)	1.962 149
0.5	2.076 34(4)	2.076 341	2.669 92(5)	2.669 925	1.882 1(2)	1.881 995
1.0	2.000 0(4)	2.	2.000 0(3)	2.	2.000 1(2)	2.
1.5	2.026 3(1)	2.026 274	1.766 41(8)	1.766 412	2.156 873(9)	2.156 866
2.0	2.076 4(3)	2.076 341	1.669 9(3)	1.669 925	2.309 81(1)	2.309 811
2.5	2.132 4(8)	2.132 544	1.631 83(6)	1.631 818	2.452 048(9)	2.452 048
3.0	2.189 29(9)	2.189 298	1.622 6(6)	1.622 556	2.583 09(7)	2.583 082
3.5	2.244 59(7)	2.244 588	1.628 84(6)	1.628 818	2.703 9(5)	2.703 831
4.0	2.297 6(3)	2.297 688	1.643 9(7)	1.643 856	2.815 3(8)	2.815 465
4.5	2.348 3(1)	2.348 392	1.664(2)	1.663 976	2.919 1(4)	2.919 098
5.0	2.396(1)	2.396 711	1.687(7)	1.687 033	3.016(3)	3.015 708

Tableau 3.2.1 Exposants de l'énergie de surface pour les trois séquences marginales étudiées en fonction du rapport des couplages r . Pour chaque séquence, x_{es} est la valeur extrapolée numérique tandis que $3x_{ms} + \bar{x}_{ms}$ donne le résultat analytique conjecturé. Les valeurs entre parenthèses donnent l'incertitude sur le dernier chiffre.

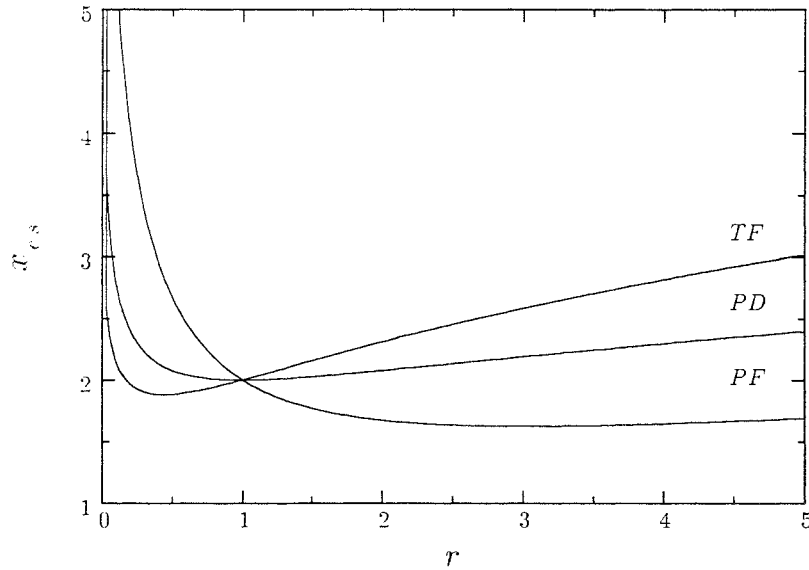


Figure 3.2.2 Variation de l'exposant de l'énergie de surface x_{es} en fonction du rapport des couplages r pour les séquences "doublement de période", "pliage de papier" et "pliage ternaire".

2.2. Energies d'excitations

On rappelle l'expression de l'énergie de surface définie au premier chapitre :

$$e_s = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\phi_1(1)\phi_2(1).$$

Si l'on suppose que la composante de surface du second vecteur propre a le même comportement d'échelle que celle du premier vecteur propre, c'est-à-dire que $\phi_1(1)\phi_2(1) \sim L^{-2x_{ms}}$, on peut alors conjecturer que les énergies d'excitations se comportent en fonction de la taille selon L^{-z} avec, en accord avec la relation (3.2.3) :

$$z = x_{ms} + \bar{x}_{ms}, \quad (3.2.4)$$

z étant un exposant de volume. Le même comportement est obtenu en conditions de bords libres et en conditions périodiques. La figure 3.2.3 représente les variations de $\ln \varepsilon_1$ en fonction de $\ln L$ au point critique pour la séquence "pliage de papier" et pour différentes valeurs du rapport des interactions r (BERCHE *et al* 1995).

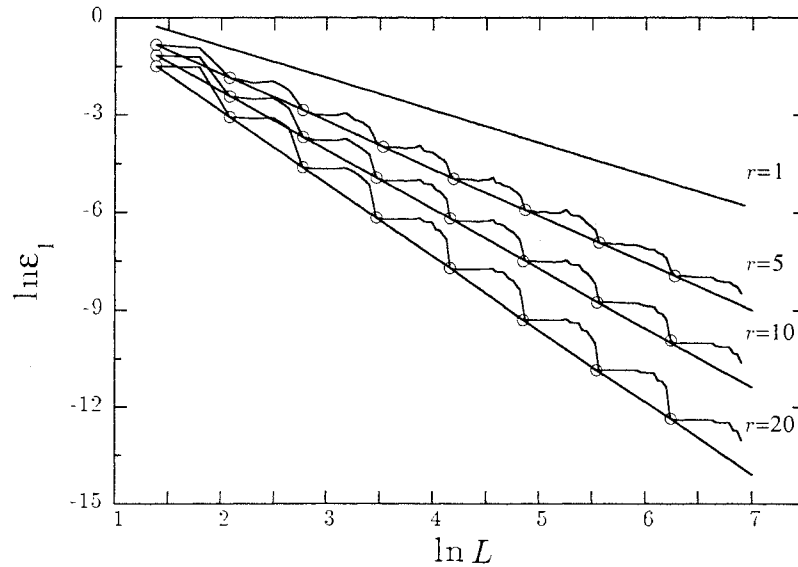


Figure 3.2.3 Courbe en log-log de la première énergie d'excitation ε_1 en fonction de la taille L de la chaîne pour la séquence "pliage de papier" avec des conditions périodiques et pour différentes valeurs de r . Les pentes $-z$ sont calculées pour des valeurs de L égales à 2^n (○), qui correspondent à une amplitude constante.

Sur cette figure, la taille de la chaîne L prend toutes les valeurs entières de 4 à 1024 ce qui conduit à des oscillations log-périodiques autour des lois de puissances attendues. Les pentes de ces droites permettant d'accéder aux exposants z sont calculées pour des valeurs de L égales à 2^n . Les oscillations sont dues à un préfacteur

log-périodique analogue à celui observé pour les fluctuations des couplages données en (2.2.7) (DUMONT 1990) :

$$\Delta(L) = \sum_{k=1}^L (\lambda_k - \bar{\lambda}) \sim \delta L^\omega F\left(\frac{\ln L}{\ln \Lambda_1}\right) \quad (3.2.5)$$

où $F(x)$ est une fonction périodique de son argument avec une période égale à 1. Ces amplitudes oscillantes sont également obtenues pour d'autres grandeurs critiques comme l'aimantation de surface par exemple (KAREVSKI 1996). Lorsque la taille du système tend vers l'infini, la longueur caractéristique du système devient la longueur de corrélation. Dans ce cas, L est remplacée par la longueur de corrélation $\xi \sim t^{-1}$ près du point critique et l'argument de la fonction devient alors $\ln t / \ln \Lambda_1$.

Ce comportement est relié à l'invariance d'échelle discrète. Les arguments du groupe de renormalisation montrent que les amplitudes critiques peuvent être log-périodiques dans de tels systèmes (NIEMEIJER et VAN LEEUWEN 1976). Lorsque le facteur d'échelle prend des valeurs, imposées par la structure du système, de la forme $b = m^n$, l'amplitude critique des grandeurs physiques peut être une fonction périodique d'argument $\ln \theta / \ln m$ de période 1 où θ est un champ d'échelle⁽²⁾ (JONASINIO 1975, NAUENBERG 1975, KAREVSKI et TURBAN 1996).

Dans le tableau 3.2.2 figurent les exposants déterminés à partir des séquences extrapolées, avec les mêmes tailles que dans le paragraphe précédent, pour la première excitation. Le comportement d'échelle a par ailleurs été vérifié numériquement pour les six premières excitations.

Ce comportement d'échelle est caractéristique d'un système fortement anisotrope, c'est-à-dire avec des exposants associés à la longueur de corrélation différents, dans les deux directions. Dans la direction temporelle (le long des couches dans le système classique bidimensionnel), l'exposant vaut $\nu_{\parallel} = z\nu$ (BINDER et WANG 1989), tandis que dans la direction spatiale (perpendiculaire aux couches), l'exposant de la longueur de corrélation conserve sa valeur non perturbée $\nu = 1$.

La dépendance de l'exposant d'anisotropie z en fonction de r est représentée sur la figure 3.2.4 pour les trois séquences.

L'exposant d'anisotropie a depuis été déterminé analytiquement par renormalisation pour ces trois séquences (IGLÓI et TURBAN 1996), confirmant la conjecture (3.2.4).

⁽²⁾ Pour plus de détails concernant les amplitudes log-périodiques, se reporter à KAREVSKI 1996.

“doublement de période”						
r	ε_1		$\frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t}$		$\frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t_s}$	
	num.	z	num.	$z - 1$	num.	$z - 2x_{ms}$
0.5	1.038 19(4)	1.038 170	0.038 1(5)	0.038 170	2.076 1(3)	2.076 341
1.0	1.000 00(1)	1.	-0.000 1(2)	0.	2.000 1(3)	2.
2.0	1.038 17(3)	1.038 170	0.038(1)	0.038 170	2.076 3(2)	2.076 341
3.0	1.094 65(3)	1.094 649	0.094 7(4)	0.094 649	2.189 8(7)	2.189 298
4.0	1.149(2)	1.148 844	0.148 9(4)	0.148 844	2.302(6)	2.297 688
5.0	1.198(7)	1.198 356	0.198 3(2)	0.198 356	2.395(4)	2.396 711
“pliage de papier”						
r	z		$z - 1$		$z - 2x_{ms}$	
0.5	1.084 9(1)	1.084 963	0.085 0(6)	0.084 963	2.669 92(2)	2.669 925
1.0	1.000 00(3)	1.	-0.000 1(3)	0.	2.000 1(3)	2.
2.0	1.085 1(2)	1.084 963	0.085(1)	0.084 963	1.669 8(3)	1.669 925
3.0	1.206(4)	1.207 519	0.208(2)	0.207 519	1.622 2(5)	1.622 556
4.0	1.324(3)	1.321 928	0.321 9(2)	0.321 928	1.644 2(7)	1.643 876
5.0	1.424 0(0)	1.423 998	0.424 0(3)	0.423 998	1.686 7(9)	1.687 033
“pliage ternaire”						
r	z		$z - 1$		$z - 2x_{ms}$	
0.5	1.047 955(8)	1.047 952	0.047 96(6)	0.047 952	1.882 0(1)	1.881 995
1.0	0.999 99(6)	1.	0.000 01(6)	0.	1.999 96(6)	2.
2.0	1.047 96(6)	1.047 952	0.047 96(7)	0.047 952	2.309 5(4)	2.309 811
3.0	1.118 1(3)	1.118 109	0.118 11(5)	0.118 109	2.583 0(3)	2.583 082
4.0	1.184 6(3)	1.184 535	0.184 6(2)	0.184 535	2.815 5(2)	2.815 465
5.0	1.244 5(9)	1.244 464	0.245 0(9)	0.244 464	3.015 6(3)	3.015 708

Tableau 3.2.2 Exposants de la première excitation et de ses dérivées par rapport à t et à t_s pour les trois séquences avec conditions de bords libres. Les valeurs numériques extrapolées (num.) sont comparées aux résultats analytiques conjecturés. Les valeurs entre parenthèses donnent l’incertitude sur le dernier chiffre.

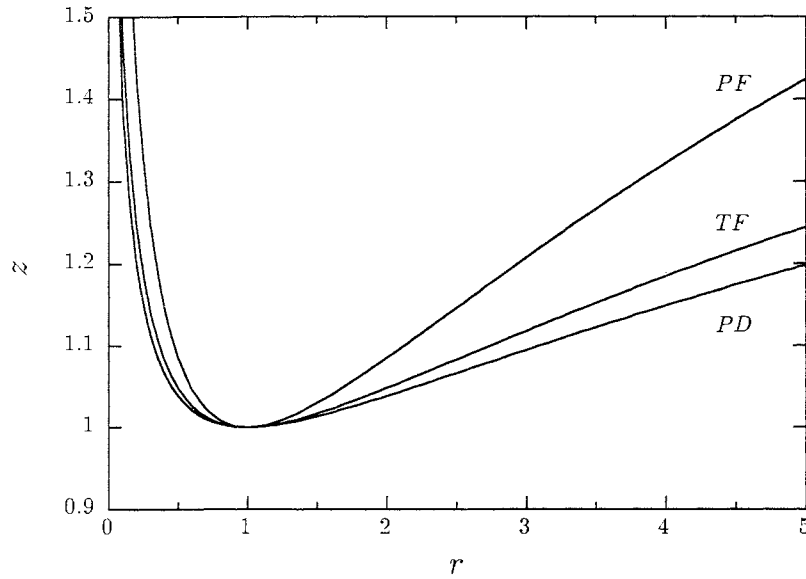


Figure 3.2.4 Variation de l'exposant d'anisotropie z en fonction du rapport des couplages r pour les séquences "doublement de période", "pliage de papier" et "pliage ternaire".

Par un changement d'échelle de facteur b , on peut s'attendre à ce que les excitations se comportent selon :

$$\varepsilon_\alpha(t, t_s, L^{-1}) = b^{-z} \varepsilon_\alpha(b^{1/\nu} t, b^{y_{ts}} t_s, bL^{-1}) \quad (3.2.6)$$

où t_s , de dimension y_{ts} , est le champ d'échelle thermique de surface conjugué à l'énergie de surface. Du fait de l'invariance d'échelle discrète des séquences, comme on l'a vu précédemment, le facteur d'échelle b doit prendre des valeurs de la forme m^n (m, n entier). En général, m est égal à la plus grande valeur propre Λ_1 de la matrice de substitution (DUMONT 1990). Ceci est bien vérifié pour les séquences "pliage de papier" et "pliage ternaire" ($m = 2$ et 3 respectivement), mais pas pour la séquence "doublement de période" pour laquelle $m = \Lambda_1^2 = 4$. En effet, le comportement de cette séquence est différent pour des valeurs paires ou impaires de n et il faut deux substitutions successives pour retrouver une séquence analogue.

Au point critique, comme on peut le voir dans le tableau 3.2.2, les dérivées premières par rapport aux champs d'échelle de volume et de surface se comportent suivant :

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} \sim L^{1-z}, \quad \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t_s} \sim L^{-z-2x_{ms}}. \quad (3.2.7)$$

Ces résultats sont cohérents avec (3.2.6) lorsque $\nu = 1$ et

$$y_{ts} = z - x_{es} = -2x_{ms} \quad (3.2.8)$$

en accord avec (3.2.3).

En conditions périodiques, les résultats numériques pour les exposants z et $z - 1$ sont analogues à ceux obtenus en conditions de bords libres, sauf pour l'exposant $z - 1$ du système homogène ($r = 1$) pour lequel on obtient numériquement -1 tandis que la valeur conjecturée vaut 0 . Ce résultat vient du fait qu'en conditions périodiques, pour le système pur, le comportement de la dérivée première des excitations est gouverné par le terme de correction au “scaling” qui varie en L^{-1} , l'amplitude du terme dominant en L^0 étant nulle.

Le comportement d'échelle des excitations donné en (3.2.6) est vérifié sur les courbes 3.2.5 sur lesquelles on a représenté $\varepsilon_1 L^z$ et $(\partial \varepsilon_1 / \partial t) L^{z-1}$ en fonction de Lt pour $r = 2$ et $r = 5$ avec la séquence “pliage de papier”. Le choix de tailles de la forme 2^n permet d'éviter les oscillations autour du comportement moyen.

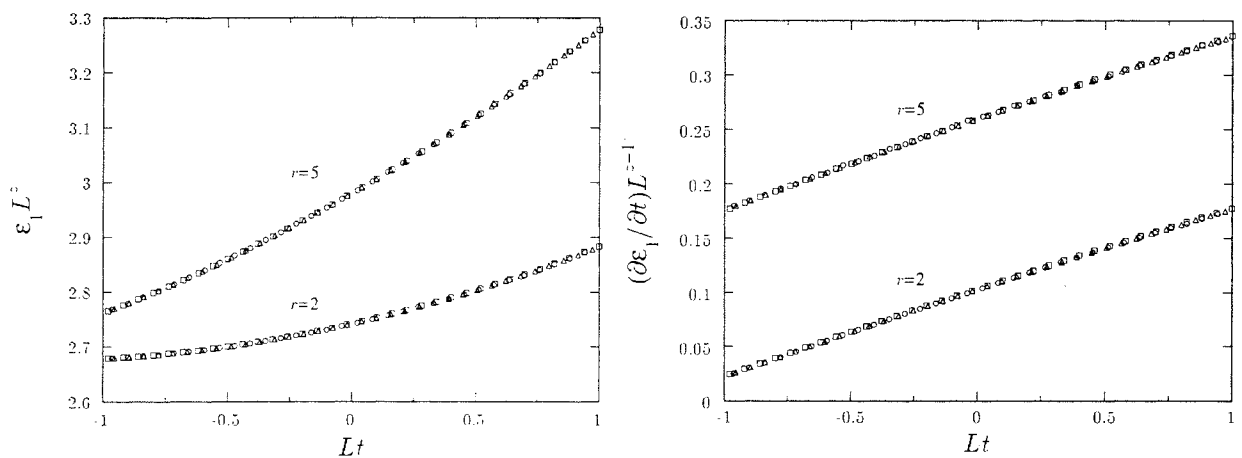


Figure 3.2.5 Vérification du comportement d'échelle des excitations et de leurs dérivées par rapport à la température pour la séquence “pliage de papier” avec $r = 2$ et $r = 5$ et $L = 2^8$ ($\square$), 2^9 ($\triangle$) et 2^{10} ($\circ$).

2.3. Densité d'énergie libre et chaleur spécifique

L'énergie libre par rangée est égale à l'énergie dans l'état fondamental de la chaîne quantique qui est donnée par (LIEB, SCHULTZ et MATTIS 1961) :

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}. \quad (3.2.9)$$

Pour un système de taille finie L , en conditions de bords libres (“FBC”), la densité d'énergie libre comprend une contribution de volume, proportionnelle à L , et une contribution de surface. Elle peut donc s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} F_{\text{FBC}} = f(t, t_s, h_s, L^{-1}) &= \frac{E_0}{L} = a(t) + \frac{1}{L} b(t, t_s, h_s) \\ &+ f_b(t, L^{-1}) + \frac{1}{L} f_s(t, t_s, h_s, L^{-1}) \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

où les deux derniers termes constituent les parties singulières des contributions de volume et de surface respectivement. Seule la correction au premier ordre en $\frac{1}{L}$ de la partie régulière a été prise en compte. Par changement d'échelle, les parties singulières se comportent de la façon suivante (BINDER et WANG 1989) :

$$\begin{aligned} f_b(t, L^{-1}) &= b^{-1-z} f_b(b^{1/\nu} t, bL^{-1}), \\ f_s(t, t_s, h_s, L^{-1}) &= b^{-z} f_s(b^{1/\nu} t, b^{y_{ts}} t_s, b^{y_{hs}} h_s, bL^{-1}) \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

où y_{ts} est donnée en (3.2.8), $y_{hs} = z - x_{ms} = \bar{x}_{ms}$ et $b = m^n$. En calculant la dérivée première de l'énergie libre de surface par rapport à h_s ou t_s , on retrouve le comportement critique attendu pour l'aimantation de surface ou l'énergie de surface respectivement.

Au point critique, avec $f_L = f(0, 0, 0, L^{-1})$, on peut s'attendre à une variation linéaire de $L(f_{mL} - f_L)$ avec L^{-z} . De même, si l'on considère les dérivées premières par rapport aux couplages de volume et de surface, on prévoit des variations linéaires de $L(\partial f_{mL}/\partial t - \partial f_L/\partial t)$ en fonction de L^{1-z} et de $L(\partial f_{mL}/\partial t_s - \partial f_L/\partial t_s)$ en fonction de $L^{-z-2x_{ms}}$. Ces comportements ont été vérifiés numériquement pour les trois séquences.

Les résultats pour la séquence "pliage ternaire" avec $m = 3$ sont représentés sur la figure 3.2.6.

La partie singulière de la dérivée seconde de f par rapport à t au point critique varie en fonction de la taille comme L^{1-z} , ce qui donne pour l'exposant critique de la chaleur spécifique de volume

$$\alpha = 1 - z. \quad (3.2.12)$$

La partie régulière de la densité d'énergie libre contribue pour sa part à une constante, éliminée par différence, plus un terme en L^{-1} dominé par la partie singulière tant que $z < 2$.

Les estimations numériques de α , obtenues par extrapolation des pentes de $\ln(\partial^2 f_{mL}/\partial t^2 - \partial^2 f_L/\partial t^2)$ en fonction de $\ln L$, sont données dans le tableau 3.2.3 avec $m = 4$ et L variant de 2^2 à 2^{16} pour les séquences "doublement de période" et "pliage de papier", $m = 3$ et $L = 3$ à 3^{10} pour la séquence "pliage ternaire".

L'exposant α prend des valeurs négatives puisque l'exposant d'anisotropie z est toujours supérieur à 1, la valeur du système non perturbé. La modulation aperiodique des couplages affaiblit donc la singularité critique de la chaleur spécifique.

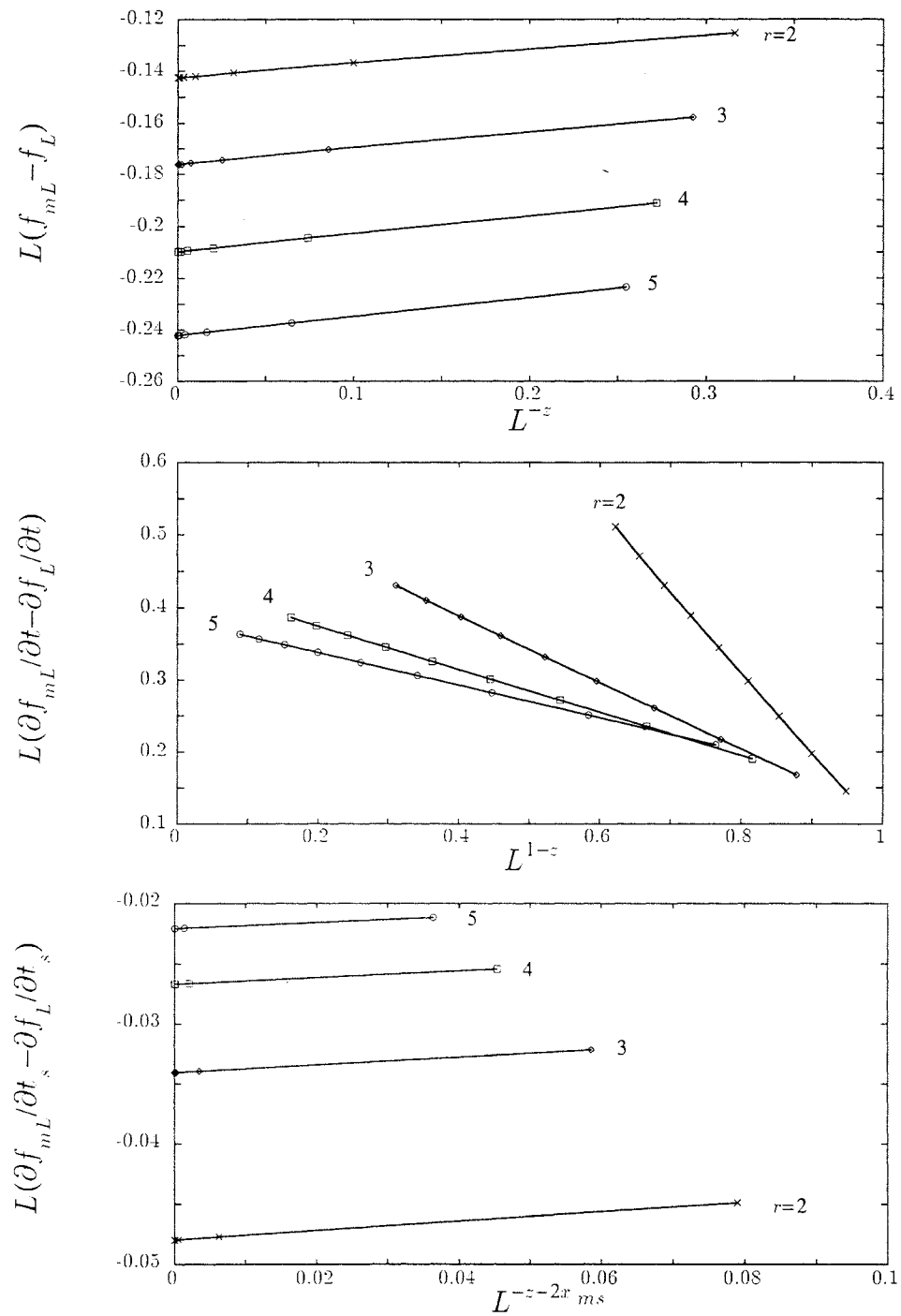


Figure 3.2.6 Vérification du comportement anisotrope par effets de taille finie de la densité d'énergie libre pour la séquence "pliage ternaire" avec $m = 3$ et des chaînes de taille L variant de 3 à 3^{10} .

r	PD		PF		TF	
	α	$1 - z$	α	$1 - z$	α	$1 - z$
0.25	-0.151(5)	-0.148 844	-0.29(5)	-0.321 928	-0.181(4)	-0.181 535
0.5	-0.039(4)	-0.038 170	-0.08(1)	-0.084 963	-0.046(3)	-0.047 952
0.75	-0.009(5)	-0.006 623	-0.011(5)	-0.014 874	-0.009(2)	-0.008 351
1.5	-0.015(3)	-0.013 137	-0.028(2)	-0.029 447	-0.015(4)	-0.016 552
2.0	-0.045(8)	-0.038 170	-0.081(4)	-0.084 963	-0.050(4)	-0.047 952
2.5	-0.069(6)	-0.066 272	-0.152(7)	-0.146 391	-0.086(6)	-0.082 978
3.0	-0.11(3)	-0.094 649	-0.207(2)	-0.207 519	-0.117(8)	-0.118 109
3.5	-0.13(1)	-0.122 294	-0.26(1)	-0.266 247	-0.157(7)	-0.152 102
4.0	-0.149(3)	-0.148 844	-0.31(1)	-0.321 928	-0.186(3)	-0.184 535
4.5	-0.172(4)	-0.174 196	-0.36(3)	-0.374 469	-0.217(2)	-0.215 310
5.0	-0.193(7)	-0.198 356	-0.45(4)	-0.423 998	-0.244(3)	-0.244 464

Tableau 3.2.3 Exposant de la chaleur spécifique pour les trois séquences marginales étudiées en fonction du rapport des couplages r . Pour chaque séquence, α est la valeur numérique extrapolée. La colonne suivante donne la valeur analytique conjecturée $1 - z$.

2.4. Fonctions de corrélation de surface

Comme le spectre d'excitations de l'hamiltonien et les vecteurs propres correspondants ont été déterminés, on peut calculer les fonctions de corrélation spin-spin et énergie-énergie qui sont données en (1.3.67) et (1.3.70). En accord avec la comportement d'échelle anisotrope, on s'attend à ce que, pour des chaînes de taille L , elles se comportent par changement d'échelle conformément à (1.2.21) :

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^s(\tau, L) &= b^{-2x_{ms}} G_{\sigma}^s(b^{-z}\tau, b^{-1}L), \\ G_{\epsilon}^s(\tau, L) &= b^{-2x_{es}} G_{\epsilon}^s(b^{-z}\tau, b^{-1}L). \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

ce qui donne, lorsque l'on pose $b = \tau^{1/z}$:

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^s(\tau, L) &= \tau^{-2x_{ms}/z} f_{\sigma}\left(\frac{\tau}{L^z}\right) = \tau^{-2x_{ms}/z} \left[f_{\sigma}(0) + \frac{\tau}{L^z} f'_{\sigma}(0) + \dots \right], \\ G_{\epsilon}^s(\tau, L) &= \tau^{-2x_{es}/z} f_{\epsilon}\left(\frac{\tau}{L^z}\right) = \tau^{-2x_{es}/z} \left[f_{\epsilon}(0) + \frac{\tau}{L^z} f'_{\epsilon}(0) + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

où $f_{\sigma}(\tau/L^z)$ et $f_{\epsilon}(\tau/L^z)$ sont des fonctions d'échelle développées au premier ordre dans (3.2.14). Les figures 3.2.7 et 3.2.8 représentent ces fonctions d'échelle pour les corrélations de surface spin-spin et énergie-énergie respectivement.

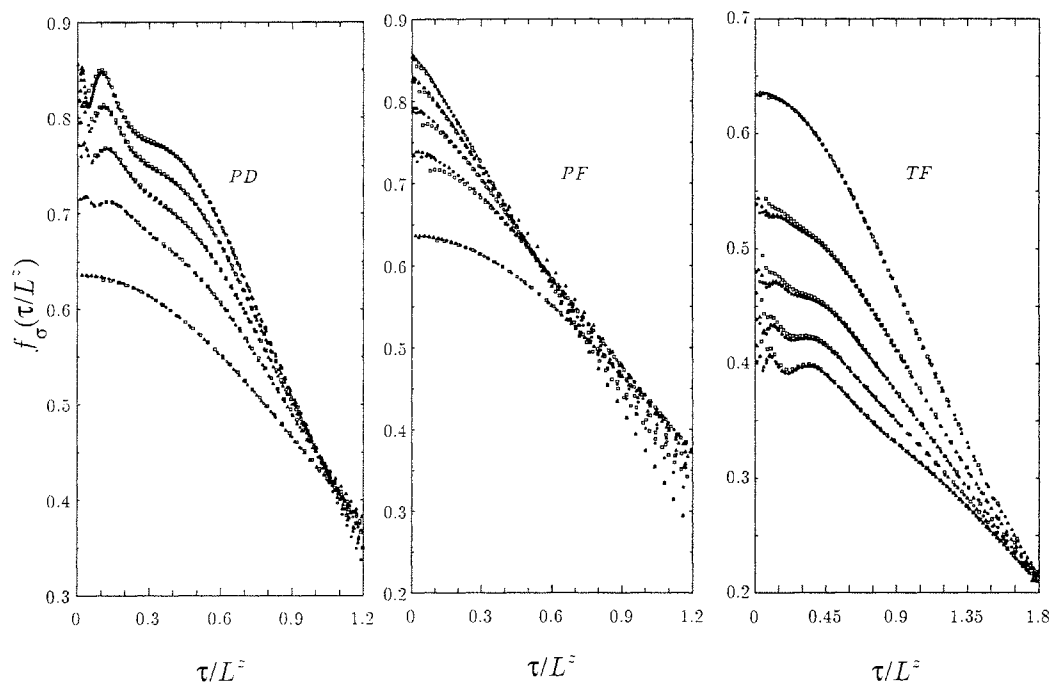


Figure 3.2.7 Fonctions d'échelle pour la fonction de corrélation de surface spin-spin. Pour les séquences “doublement de période” et “pliage de papier”, $r = 5, 4, 3, 2, 1$ depuis le haut vers le bas et $L = 2^6$ ($\square$), 2^8 ($\triangle$) et 2^{10} ($\circ$). Pour la séquence “pliage ternaire”, $r = 1, 2, 3, 4, 5$ depuis le haut vers le bas et $L = 3^4$ ($\square$), 3^5 ($\triangle$) et 3^6 ($\circ$).

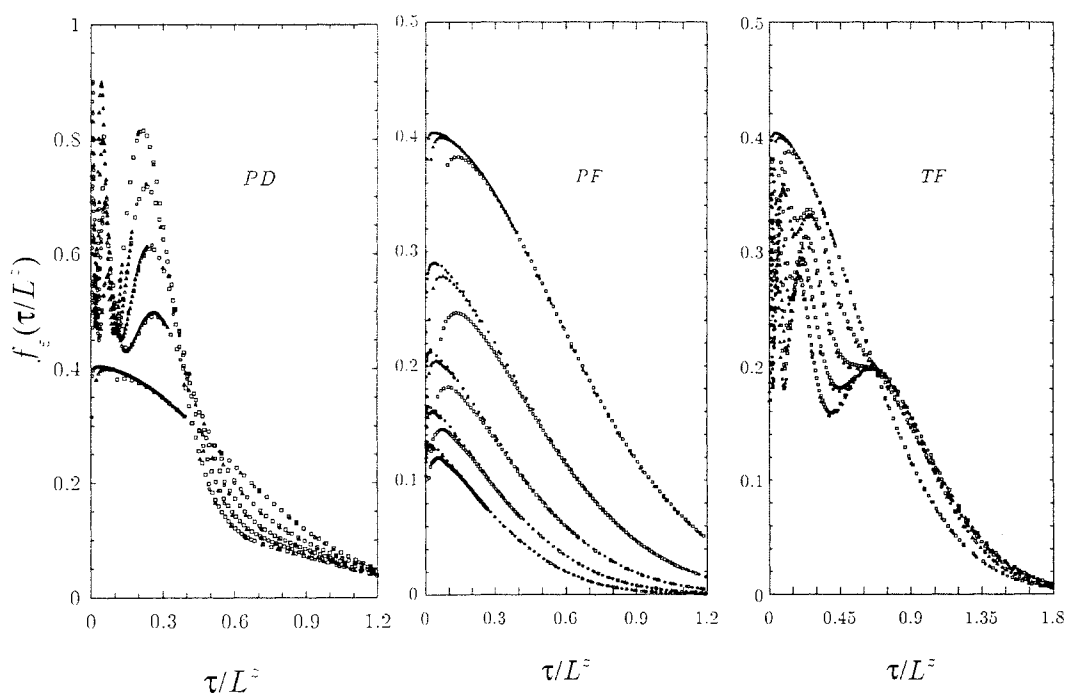


Figure 3.2.8 Fonctions d'échelle pour la fonction de corrélation de surface énergie-énergie. Les valeurs de r et de L sont les mêmes que pour la figure 3.2.7.

Les tableaux 3.2.4 et 3.2.5 donnent les exposants obtenus à partir des pentes des courbes en log-log pour τ variant de 10 à 100 et des chaînes de taille maximale $L = 2^{10}$ pour les séquences “doublement de période” et “pliage de papier”, $L = 3^6$ pour la séquence “pliage ternaire”.

r	PD		PF		TF	
	$\eta_{ }^{\sigma}$	$2x_{ms}/z$	$\eta_{ }^{\sigma}$	$2x_{ms}/z$	$\eta_{ }^{\sigma}$	$2x_{ms}/z$
0.5	1.04(5)	1.	1.459(2)	1.460 845	0.76(5)	0.795 880
1.	0.998(7)	1.	0.98(2)	1.	0.98(5)	1.
2.0	1.02(3)	1.	0.55(2)	0.539 155	1.22(3)	1.204 120
3.0	1.05(7)	1.	0.36(2)	0.343 711	1.30(2)	1.310 225
4.0	1.04(6)	1.	0.249(7)	0.243 529	1.34(4)	1.376 852
5.0	1.05(5)	1.	0.188(7)	0.184 715	1.47(5)	1.423 298

Tableau 3.2.4 Exposants des fonctions de corrélation de surface spin-spin déduits des pentes des courbes log-log au point critique. Les colonnes $2x_{ms}/z$ donnent les valeurs analytiques conjecturées.

r	PD		PF		TF	
	$\eta_{ }^{\epsilon}$	$2x_{es}/z$	$\eta_{ }^{\epsilon}$	$2x_{es}/z$	$\eta_{ }^{\epsilon}$	$2x_{es}/z$
0.5	4.01(4)	4.	4.92(4)	4.921 691	3.54(5)	3.591 760
1.	3.997(5)	4.	4.06(7)	4.	4.01(2)	4.
2.0	4.01(2)	4.	3.13(6)	3.078 309	4.42(2)	4.408 240
3.0	4.03(5)	4.	2.686(5)	2.687 422	4.613(9)	4.620 449
4.0	4.02(4)	4.	2.47(4)	2.487 058	4.75(2)	4.753 704
5.0	4.04(6)	4.	2.34(5)	2.369 431	4.88(5)	4.846 596

Tableau 3.2.5 Exposants des fonctions de corrélation de surface énergie-énergie déduits des pentes des courbes log-log au point critique. Les colonnes $2x_{es}/z$ donnent les valeurs analytiques conjecturées.

On peut remarquer que pour la séquence symétrique “doublement de période”, $x_{ms} = \bar{x}_{ms}$, les exposants de décroissance des corrélations au point critique restent constants et conservent leurs valeurs non perturbées $\eta_{||}^{\sigma} = 1$ et $\eta_{||}^{\epsilon} = 4$.

Des résultats analogues ont été obtenus par Iglói et Lajkó sur le modèle d’Ising classique à deux dimensions (IGLÓI et LAJKÓ 1996).

Les fonctions d’échelle sur les figures 3.2.7 et 3.2.8 présentent manifestement des oscillations pour les séquences “doublement de période” et “pliage ternaire”. Ce

comportement est à nouveau relié à l'invariance d'échelle discrète. Ici, on s'attend à ce que la fonction de corrélation soit modulée par une amplitude A qui, en raison du comportement d'échelle anisotrope, est une fonction périodique de période 1 de la variable $\ln \tau / \ln m^z$. Les fonctions d'échelle, dans l'expression (3.2.14), peuvent alors s'écrire $f_{\sigma,\epsilon}(x) = A\left(\frac{\ln x}{z \ln m}\right) \tilde{f}_{\sigma,\epsilon}(x)$ et l'amplitude devient, lorsque $L = m^n$:

$$A\left[\frac{\ln(\tau L^{-z})}{z \ln m}\right] = A\left(\frac{\ln \tau}{z \ln m}\right) \quad (3.2.15)$$

ce qui donne l'origine des oscillations des courbes universelles.

2.5. Densité d'énergie interne de volume

On considère maintenant des chaînes de tailles finies de longueur L avec des conditions périodiques (abrégé "PBC"), c'est-à-dire avec $\phi_\alpha(L+1) = -\hat{Q}\phi_\alpha(1)$ et $\lambda_0\psi_\alpha(0) = -\hat{Q}\lambda_L\psi_\alpha(L)$ où l'opérateur parité $\hat{Q} = \prod_{k=1}^L \hat{\sigma}_k^z$ commute avec l'hamiltonien. On peut alors remplacer l'opérateur parité par une de ses valeurs propres, $Q = \pm 1$, ce qui permet de retenir dans chaque secteur les niveaux avec la parité appropriée (BAAKE, CHASELON et SCHLOTTMANN 1989).

Nous avons vérifié dans chacun des deux secteurs que les excitations à un fermion de plus basse énergie se comportent comme L^{-z} , comme dans le système avec conditions de bords libres. De plus, la densité d'énergie libre peut être analysée comme dans le paragraphe 2.3 et est cohérente avec le comportement d'échelle anisotrope. On peut remarquer qu'il subsiste une contribution inattendue en L^{-1} à la densité d'énergie libre qui n'apparaît pas dans les systèmes homogènes. Il semble que le fait de refermer la séquence apériodique sur elle-même revienne à introduire un défaut qui contribue à l'énergie libre par un terme indépendant de la taille :

$$F_{\text{PBC}} = E_0 = Lf_b + f_{\text{def}}$$

Nous allons discuter plus précisément le comportement d'échelle de la densité d'énergie interne de volume qui, pour le site l , est obtenue à partir de l'élément de matrice

$$c(l) = \langle \epsilon | \hat{\sigma}_l^z | 0 \rangle = |\psi_1(l)\phi_2(l) - \psi_2(l)\phi_1(l)| \quad (3.2.16)$$

où l'état fondamental $|0\rangle$ et l'état à deux fermions $|\epsilon\rangle = \hat{\eta}_1^+ \hat{\eta}_2^+ |0\rangle$ appartiennent tous deux au secteur pair. On s'attend alors au comportement suivant :

$$c_l(t, L^{-1}) = b^{-z} \epsilon_{l/b}(b^{1/\nu} t, bL^{-1}) \quad (3.2.17)$$

avec $b = m^n$ comme précédemment.

En accord avec (3.2.17), au point critique, le profil de la densité d'énergie renormalisée $L^z \epsilon_l$ est seulement fonction de l/L . Ce résultat est bien vérifié sur la figure 3.2.9 pour les trois séquences. En effet, on observe une courbe universelle tant que r n'est pas trop grand et il ne semble pas y avoir de modulation log-périodique dans ce cas.

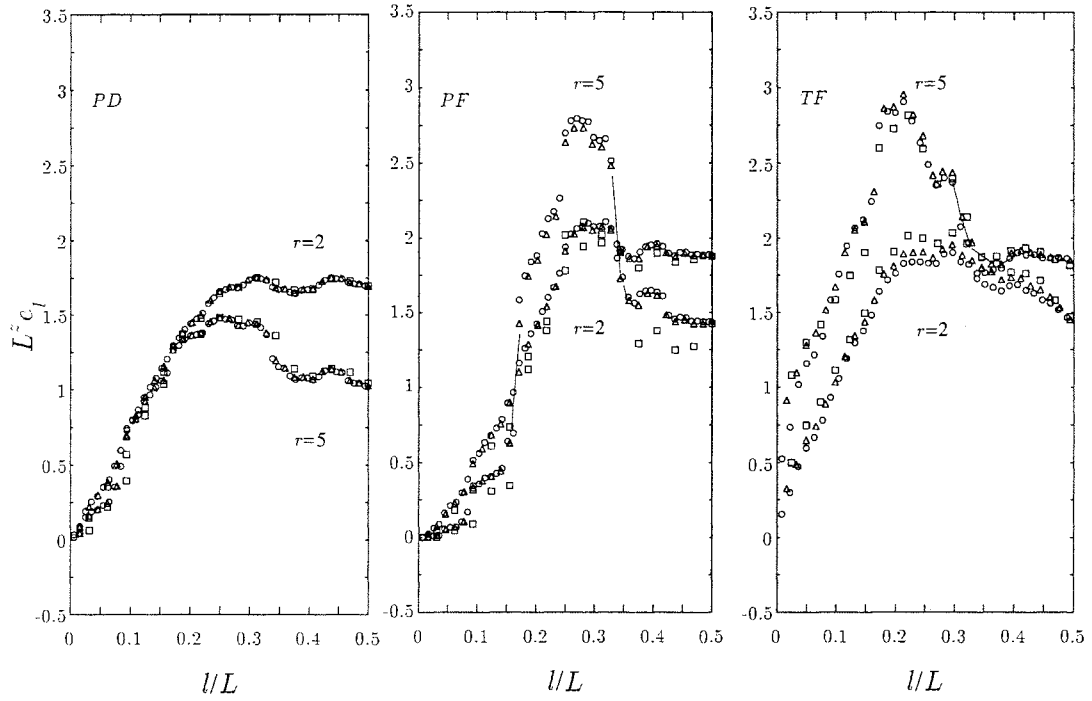


Figure 3.2.9 Amplitude de la densité d'énergie pour les trois séquences avec les rapports de couplages $r = 2$ et 5 et des chaînes de tailles $L = 2^6, 2^8, 2^{10}$ (PD), $L = 2^8, 2^9, 2^{10}$ (PF) et $L = 3^4, 3^5, 3^6$ (TF).

r	PD		PF		TF	
	x_e	z	x_e	z	x_e	z
0.5	1.03(4)	1.038 170	1.084 9(7)	1.084 963	1.048(5)	1.047 952
1.	0.999 99(2)	1.	0.999 98(3)	1.	1.000(1)	1.
1.5	1.02(2)	1.013 137	1.029 4(2)	1.029 447	1.016 5(6)	1.016 552
2.0	1.06(3)	1.038 170	1.084 95(3)	1.084 963	1.047 8(6)	1.047 952
2.5	1.09(4)	1.066 272	1.146 38(5)	1.146 391	1.083(1)	1.082 978
3.0	1.12(5)	1.094 649	1.207 51(7)	1.207 519	1.118(2)	1.118 109
3.5	1.15(5)	1.122 294	1.266 24(2)	1.266 247	1.152(1)	1.152 102
4.0	1.18(6)	1.148 844	1.321 92(2)	1.321 928	1.184(1)	1.184 535
4.5	1.20(6)	1.174 196	1.374 5(6)	1.374 469	1.215(1)	1.215 310
5.0	1.22(6)	1.198 356	1.454 0(9)	1.423 998	1.244(2)	1.244 464

Tableau 3.2.6 Exposants de l'énergie de volume pour les trois séquences marginales étudiées en fonction du rapport des couplages r . Pour chaque séquence, x_e est la valeur numérique déduite de l'extrapolation des séquences tandis que z donne la valeur analytique conjecturée.

On peut remarquer que l'expression (3.2.17) suppose que la densité d'énergie conserve la même dimension d'échelle z partout sur la chaîne aperiodique. Ce résultat est compatible avec la loi d'échelle pour ce système anisotrope $y_t + x_e = 1 + z$ avec $y_t = 1/\nu = 1$ comme on l'a déjà vu. L'exposant de l'énergie de volume déterminé par effets de taille finie sur le premier site est comparé au résultat analytique conjecturé pour les trois séquences dans le tableau 3.2.6.

2.6. Aimantation de volume

2.6.1. Critère de pertinence pour un défaut linéaire en volume dans un système anisotrope

Dans un système isotrope de dimension d , au voisinage du point fixe, l'hamiltonien s'écrit en fonction des champs d'échelle g_i et des opérateurs conjugués $\phi_i(\vec{r})$:

$$-\beta\mathcal{H} = -\beta\mathcal{H}^* + \sum_{\vec{r}} \sum_i g_i \phi_i(\vec{r}) \quad (3.2.18)$$

où le produit $g_i \phi_i(\vec{r})$ est homogène à une densité d'énergie. En utilisant la notation conventionnelle x_{ϕ_i} pour les dimensions des opérateurs locaux, on déduit celle des champs pertinents $y_{g_i} = d - x_{\phi_i}$. La présence d'un défaut Δ , de dimension spatiale d_Δ , consistant en une modification δg_k d'un champ d'échelle g_k , conduit à l'hamiltonien perturbé au point critique

$$-\beta\mathcal{H} = -\beta\mathcal{H}^* + \sum_{\vec{r} \in \Delta} \delta g_k \phi_k(\vec{r}). \quad (3.2.19)$$

Par renormalisation, la perturbation se transforme conformément à $\delta g'_k = b^{y_{g_k} \Delta} \delta g_k$, d'où l'on déduit (BURKHARDT 1984) :

$$y_{g_k \Delta} = d_\Delta - x_{\phi_k} = d_\Delta - d + y_{g_k}. \quad (3.2.20)$$

Le cas d'un défaut thermique linéaire dans le modèle d'Ising bidimensionnel se révèle ainsi marginal, puisque, avec $g_k = t$:

$$y_{t\Delta} = 1 - 2 + \frac{1}{\nu} = 0. \quad (3.2.21)$$

Il conduit à un exposant magnétique associé au défaut qui varie continûment avec l'amplitude du couplage modifié (BARIEV 1979, MC COY et PERK 1980, TURBAN 1985, GUIMARAES et DRUGOWICH DE FELICIO 1986).

Lorsqu'une perturbation thermique, unidimensionnelle, affecte un système anisotrope dans la direction d'anisotropie, comme c'est le cas pour les séquences aperiodiques marginales dans la chaîne d'Ising quantique, l'équation (3.2.20) devient

$$y_{t\Delta} = z - x_e, \quad (3.2.22)$$

avec cette fois $y_t + x_e = 1 + z$, soit $y_{t\Delta} = 0$, et la perturbation s'avère à nouveau marginale. L'application du critère de pertinence au site de surface montre en revanche que la perturbation y est non pertinente. En effet, on a dans ce cas

$$y_{ts} = z - x_{es} = -2x_{ms} \quad (3.2.23)$$

qui reste toujours négatif.

On peut dès lors s'attendre à un comportement critique local anormal pour l'aimantation sur les sites de volume. Pour les raisons déjà évoquées précédemment, l'exposant thermique de volume x_e n'est pas susceptible de variation et conserve en tout point une valeur constante égale à z .

2.6.2. Aimantation locale au point critique pour les sites de volume

On peut tout d'abord étudier l'aimantation au point critique sur des sites correspondant à des fractions l/L remarquables. L'aimantation locale $m(l)$ est définie par le déterminant (1.3.54) et l'exposant x_m déduit par effets de taille finie pour les trois séquences. Au point critique, avec $L = m^n$, on s'attend au comportement suivant :

$$m_l(L) = b^{-x_m} m_{l/b}(L/b) \quad (3.2.24)$$

de sorte qu'en conservant le rapport l/L constant, x_m intervient dans la dépendance en taille $m_l(L) \sim L^{-x_m}$. Les résultats sont représentés sur la figure 3.2.10.

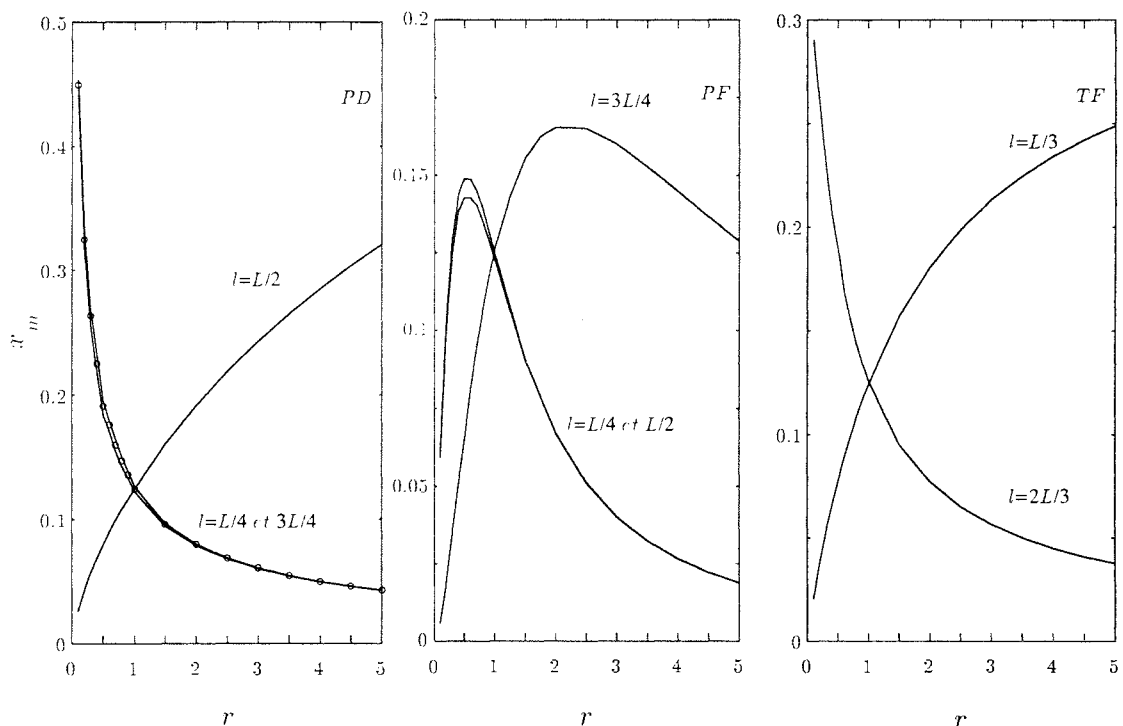


Figure 3.2.10 Exposant magnétique de volume obtenu par effets de taille finie en fonction du rapport des interactions pour différentes valeurs du rapport l/L . Les valeurs (O) pour la séquence “doublement de période” sont obtenues lorsque le couplage non perturbé en $l = L/2$ est remplacé par un couplage perturbé.

L'exposant x_m varie de façon continue avec r en raison de l'apériodicité marginale ; il dépend aussi du rapport l/L choisi, ce qui signifie que la loi d'échelle (3.2.24) n'est valable que localement avec la valeur locale de x_m .

Par exemple, avec la séquence “doublement de période”, des exposants différents sont obtenus pour $l = L/2$ d'une part et $l = L/4$ ou $3L/4$ d'autre part. Cela peut se comprendre en étudiant la séquence au voisinage de ces sites pour des chaînes de tailles suffisamment grandes de la forme L^{2^n} . Dans le premier cas, on trouve la succession suivante, 1 0 1 1 1 0 1 0 1 0 1 1 1 0 1 0, alors que, dans l'autre cas, l'environnement est le même mais 0 est remplacé par 1. Cette substitution est suffisante pour changer le comportement critique local. Si on substitue au couplage λ non perturbé en $L/2$ le couplage perturbé λr , l'exposant local devient le même que pour les sites $L/4$ et $3L/4$. Le même type de comportement est obtenu avec les deux autres séquences.

On peut généraliser cette approche en considérant une chaîne apériodique dans laquelle la liaison centrale est notée λs , ce qui permet d'interpoler entre les deux situations précédentes avec $s = 1$ ou $s = r$. En notant $x_m(s)$ l'exposant obtenu par effets de taille finie, on obtient la figure 3.2.11 assez semblable à la variation de l'exposant magnétique associé au défaut linéaire en volume d'amplitude λs dans le modèle homogène (TURBAN 1985)

$$x_m = \frac{2}{\pi^2} \left[\arctan \left(\frac{1}{s} \right) \right]^2 \quad (3.2.25)$$

en introduisant le couplage moyen

$$x_m(s) = \frac{2}{\pi^2} \left[\arctan \left(\frac{\bar{\lambda}}{\lambda s} \right) \right]^2 \quad (3.2.26)$$

où $\bar{\lambda} = \lambda(r\rho_\infty + (1 - \rho_\infty))$.

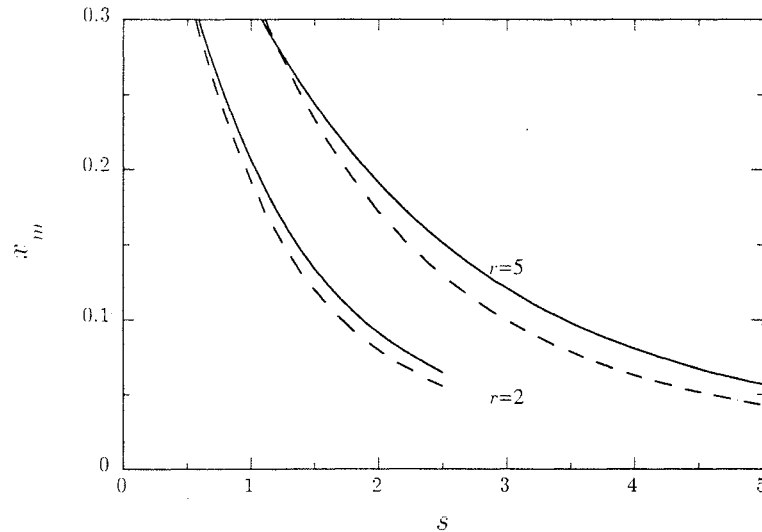


Figure 3.2.11 Comparaison entre les variations de l'exposant x_m sur le site central de la chaîne pour la séquence marginale “doublement de période” en fonction de l'amplitude de la perturbation locale s pour $r = 2$ et 5 (— — —) et les valeurs obtenues à partir de l'équation (3.2.26) (—).

Les cas particuliers $s = 1$ et $s = r$ permettent de représenter le profil de l'aimantation renormalisée au point critique en traçant $m(l)L^{x_m(f_l)}$ en fonction de l/L pour des chaînes de tailles L différentes. A un site $f_l = 0$, on associe l'exposant local $x_m(0)$ déterminé précédemment par effets de taille finie (en $l = L/2$ pour la séquence "doublement de période") et à un site $f_l = 1$, on associe l'exposant $x_m(1)$ (déterminé en $L/4$ pour la séquence "doublement de période").

Sur la figure 3.2.12, on a représenté $m(l)L^{x_m(f_l)}$ en fonction de l/L pour la séquence "doublement de période" avec $L = 2^6, 2^8$ et 2^{10} et $r = 2$ et 5.

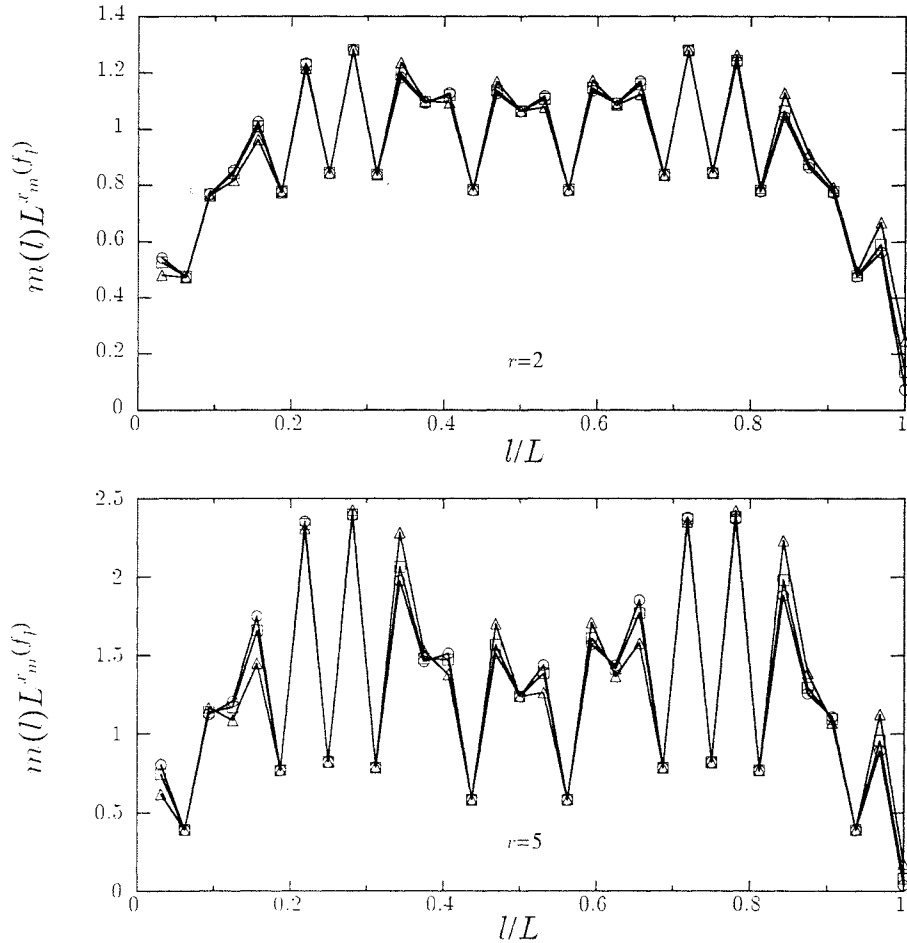


Figure 3.2.12 Profil de l'aimantation locale renormalisée pour la séquence "doublement de période" avec $L = 2^6$ ($\triangle$), 2^8 ($\square$) et 2^{10} ($\circ$) et $r = 2$ et 5.

On n'a considéré ici que les sites pairs de la chaîne (les sites impairs étant tous caractérisés par $f_l = 1$) et des rapports l/L constants pour les trois tailles. On constate que la renormalisation de l'aimantation locale est très satisfaisante.

La figure 3.2.13 présente le profil de l'aimantation renormalisée pour la séquence "pliage de papier" avec $L = 2^8, 2^9, 2^{10}$ et $r = 2$ et 5. A nouveau, on n'a considéré que les sites pairs de la chaîne.

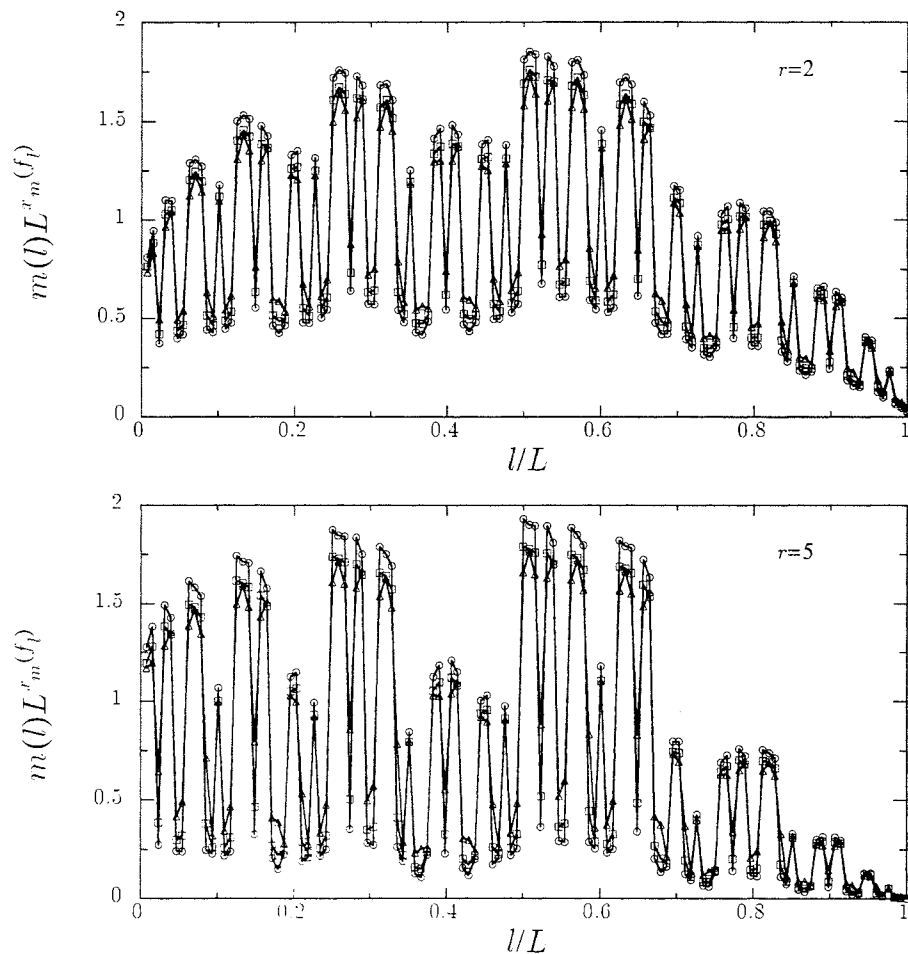


Figure 3.2.13 Profil de l'aimantation locale renormalisée pour la séquence "pliage de papier" avec $L = 2^8$ ($\triangle$), 2^9 ($\square$) et 2^{10} ($\circ$) et $r = 2$ et 5 .

2.6.3. Comportement en température de l'aimantation locale de volume

L'analyse précédente caractérise seulement le fait que les lignes de défauts en volume constituent autant de perturbations marginales, conformément à la discussion du §2.6.1, mais n'impliquent pas l'existence de deux exposants critiques de volume pour l'aimantation. En effet, lorsque la température varie, à mesure que l'on s'approche du point critique, la longueur de corrélation augmente et explore, au voisinage d'un site, un environnement de plus en plus complexe. Il est donc indispensable d'étudier le comportement en température de l'aimantation de volume. On calcule pour cela, sur des sites particuliers l , l'aimantation $m(l)$ pour une chaîne de taille L maximale tout en faisant varier les interactions λ . Les courbes correspondantes sont présentées sur la figure 3.2.14 sur une échelle log-log dans le cas de la séquence "doublement de période" avec $L = 1024$ et $r = 5$.

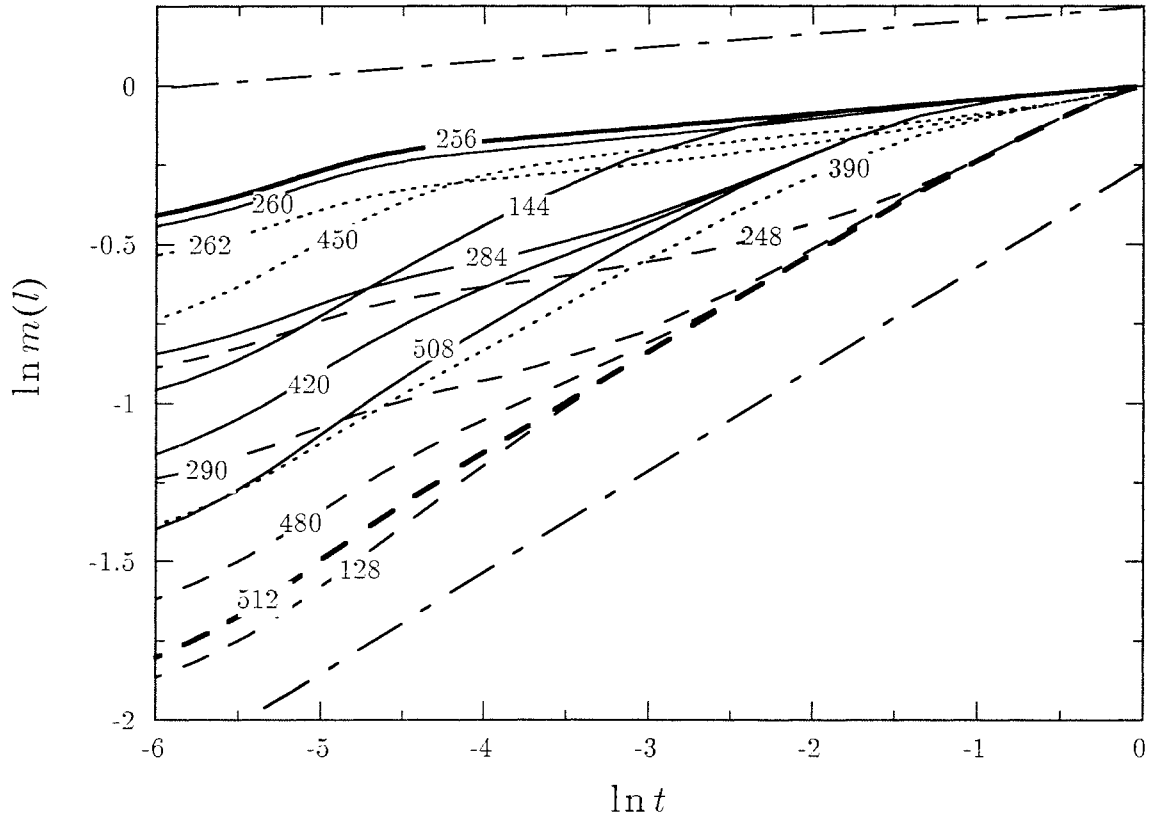


Figure 3.2.14 Courbe en log-log de l'aimantation locale $m(l)$ en fonction de la température réduite t sur des sites particuliers pour la séquence "doublement de période" avec $r = 5$ et $L = 2^{10}$. Les courbes en traits épais correspondent aux sites de "référence" $L/4 = 256$ et $L/2 = 512$. On a utilisé les conventions (—) pour les sites caractérisés par $f_l = 1$, (— · —) pour $f_l = 0$ et (---) correspond aussi à $f_l = 0$, mais avec un environnement très différent. On a représenté également les pentes correspondant aux exposants $x_m(0)$ et $x_m(1)$ (— · —) qui décrivent convenablement les sites de référence 256 et 512.

Il apparaît clairement des séries de comportements analogues qui dépendent à la fois de la valeur de f_l au site considéré et de son environnement. Bien entendu, plus l'environnement est identique à grande distance pour deux sites donnés (par exemple les sites 128 et 512), plus les valeurs correspondantes de l'aimantation locale sont proches. On a représenté, dans le tableau 3.2.7, les environnements des sites étudiés par rapport aux sites choisis comme référence $L/4$ ($= 256$) et $L/2$ ($= 512$).

Ce comportement critique très inhomogène de l'aimantation de volume interdit de définir simplement des exposants critiques pour les différents types de sites. En effet, pour un site donné, les pentes des courbes log-log sur la courbe 3.2.14 dépendent largement du domaine de température considéré. Cela suggère une statistique multifracale, comme c'est le cas pour les états électroniques sur des structures analogues (HIRAMOTO et KOHMOTO 1992).

site	environnement
284	<u>0</u> 0 1 0 <u>0</u>
420	<u>0</u> 0 1 0 <u>0</u>
508	<u>0</u> 0 1 0 <u>0</u>
252	<u>0</u> 0 1 0 1 0 <u>1</u>
260	<u>1</u> 0 1 0 1 0 <u>0</u>
144	<u>0</u> 0 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 <u>0</u>
400	<u>0</u> 0 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 <u>0</u>
256	1 0 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 1
250	<u>0</u> 0 0 <u>1</u>
290	<u>0</u> 0 0 <u>1</u>
248	<u>1</u> 0 1 0 0 0 1 0 <u>1</u>
480	1 0 1 0 0 0 1 0 <u>1</u> 0 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1
128	1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1
512	1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1
254	<u>1</u> 0 <u>1</u>
258	<u>1</u> 0 <u>1</u>
450	<u>1</u> 0 <u>1</u>
262	<u>1</u> 0 0 <u>0</u>
390	<u>1</u> 0 0 <u>0</u>

Tableau 3.2.7 Environnements des sites étudiés. Dans chaque cas, on n'a représenté que les sites pairs, les sites impairs étant tous caractérisés par $f_l = 1$. Les sites de référence sont les sites 256 pour $f_l = 1$ et 512 pour $f_l = 0$. Pour les autres sites, on a souligné les différences.

3. Systèmes multicouches. “Cross-over” entre point fixe homogène et point fixe apériodique

3.1. Présentation du problème

Nous nous intéressons maintenant au problème des multicouches apériodiques. La séquence apériodique $f_k = 1, 0, 1, 1, \dots$ se réfère cette fois à une succession de couches d'épaisseurs $p, q, p, p, \dots$ dans lesquelles les interactions d'échange sont constantes et égales à λr^{f_k} . On se limite ici au problème de liaison.

Les rangées de couplages sont notées l . Les couches, comportant p ou q rangées atomiques, sont notées k . Schématiquement, le problème peut donc être représenté sous la forme suivante :

	$\overbrace{\lambda r \quad \lambda r \quad \dots \lambda r}^{p \text{ termes}}$	$\overbrace{\lambda \quad \lambda \quad \dots \lambda}^{q \text{ termes}}$	$\overbrace{\lambda r \quad \lambda r \quad \dots \lambda r}^{p \text{ termes}}$	$\overbrace{\lambda r \quad \lambda r \quad \dots \lambda r}^{p \text{ termes}}$	...
k	1	2	3	4	...
f_k	1	0	1	1	...
l	1 2 ... p	$p+1 \dots p+q$	$p+q+1 \dots 2p+q$	$2p+q+1 \dots 3p+q$	...

Le problème des multicouches apériodiques ne présente pas de difficulté supplémentaire en ce qui concerne l'aimantation de surface, mais il peut donner

lieu à un phénomène intéressant de changement de comportement critique (“cross-over”). En effet, si au point critique, ou dans son voisinage immédiat, la longueur de corrélation est de l’ordre de la taille du système et les propriétés critiques sont gouvernées par le point fixe apériodique, ce n’est pas le cas lorsque l’on s’éloigne de ce point fixe. A mesure que la longueur de corrélation diminue pour devenir de l’ordre de grandeur de l’épaisseur de la couche de surface, la structure apériodique de la multicouche devient sans effet sur l’aimantation de surface, qui se comporte alors essentiellement de la même manière que sur un système semi-infini homogène. Partant de la phase basse température, $\lambda > \lambda_c$, on s’attend donc, à mesure que $\lambda \rightarrow \lambda_c^+$, à un changement de comportement critique. Le premier comportement, correspondant au point fixe homogène du système semi-infini (lorsque la longueur de corrélation n’explore pas la structure apériodique du système), est caractérisé par l’exposant critique de l’aimantation de surface $\beta_s = 1/2$. Le second correspond au point fixe du système apériodique caractérisé par un exposant β_s variable, dépendant de r et de p si l’on considère des perturbations marginales.

3.2. Aimantation de surface

On détermine tout d’abord le couplage critique de la multicouche apériodique. On définit pour cela l’épaisseur de la $k^{\text{ième}}$ couche :

$$m_k = (p - q)f_k + q = \begin{cases} p & \text{si } f_k = 1 \\ q & \text{si } f_k = 0 \end{cases} \quad (3.3.1)$$

avec le couplage λr^{f_k} . Sur une multicouche de L couches, il y a :

$$\begin{aligned} n_L &= \sum_{k=1}^L f_k \text{ couches d'épaisseur } p \text{ et de couplage } \lambda r \\ L - n_L &\text{ couches d'épaisseur } q \text{ et de couplage } \lambda. \end{aligned}$$

Le couplage critique est toujours déterminé par :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \prod_{l=1}^L (\lambda_l)_c^{1/L} = 1 \quad (3.3.2)$$

avec :

$$\prod_{l=1}^L (\lambda_l)_c^{1/L} = (\lambda_c r)^{p n_L / L} (\lambda_c)^{q(L - n_L) / L} \quad (3.3.3)$$

d’où, en prenant la limite $L \rightarrow \infty$:

$$\lambda_c = r^{-\frac{p\rho_\infty}{(p-q)\rho_\infty + q}}. \quad (3.3.4)$$

L’aimantation de surface s’écrit :

$$m_s = S^{-1/2}, \quad S = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{l=1}^j \lambda_l^{-2}. \quad (3.3.5)$$

Dans le cas des multicouches, on a donc :

$$\begin{aligned}
 S = 1 + \sum_{l=1}^{m_1} (\lambda r^{f_1})^{-2l} + (\lambda r^{f_1})^{-2m_1} \sum_{l=1}^{m_2} (\lambda r^{f_2})^{-2l} \\
 + (\lambda r^{f_1})^{-2m_1} (\lambda r^{f_2})^{-2m_2} \sum_{l=1}^{m_3} (\lambda r^{f_3})^{-2l} + \dots
 \end{aligned} \tag{3.3.6}$$

On pose :

$$\sigma_k = \sum_{l=1}^{m_k} (\lambda r^{f_k})^{-2l} = \begin{cases} \frac{1-(\lambda r)^{-2p}}{(\lambda r)^2-1} = a_p & \text{si } f_k = 1 \\ \frac{1-\lambda^{-2q}}{\lambda^2-1} = b_q & \text{si } f_k = 0 \end{cases} \tag{3.3.7}$$

donc $\sigma_k = b_q + (a_p - b_q)f_k$.

La somme S peut alors s'écrire :

$$S = 1 + b_q \Sigma_1 + (a_p - b_q) \Sigma_2 \tag{3.3.8}$$

où les sommes Σ_1 et Σ_2 sont définies par :

$$\begin{aligned}
 \Sigma_1 &= \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{k=1}^j g_k, \\
 \Sigma_2 &= \sum_{j=1}^{\infty} f_{j+1} \prod_{k=1}^j g_k, \\
 g_k &= (\lambda r^{f_k})^{-2m_k} = \lambda^{-2q} (\lambda^{p-q} r^p)^{-2f_k}
 \end{aligned} \tag{3.3.9}$$

donc $\prod_{k=1}^j g_k = (\lambda^q)^{-2j} (\lambda^{p-q} r^p)^{-2n_j}$.

On peut écrire, dans Σ_2 , f_{j+1} sous la forme :

$$f_{j+1} = \frac{(\lambda^{p-q} r^p)^{-2f_{j+1}} - 1}{(\lambda^{p-q} r^p)^{-2} - 1} \tag{3.3.10}$$

et on obtient finalement :

$$S = 1 - \frac{\lambda^{2q}(a_p - b_q)}{(\lambda^{p-q} r^p)^{-2} - 1} + \left[b_q + \frac{(\lambda^{2q} - 1)(a_p - b_q)}{(\lambda^{p-q} r^p)^{-2} - 1} \right] \Sigma_1 \tag{3.3.11}$$

dont le comportement asymptotique sera gouverné par Σ_1 .

Nous déterminerons l'aimantation de surface des multicouches apériodiques "doublement de période" et "pliage de papier" et nous mettrons en évidence le changement de comportement critique lorsque la longueur de corrélation varie.

3.3. Longueur de corrélation

La discussion sur le “cross-over” repose sur l’idée que le système exhibe le comportement critique caractéristique de la séquence aperiodique lorsque la longueur de corrélation $\xi_{\perp}$, dans la direction spatiale, est suffisamment grande pour explorer la structure du système jusqu’à une échelle très supérieure à l’épaisseur p d’une couche.

La correspondance entre système classique bidimensionnel et chaîne quantique montre par ailleurs que la longueur de corrélation $\xi_{\parallel}$ dans la direction temporelle est donnée par le plus petit gap non nul dans le spectre de l’hamiltonien (voir tableau 1.3.1). Dans la phase de basse température $\lambda > \lambda_c$, la plus petite excitation ε_1 tend exponentiellement vers zéro en raison de la dégénérescence asymptotique de l’état fondamental ferromagnétique dans la limite thermodynamique, de sorte que la longueur de corrélation $\xi_{\parallel}$ est donnée par la seconde excitation

$$\xi_{\parallel} = \frac{1}{\varepsilon_2}. \quad (3.3.12)$$

Nous avons également mis en évidence, au cours de ce chapitre, le comportement critique anisotrope induit par une perturbation aperiodique marginale et il semble intéressant d’examiner de ce point de vue le cas des multicouches. La longueur de corrélation $\xi_{\parallel}$ est tout à fait adaptée à ce projet, puisqu’il suffit d’analyser son comportement avec la température, ou avec la taille lorsque $\lambda = \lambda_c$, pour accéder à l’exposant d’anisotropie z .

Pour calculer la seconde excitation, on revient à l’équation aux valeurs propres pour les excitations :

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})\Phi_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha}^2 \Phi_{\alpha}. \quad (3.3.13)$$

En conditions de bords libres, la matrice des excitations ayant une structure tridiagonale, l’équation (3.3.13) conduit à des relations de récurrence pour les composantes des vecteurs propres que l’on peut mettre sous la forme matricielle suivante (SCHMIDT 1957) :

$$\begin{pmatrix} \phi_{\alpha}(l) \\ \phi_{\alpha}(l+1) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_l \begin{pmatrix} \phi_{\alpha}(l-1) \\ \phi_{\alpha}(l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ s_l & t_l(\varepsilon_{\alpha}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\alpha}(l-1) \\ \phi_{\alpha}(l) \end{pmatrix} \quad (3.3.14)$$

avec :

$$s_l = -\frac{\lambda_{l-1}}{\lambda_l}, \quad t_l(\varepsilon_{\alpha}) = \frac{\varepsilon_{\alpha}^2 - 1 - \lambda_{l-1}^2}{\lambda_l}, \quad 2 \leq l \leq L-1$$

et pour les termes de bords :

$$\begin{pmatrix} \phi_{\alpha}(1) \\ \phi_{\alpha}(2) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} \phi_{\alpha}(0) \\ \phi_{\alpha}(1) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \phi_{\alpha}(L) \\ \lambda_L \phi_{\alpha}(L+1) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_L \begin{pmatrix} \phi_{\alpha}(L-1) \\ \phi_{\alpha}(L) \end{pmatrix} \quad (3.3.15)$$

avec :

$$s_1 = 0, \quad t_1(\varepsilon_\alpha) = \frac{\varepsilon_\alpha^2 - 1}{\lambda_1}, \quad s_L = -\lambda_{L-1}, \quad t_L(\varepsilon_\alpha) = \varepsilon_\alpha^2 - 1 - \lambda_{L-1}^2.$$

Avec les conditions aux limites

$$\begin{aligned} \phi_\alpha(0) &= 0 \\ \lambda_L \phi_\alpha(L+1) &= 0 \end{aligned}$$

on peut finalement écrire :

$$\begin{pmatrix} \phi_\alpha(L) \\ f(\varepsilon) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_L \dots \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{M}_L \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.3.16)$$

où l'on n'impose pas la normation des vecteurs propres ϕ_α et où les excitations ε_α sont données par les zéros positifs de $f(\varepsilon)$.

Dans le cas de structures a périodiques en multicouches, au sein d'une même couche de p rangées, la même matrice apparaît $p-1$ fois de sorte que, dans le cas particulier $p=q$ auquel on se limitera, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_L &= \mathbf{T}_L (\mathbf{P}_{f_L})^{p-2} \mathbf{Q}_{f_L, f_{L-1}} (\mathbf{P}_{f_{L-1}})^{p-1} \dots \\ &\dots \mathbf{Q}_{f_3, f_2} (\mathbf{P}_{f_2})^{p-1} \mathbf{Q}_{f_2, f_1} (\mathbf{P}_{f_1})^{p-1} \mathbf{T}_1 \end{aligned} \quad (3.3.17)$$

où $\mathbf{P}_{f_k}$ est une matrice "propagation" dans la couche k et $\mathbf{Q}_{f_{k+1}, f_k}$ une matrice de transfert de la couche k à la couche $k+1$. On peut aisément donner une forme compacte aux termes de propagation. En effet, la matrice :

$$\mathbf{P}_{f_k} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & t_k(\varepsilon) \end{pmatrix}$$

admet pour valeurs propres :

$$\begin{aligned} \alpha_\pm(k) &= -e^{\mp \zeta}, \quad \cosh \zeta = -\frac{1}{2} t_k(\varepsilon) \quad \text{si } t_k(\varepsilon) < -2 \\ \alpha_\pm(k) &= e^{\pm i \zeta}, \quad \cos \zeta = \frac{1}{2} t_k(\varepsilon) \quad \text{si } -2 \leq t_k(\varepsilon) \leq 2 \\ \alpha_\pm(k) &= e^{\pm \zeta}, \quad \cosh \zeta = \frac{1}{2} t_k(\varepsilon) \quad \text{si } t_k(\varepsilon) > 2 \end{aligned}$$

d'où l'on déduit la matrice de changement de base permettant d'écrire $\mathbf{P}_{f_k}$ dans la base de ses vecteurs propres :

$$\mathbf{S}_{f_k} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \alpha_+(k) & \alpha_-(k) \end{pmatrix} \quad (3.3.18)$$

ce qui conduit à l'expression de $(\mathbf{P}_{f_k})^{p-1}$ dans la base initiale :

$$(\mathbf{P}_{f_k})^{p-1} = \mathbf{S}_{f_k} \begin{pmatrix} \alpha_+^{p-1} & 0 \\ 0 & \alpha_-^{p-1} \end{pmatrix} \mathbf{S}_{f_k}^{-1} \quad (3.3.19)$$

soit :

$$(\mathbf{P}_{f_k})^{p-1} = \begin{pmatrix} -\frac{\sin(p-2)\zeta}{\sin \zeta} & \frac{\sin(p-1)\zeta}{\sin \zeta} \\ -\frac{\sin(p-1)\zeta}{\sin \zeta} & \frac{\sin p\zeta}{\sin \zeta} \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad -2 \leq t_k(\varepsilon) \leq 2$$

$$(\mathbf{P}_{f_k})^{p-1} = \begin{pmatrix} -\frac{\sinh(p-2)\zeta}{\sinh \zeta} & \frac{\sinh(p-1)\zeta}{\sinh \zeta} \\ -\frac{\sinh(p-1)\zeta}{\sinh \zeta} & \frac{\sinh p\zeta}{\sinh \zeta} \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad |t_k(\varepsilon)| > 2.$$

On peut alors calculer $\mathbf{M}_L$ pour toute valeur de p et, dans le cas où p est grand, cette méthode est avantageuse par rapport à la diagonalisation directe de la matrice des excitations. Elle n'est cependant pas exempte d'inconvénients sur le plan numérique, car la fonction $f(\varepsilon)$ présente des oscillations de très grande amplitude et dont la période diminue rapidement avec L et p .

3.4. Séquence “doublement de période”

3.4.1. Aimantation de surface

D'après (3.3.4), le couplage critique de la multicouche apériodique “doublement de période” s'écrit :

$$\lambda_c = r^{-\frac{2p/3}{2(p-q)/3+q}} = r^{-\frac{2p}{2p+q}} \quad (3.3.20)$$

puisque $\rho_\infty = 2/3$. On note S_0 la série apériodique du problème de liaison habituel :

$$S_0(\lambda, r) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^{-2j} r^{-2n_j} \quad (3.3.21)$$

ainsi, la somme Σ_1 qui détermine le comportement critique s'écrit :

$$\Sigma_1(\lambda, r) = S_0(\lambda^q, \lambda^{p-q} r^p). \quad (3.3.22)$$

On procède de la même façon que pour le problème de liaison pour déterminer l'exposant critique β_s :

$$\Sigma_1(\lambda_c, r) = S_0(\lambda_c, \lambda_c^{p-q} \lambda_c^{-\frac{2p+q}{2}}) = S_0(\lambda_c, (\lambda_c^q)^{-3/2}) \quad (3.3.23)$$

puisque $r = \lambda_c^{-\frac{2p+q}{2p}}$. On obtient donc :

$$\beta_s^{\text{multi}}(\lambda_c) = \beta_s^{\text{liaison}}(\lambda_c^q) = \frac{\ln(1 + \lambda_c^q)(1 + \lambda_c^{-q})}{4 \ln 2}, \quad (3.3.24)$$

$$\beta_s^{\text{multi}}(r, p, q) = \frac{\ln(r^{\frac{pq}{2p+q}} + r^{-\frac{pq}{2p+q}})}{2 \ln 2}. \quad (3.3.25)$$

La variation de β_s^{multi} en fonction de r est représentée sur la figure 3.3.1 pour plusieurs valeurs de p et de q .

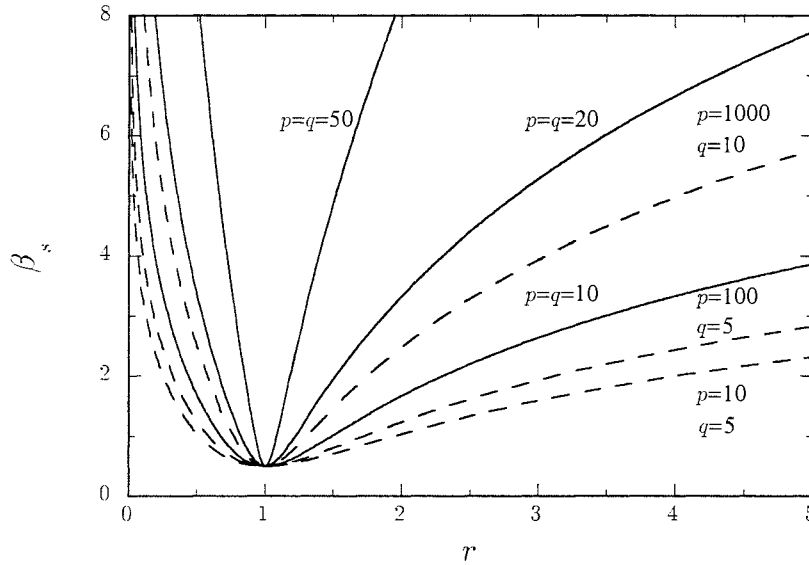


Figure 3.3.1 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s^{multi} en fonction de r pour la multicouche apériodique "doublement de période". Les courbes en trait continu correspondent au cas où $p = q$ et les courbes en pointillés au cas où $p \neq q$.

Le changement de comportement critique, lorsque $\lambda \rightarrow \lambda_c^+$, est illustré sur la figure 3.3.2 sur laquelle nous avons représenté $\ln m_s$ en fonction de $\ln(1 - (\lambda_c/\lambda)^2)$ pour plusieurs valeurs de $p = q$ et avec $r = 1.1$.

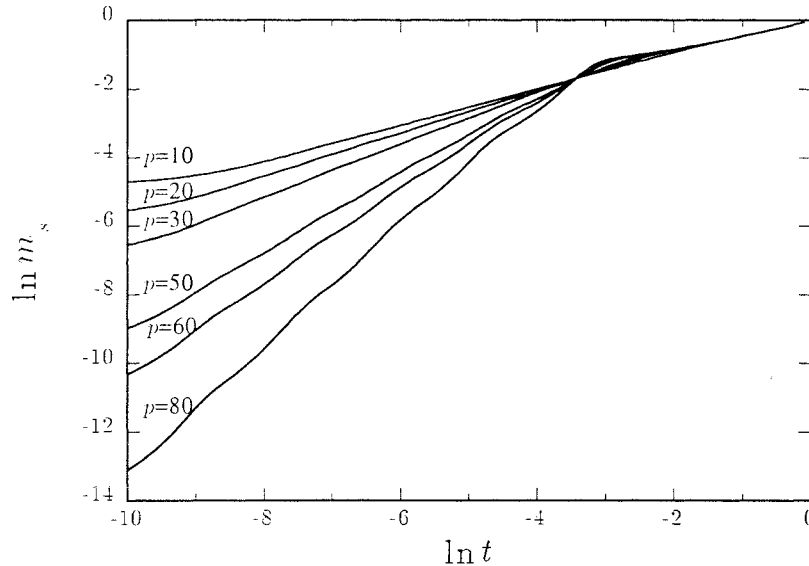


Figure 3.3.2 Illustration du "cross-over" entre le point fixe homogène ($\beta_s = 1/2$) et le point fixe apériodique pour la séquence "doublement de période" avec $r = 1.1$ et $p = q = 10$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 0.536$), $p = 20$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 0.637$), $p = 30$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 0.787$), $p = 50$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 1.175$), $p = 60$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 1.391$) et $p = 80$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 1.838$).

Lorsque $\lambda \gg \lambda_c$, c'est-à-dire lorsque $\xi \ll p$, on obtient une partie linéaire de pente $\frac{1}{2}$ caractéristique du point fixe homogène du système semi-infini. En revanche, lorsque $\lambda \rightarrow \lambda_c^+$, le comportement critique est gouverné par le point fixe aperiodique et l'on obtient des droites de pentes d'autant plus grandes que p est grand puisque, pour une valeur de r constante, β_s^{multi} augmente avec p et q .

Par la suite, on choisit une valeur constante $\beta_s^{\text{multi}} = C^{\text{ste}}$ pour l'exposant de l'aimantation de surface du système aperiodique afin de donner plus de clarté aux figures. Ce choix impose donc la détermination des valeurs de r lorsque l'on fait varier l'épaisseur des couches p et q . On se place d'ailleurs, pour simplifier, dans le cas $p = q$. Ainsi, on représente à nouveau sur la figure 3.3.3. $\ln m_s$ en fonction de $\ln(1 - (\lambda_c/\lambda)^2)$ pour plusieurs valeurs de $p = q$, mais avec, cette fois, $\beta_s^{\text{multi}} = 2$.

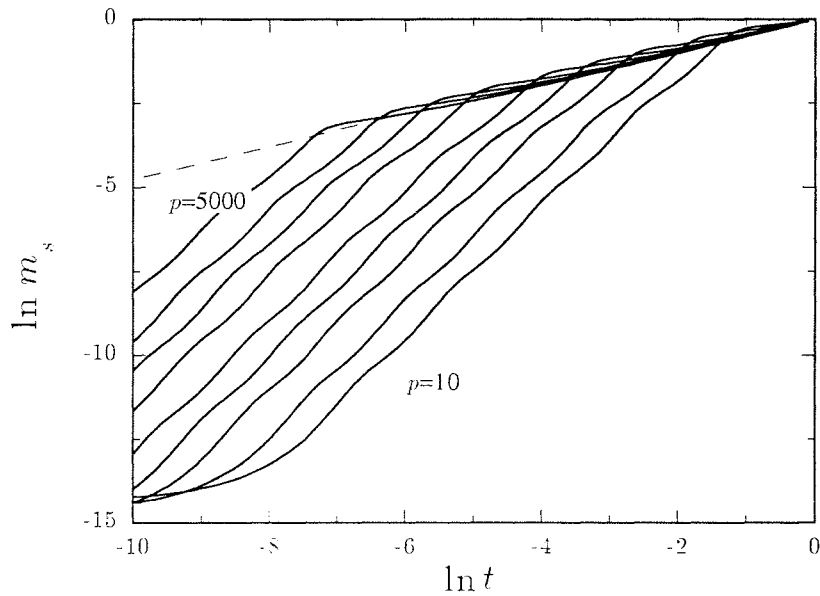


Figure 3.3.3 Illustration du “cross-over” entre le point fixe homogène ($\beta_s = 1/2$, droite asymptotique — — —) et le point fixe aperiodique (ici, $\beta_s^{\text{multi}} = 2$) pour la séquence “doublement de période” avec $p = q = 10$ ($r = 2.295$), $p = 20$ ($r = 1.515$), $p = 50$ ($r = 1.181$), $p = 100$ ($r = 1.087$), $p = 200$ ($r = 1.042$), $p = 500$ ($r = 1.017$), $p = 1000$ ($r = 1.008$), $p = 2000$ ($r = 1.004$) et $p = 5000$ ($r = 1.002$).

On constate que, lorsque le nombre de couches p augmente, le domaine de température pour lequel le comportement du système est gouverné par le point fixe aperiodique est de plus en plus resserré autour de la température critique. Ainsi, lorsque λ augmente, on conserve de plus en plus longtemps le comportement gouverné par le point fixe homogène.

Il apparaît donc que l'aimantation de surface du système multicouches peut s'écrire sous la forme universelle :

$$m_s(t, p) = t^{1/2} f\left(\frac{p}{\xi}\right) \quad (3.3.26)$$

où $f(p/\xi)$ est une fonction d'échelle.

On a représenté sur la figure 3.3.4 $\ln(m_s t^{-1/2})$ en fonction de $\ln(p/\xi)$ avec $\beta_s^{\text{multi}} = 2$ et 1 et des valeurs de r supérieures et inférieures à 1.

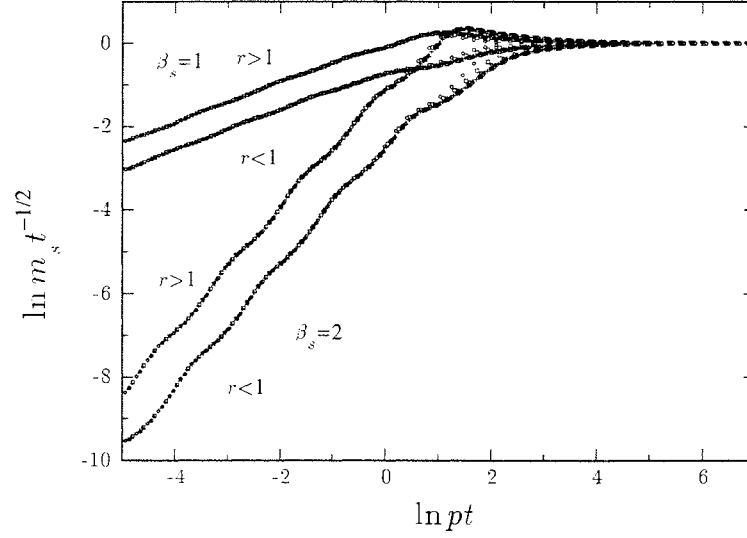


Figure 3.3.4 Courbes universelles pour la séquence “doublement de période” avec $\beta_s^{\text{multi}} = 2$ et 1 et $p = q = 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000$.

On obtient une courbe unique (à β_s fixé) pour l'ensemble des valeurs de p lorsque $r < 1$ et une autre lorsque $r > 1$ avec, à nouveau, deux régimes correspondant à deux comportements critiques différents. Cela se comprend en notant que la fonction d'échelle $f(x)$ doit présenter les comportements asymptotiques suivants :

$$\begin{aligned} f(x) &\sim x^\theta, & x \rightarrow 0 \\ f(x) &\sim C^{\text{ste}}, & x \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (3.3.27)$$

Lorsque l'on se place au voisinage du point critique, $t \rightarrow 0$, l'aimantation de surface doit se comporter selon :

$$m_s(t) \sim t^{\beta_s^{\text{multi}}(r)}. \quad (3.3.28)$$

On a alors :

$$t^{1/2} t^{\nu\theta} \sim t^{\beta_s^{\text{multi}}(r)}, \quad (3.3.29)$$

soit :

$$\theta = \frac{\beta_s^{\text{multi}}(r) - 1/2}{\nu} \quad (3.3.30)$$

et $m_s t^{-1/2}$ sera une fonction universelle de la variable (p/ξ) présentant deux régions distinctes. Le premier domaine, de pente nulle sur la courbe log-log, correspond

au comportement critique du système homogène semi-infini, lorsque $p \gg \xi$. Le second, de pente $\theta = \beta_s(r) - \frac{1}{2} = 1.5$ ou 0.5 , correspond au comportement critique apériodique, lorsque $\xi \gg p$.

On remarque également sur la courbe 3.3.4 que des modulations périodiques se superposent au comportement linéaire dans le régime critique. La fonction d'échelle exhibe donc à nouveau des oscillations log-périodiques. L'amplitude oscillante, notée A , est habituellement une fonction périodique de $\frac{\ln \xi}{\ln m}$. Dans le problème de multicouches, la longueur de corrélation étant mesurée en unités p , on peut écrire, au voisinage du point critique, la fonction d'échelle (3.3.26) sous la forme

$$f\left(\frac{p}{\xi}\right) \sim A\left(\frac{\ln \xi/p}{\ln m}\right) \left(\frac{p}{\xi}\right)^\theta \quad (3.3.31)$$

conforme à l'allure de la courbe 3.3.4, puisque

$$\ln f \sim \ln A\left(\frac{\ln \xi/p}{\ln m}\right) + \theta \ln \frac{p}{\xi}.$$

3.4.2. Longueur de corrélation

En ce qui concerne la mise en évidence d'un comportement d'échelle anisotrope, on peut déduire de l'expression (3.3.25) de l'exposant de l'aimantation de surface la conjecture suivante pour l'exposant d'anisotropie :

$$z(r, p, q) = 2\beta_s^{\text{multi}}(r, p, q) = \frac{\ln(r^{\frac{pq}{2p+q}} + r^{-\frac{pq}{2p+q}})}{\ln 2}. \quad (3.3.32)$$

Afin de le vérifier pour la séquence "doublement de période", on rappelle que les excitations ε_α sont données par les zéros de $f(\varepsilon)$ dont l'allure est représentée, à titre d'illustration, sur la figure 3.3.5 pour une chaîne de petite taille.

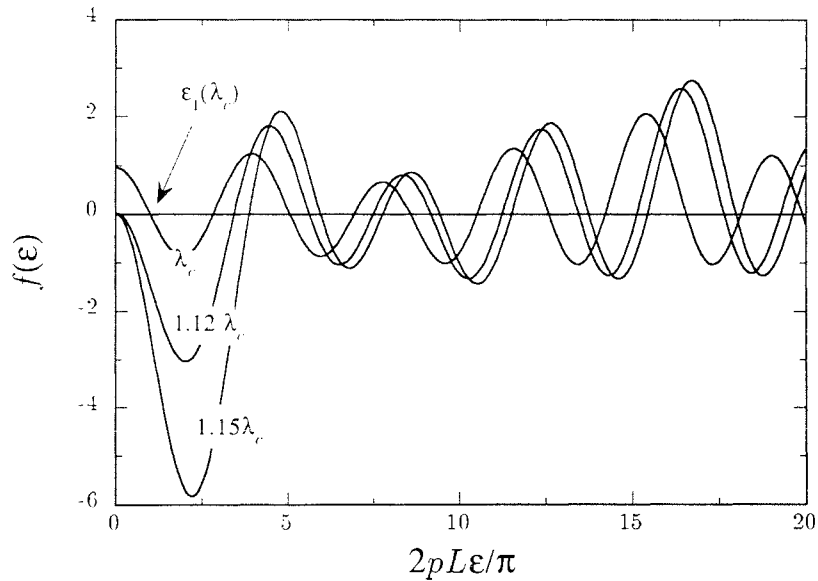


Figure 3.3.5 Fonction $f(\varepsilon)$ pour $L = 2^4$, $p = q = 2$, $r = 1.1$ et pour plusieurs valeurs de λ dans la phase ordonnée.

On constate qu'à mesure que λ augmente depuis la valeur critique $\lambda_c = r^{-2/3}$, la plus petite excitation décroît alors que ε_2 augmente, la longueur de corrélation $\xi_{\parallel} = 1/\varepsilon_2$ diminuant lorsque l'on s'éloigne du point critique. En utilisant un programme de recherche du deuxième zéro de $f(\varepsilon)$ pour des chaînes de $L = 2^6$ couches avec $p = 10, 20$ et 30 rangées et $r = 0.9$, on peut tracer les courbes $\ln \xi_{\parallel}$ en fonction de $\ln t$ (figure 3.3.6).

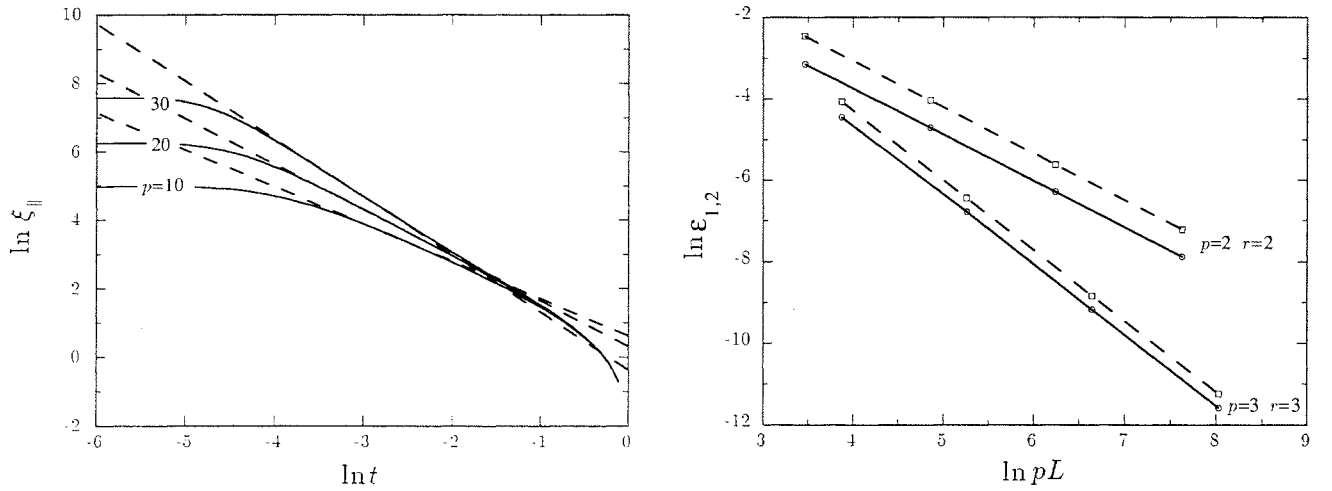


Figure 3.3.6 A gauche : variation en log-log de la longueur de corrélation dans la direction temporelle $\xi_{\parallel}$ en fonction de la température réduite pour la séquence "doublement de période" pour une chaîne de taille $L = 2^6$ avec $r = 0.9$ et $p = 10, 20$ et 30 . Les courbes en traits pointillés montrent le comportement théorique attendu avec des droites de pente $-z$. A droite : variation en log-log des deux premières excitations au point critique en fonction du nombre de couches pL du système pour $r = 2, p = 2$ et $r = 3, p = 3$.

Celles-ci comportent, avant le plateau dû à des effets de surface, une partie linéaire dont la pente donne l'exposant d'anisotropie $-z$, conformément à la loi de puissance $\xi_{\parallel} \sim t^{-z}$. Les résultats numériques, présentés dans le tableau 3.3.1, confirment la conjecture précédente avec, cependant, une incertitude relativement importante en raison de la petite taille considérée (nous nous sommes limité à 2^6 couches).

Nous avons également déterminé le comportement en taille de ε_1 et ε_2 au point critique du système semi-infini. Cette fois, afin d'accéder à un nombre suffisamment grand de couches (2^{10}), nous avons restreint les valeurs de $p = q$ à 2 et 3. La courbe 3.3.6 et le tableau 3.3.2 présentent les résultats obtenus pour $r = 2$ et 3. Nous avons également fait figurer les résultats concernant les exposants magnétique et thermique de surface en accord avec (3.2.3).

r	$p = q$	$\nu_{\parallel}$	z
1.1	10	1.102	1.072
1.1	20	1.286	1.273
1.1	30	1.493	1.575
0.9	10	1.099	1.087
0.9	20	1.334	1.330
0.9	30	1.626	1.686

Tableau 3.3.1 Exposants de la longueur de corrélation dans la direction temporelle pour la séquence “doublement de période” en fonction du rapport des couplages r et du nombre de couches $p = q$. $\nu_{\parallel}$ est la valeur numérique obtenue sur une chaîne de 2^6 couches, tandis que z donne la valeur analytique conjecturée.

r	$p = q$	num.	z	num.	x_{ms}	num.	x_{es}
2	2	1.15(2)	1.149	0.58(3)	0.574	2.29(1)	2.298
2	3	1.33(2)	1.322	0.69(5)	0.661	2.62(3)	2.644
3	2	1.36(2)	1.357	0.70(4)	0.678	2.70(2)	2.713
3	3	1.75(2)	1.737	0.90(4)	0.869	3.45(2)	3.474

Tableau 3.3.2 Exposants de la longueur de corrélation, de l’aimantation de surface et de la densité d’énergie de surface pour la séquence “doublement de période” en fonction du rapport des couplages r et du nombre de couches $p = q$. Les exposants sont obtenus par effets de taille finie au point critique pour des chaînes de longueur $L = 2^4$ à 2^{10} . Pour chacune des grandeurs, num. représente les valeurs numériques, tandis que z , x_{ms} et x_{es} sont les valeurs analytiques conjecturées.

3.5. Séquence “pliage de papier”

D’après (3.3.4), le couplage critique de la multicouche aperiodique “pliage de papier” est donné par :

$$\lambda_c = r^{-\frac{p}{p+q}} \quad (3.3.33)$$

puisque $\rho_{\infty} = 1/2$. L’exposant de l’aimantation de surface dans le problème de liaison habituel

$$\beta_s = \frac{\ln(1 + \lambda_c^2)}{2 \ln 2} \quad (3.3.34)$$

conduit, dans le cas des multicouches, à :

$$\beta_s^{\text{multi}}(r, p, q) = \frac{\ln(1 + (\lambda_c^q)^2)}{2 \ln 2} = \frac{\ln \left(1 + r^{-\frac{2pq}{p+q}} \right)}{2 \ln 2}. \quad (3.3.35)$$

La variation de β_s^{multi} en fonction de r est représentée sur la figure 3.3.7 pour plusieurs valeurs du couple (p, q) .

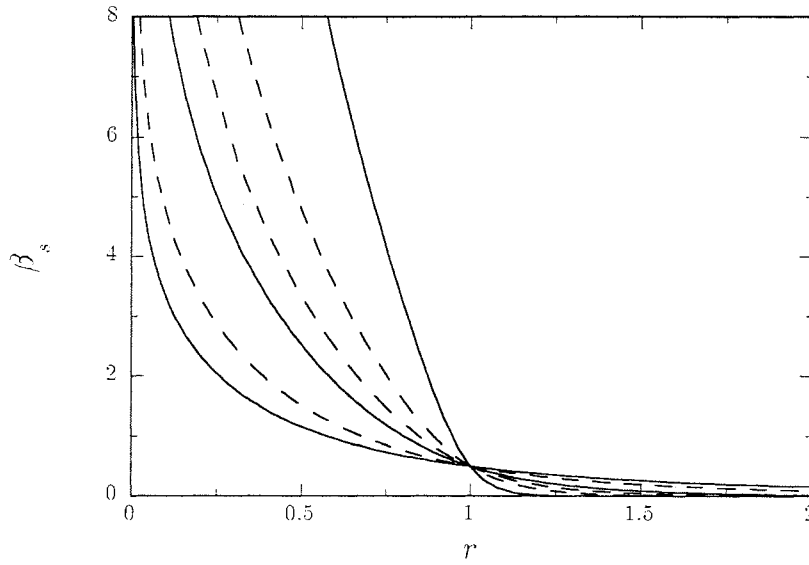


Figure 3.3.7 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s^{multi} en fonction de r pour la multicouche apériodique "pliage de papier". Les courbes en trait continu correspondent au cas où $p = q$ (de gauche à droite, $p = q = 2$; $p = q = 5$; $p = q = 20$) et les courbes en pointillés au cas où $p \neq q$ (de gauche à droite, $p = 2, q = 5$; $p = 10, q = 5$; $p = 100, q = 5$).

Contrairement au cas de la séquence "doublement de période" qui est symétrique et pour laquelle $\beta_s(r^{-1}) = \beta_s(r)$, l'exposant β_s^{multi} de la séquence "pliage de papier" présente une variation monotone. On choisit donc quatre valeurs distinctes de l'exposant β_s^{multi} associées aux valeurs de $r > 1$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 0.2$ et 0.4) et de $r < 1$ ($\beta_s^{\text{multi}} = 2$ et 3) pour tracer les fonctions d'échelle en log-log. Ces courbes universelles sont représentées sur la figure 3.3.8 et, contrairement au cas de la séquence "doublement de période", elles ne présentent pas d'oscillations log-périodiques. Cette absence avait déjà été notée pour les fonctions de corrélation au §2.4. L'invariance par dilatation discrète est en effet nécessaire mais pas suffisante pour que de telles modulations apparaissent.

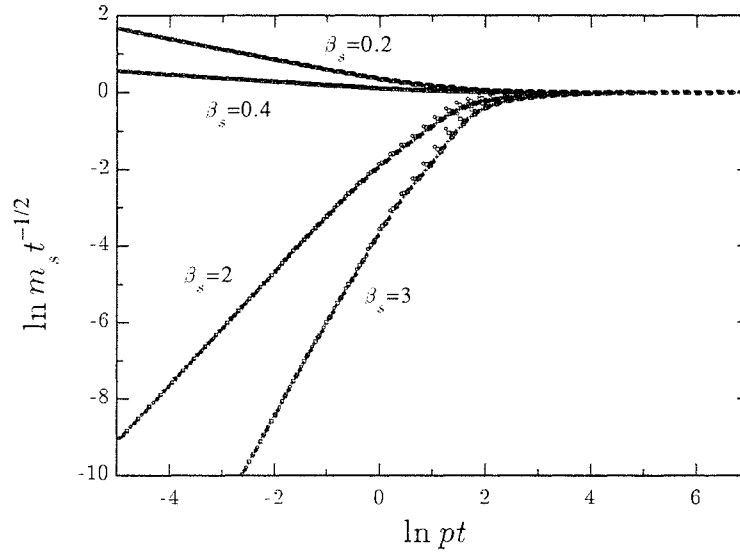


Figure 3.3.8 Courbes universelles pour la séquence “pliage de papier” avec $p = q = 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000$.

4. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les résultats d’une étude systématique de l’influence de perturbations apériodiques marginales sur le comportement critique d’une chaîne d’Ising quantique. En accord avec le critère de pertinence, nous avons obtenu des exposants critiques variables en fonction de l’amplitude de la modulation apériodique. Par ailleurs, les comportements critiques du spectre d’excitations, de la densité d’énergie libre, de la chaleur spécifique et des fonctions de corrélation de surface traduisent un comportement d’échelle anisotrope avec un exposant d’anisotropie z égal à la somme des exposants magnétiques de surface sur les deux extrémités de la chaîne.

Nous avons constaté que les profils de l’énergie de volume et de l’aimantation de volume, obtenus sur des systèmes avec conditions périodiques, manifestent également un comportement d’échelle anisotrope. Les exposants associés sont continûment variables, mais on peut remarquer que la variation de l’exposant de la densité d’énergie de volume est une simple conséquence de l’anisotropie : $x_e = z$, puisque z lui-même est variable. L’exposant de la longueur de corrélation, en revanche, conserve sa valeur non perturbée $\nu = 1$.

Par ailleurs, on peut noter que l’exposant d’anisotropie z est toujours supérieur à 1 pour les trois séquences étudiées. Par conséquent, l’exposant de la chaleur spécifique $\alpha = 1 - z$ est négatif et la singularité logarithmique d’Onsager disparaît.

Le comportement critique anisotrope associé à ces systèmes marginaux détruit l’invariance conforme du modèle d’Ising critique. Les relations gap-exposant ne sont donc plus valables dans ces systèmes.

Enfin, nous avons mis en évidence, dans le cadre des multicouches apériodiques, l'existence d'un changement de comportement critique entre le comportement gouverné par le point fixe homogène du système semi-infini et celui gouverné par le point fixe apériodique. Nous avons également vérifié le comportement anisotrope pour les multicouches apériodiques puisque l'exposant associé à la longueur de corrélation dans la direction temporelle est égal à l'exposant d'anisotropie z .

Au cours de ce chapitre, nous avons rencontré à plusieurs occasions des amplitudes log-périodiques (énergies d'excitations, aimantation de surface, fonctions de corrélation dans la direction temporelle). Celles-ci sont dues à l'invariance par dilatation discrète des séquences apériodiques. Leur présence n'est néanmoins pas systématique, puisqu'elles n'apparaissent que dans les excitations pour la séquence "pliage de papier".

Chapitre 4

Chaîne aperiodique de spins dans l'approximation de champ moyen

1. Généralités

1.1. Introduction

Nous nous sommes intéressé jusqu'ici aux perturbations aperiodiques du modèle d'Ising. Nous étudierons, dans ce chapitre, les propriétés critiques de surface et de volume d'une chaîne aperiodique de spins dans le cadre de la théorie phénoménologique de Ginzburg-Landau en ϕ^4 . La théorie de Landau des transitions de phase du second ordre est fondée sur l'existence d'un paramètre d'ordre ϕ , dont la valeur d'équilibre est nulle dans la phase désordonnée et non nulle dans la phase ordonnée. Au voisinage d'un point critique, et en champ faible, la valeur du paramètre d'ordre est proche de 0 ; Landau suggère alors de développer l'énergie libre en puissances de ϕ , ce qui lui permet d'obtenir les exposants critiques de champ moyen (GINZBURG et LANDAU 1950, GINZBURG et PITAEVSKII 1958).

L'utilité d'une étude des systèmes aperiodiques dans l'approximation de champ moyen repose sur l'observation suivante : les systèmes avec interaction à portée infinie, de même que ceux qui sont au-dessus de leur dimension critique supérieure ($d_c = 4$ pour le modèle critique, $d_c = 3$ pour un point tricritique dans le modèle en ϕ^4), appartiennent à la classe d'universalité de champ moyen.

D'après le critère de Luck, l'exposant de champ moyen de la longueur de corrélation $\nu = \frac{1}{2}$ conduit à un comportement marginal lorsque l'exposant de

“divagation” ω est égal à -1 . La séquence de Fibonacci satisfait cette condition. Nous présenterons les résultats obtenus pour les exposants critiques de surface et de volume de l’aimantation, des isothermes critiques, de la susceptibilité et de la chaleur spécifique (BERCHE et BERCHE 1996). Nous constaterons que ces exposants varient effectivement de façon continue avec l’amplitude de la perturbation, ce qui confirme le caractère marginal de cette séquence. Nous évaluerons enfin, à partir de la relation “d’hyperscaling”, la dimension critique supérieure de ce système.

1.2. Cadre général de la théorie de Ginzburg-Landau

On considère un système constitué de moments magnétiques classiques discrets $\pm\mu_i$ placés sur les noeuds d’un réseau. Aux différentes configurations microscopiques $\{\mu_i\}$, on associe une distribution continue du paramètre d’ordre $\phi(\vec{r})$ en intégrant, dans la fonction de partition, sur les fluctuations de faible longueur d’onde de l’aimantation.

A l’ensemble des configurations microscopiques $\{\mu_i\}$ correspondant à la valeur $\phi(\vec{r})$ supposée ici scalaire, on associe une densité d’énergie libre phénoménologique f , respectant les symétries de l’hamiltonien microscopique. En particulier, pour un système magnétique, l’invariance par renversement du temps est équivalente à l’invariance par la transformation $\phi(\vec{r}) \rightarrow -\phi(\vec{r})$, ce qui conduit à ne conserver dans le développement de f que les puissances paires du paramètre d’ordre et de ses dérivées :

$$f\{\phi(\vec{r})\} = f_0 + \frac{1}{2}\mu(T)\phi(\vec{r})^2 + \frac{1}{4}g\phi(\vec{r})^4 + \frac{1}{2}c|\vec{\nabla}\phi(\vec{r})|^2 + \dots \quad (4.1.1)$$

Le terme en gradient intervient pour rendre compte de l’interaction d’échange entre moments dans la limite continue. Cette interaction limite les fluctuations spatiales dans la configuration d’équilibre, ce qui implique que c soit positif. Le coefficient $\mu(T)$ change de signe au point critique, $\mu(T_c) = 0$, et il est positif dans la phase désordonnée. g (ou, de manière plus générale, le coefficient du terme de plus forte puissance de $\phi(\vec{r})$) est positif, afin de limiter l’amplitude des fluctuations et d’assurer la stabilité. L’énergie libre d’une configuration est obtenue en intégrant la densité f sur le volume Ω du système :

$$F\{\phi(\vec{r})\} = \int_{\Omega} f\{\phi(\vec{r})\} d\vec{r} \quad (4.1.2)$$

et la fonction de partition en sommant sur les distributions du paramètre d’ordre :

$$Z(T) = \sum_{\{\phi(\vec{r})\}} \exp \left[-\frac{F\{\phi(\vec{r})\}}{k_B T} \right]. \quad (4.1.3)$$

Dans la suite, l’interaction avec un champ magnétique extérieur $-H\phi(\vec{r})$ sera incluse dans (4.1.1) et $F(H) = -k_B T \ln Z$ sera l’enthalpie libre du système.

1.3. Comportement critique de surface

Le comportement critique de surface a été abondamment étudié à partir de la formulation de Ginzburg-Landau (GINZBURG et LANDAU 1950) dans les années 70 (MILLS 1971, KAGANOV et OMEL'YANCHUK 1972, KAGANOV 1972, BINDER et HOHENBERG 1972, BARBER 1973, KUMAR 1974, LUBENSKY et RUBIN 1975). Cela a conduit à une classification des transitions qui peuvent se produire en surface et à l'obtention de lois d'échelle reliant les exposants critiques de surface et de volume (BRAY et MOORE 1977a, BRAY et MOORE 1977b, FISHER 1973, DIEHL et DIETRICH 1981, DIEHL 1982). En effet, au point critique, le système étudié est sensible aux conditions aux limites imposées par la présence de surfaces et il peut en résulter un comportement critique modifié avec des exposants de surface spécifiques. On définit ainsi (BINDER 1983) :

- i) la transition ordinaire caractérisée par la mise en ordre de la surface induite par celle du volume ; dans ce cas, le profil du paramètre d'ordre décroît au voisinage de la surface ;
- ii) la transition de surface pour laquelle la surface s'ordonne avant le volume lorsque la température diminue ;
- iii) la transition extraordinaire qui suit la transition de surface, lorsque le volume s'ordonne à son tour à la température T_c (inférieure à T_c^s , température caractéristique de la transition de surface) ;
- iv) la transition spéciale caractérisée par un profil uniforme du paramètre d'ordre ; dans ce cas, l'ordre apparaît simultanément en surface et en volume (figure 4.1.1).

L'apparition de comportements critiques de surface différents de ceux existant en volume nécessite la définition de nouveaux exposants critiques et donc de nouveaux champs d'échelle caractéristiques de la surface. On introduit 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 ϵ_1 . Par analogie avec la densité d'énergie libre de volume, on peut écrire la contribution singulière de la densité d'énergie libre de surface sous la forme :

$$f_s^{\text{surf}}(t, h, t_1, h_1) = b^{-(d-1)} f_s^{\text{surf}}(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{y_{t_1}} t_1, b^{y_{h_1}} h_1). \quad (4.1.4)$$

En ce qui concerne les propriétés de surface, nous nous sommes restreint, dans l'étude que nous avons menée dans l'approximation de champ moyen, à la transition de surface ordinaire.

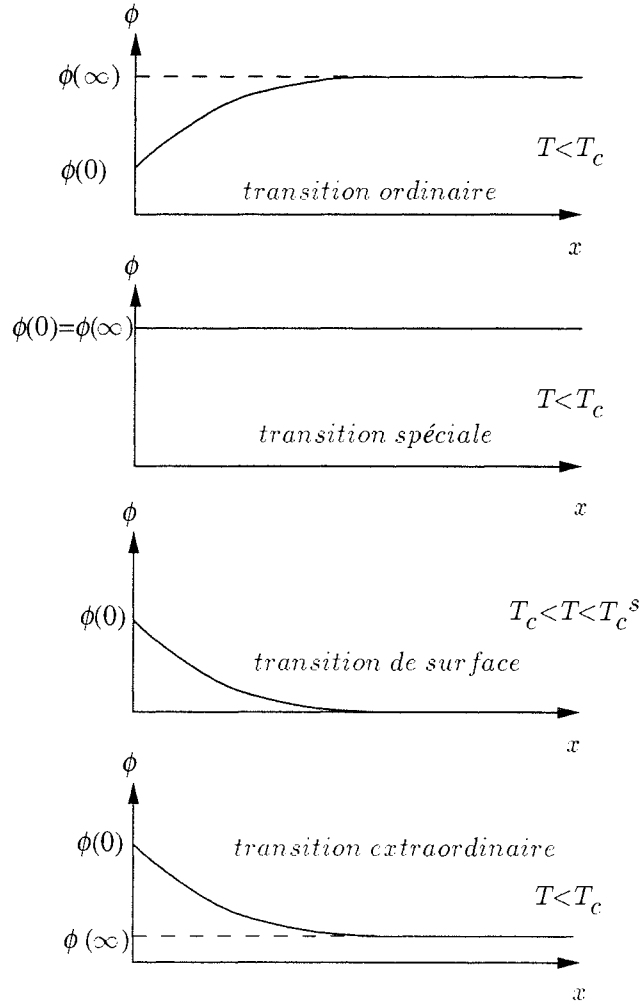


Figure 4.1.1 Profils du paramètre d'ordre pour les différentes catégories de transitions en surface.

2. Equations de Ginzburg-Landau discrètes pour la perturbation aperiodique de Fibonacci

2.1. Formalisme de Landau et équation d'état sur un réseau à une dimension

Nous présentons tout d'abord rapidement la formulation de la théorie de Ginzburg-Landau sur un réseau discret. On considère un réseau de L sites à une dimension avec un pas noté τ et des conditions de bords libres. Ce problème peut être considéré comme une plaque à d dimensions d'épaisseur $L\tau$ avec invariance par translation le long des $d - 1$ directions perpendiculaires à la chaîne et une anisotropie axiale extrême qui impose aux moments magnétiques de garder une direction constante dans le plan de la plaque.

Nous allons étudier les propriétés critiques d'une perturbation distribuée de façon aperiodique dans le cadre de la théorie de Landau en ϕ^4 (LANDAU 1937). L'expression de la densité d'énergie libre est alors la suivante :

$$f_b\{\phi_j\} = \frac{1}{2}\mu_j\phi_j^2 + \frac{1}{4}g\phi_j^4 - H\phi_j + \frac{1}{2}c\left(\frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\tau}\right)^2 \quad (4.2.1)$$

où la perturbation aperiodique des couplages est déterminée par une règle de substitution à deux lettres qui intervient uniquement dans le terme en ϕ^2 . En effet, une analyse dimensionnelle montre que l'écart à la température critique μ constitue le champ d'échelle pertinent qui, modifié par la perturbation, est susceptible de donner lieu à un comportement marginal. L'énergie libre de la chaîne complète est alors donnée par :

$$F[\phi_j] = \sum_j f_b\{\phi_j\} \quad (4.2.2)$$

et la distribution spatiale du paramètre d'ordre se déduit de la minimisation fonctionnelle habituelle :

$$\delta F[\phi_j] = F[\phi_j + \delta\phi_j] - F[\phi_j] = 0 \quad (4.2.3)$$

à des termes $O([\delta\phi_j]^2)$ près. On obtient alors les équations de Ginzburg-Landau discrètes :

$$\mu_j\phi_j + g\phi_j^3 - H - \frac{c}{\tau^2}(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) = 0. \quad (4.2.4)$$

Les coefficients μ_j dépendent du site considéré. On les obtient en généralisant l'expression du terme en ϕ^2 habituel :

$$\mu_j = k_B T - zJ \longrightarrow \mu_j = k_B T - (zJ - Rf_j) \quad (4.2.5)$$

où J est l'interaction d'échange ferromagnétique entre les sites voisins dans le système homogène, z la coordonnée du réseau et f_j la séquence de 0 et 1 distribuée aperiodiquement. En factorisant $k_B T$, on écrira

$$\mu_j = a_0\left(1 - \frac{1}{\theta} + rf_j\right) \quad (4.2.6)$$

où le préfacteur $a_0 = k_B T$ est pratiquement constant dans le voisinage du point critique et la température θ est rapportée à la température critique du système non perturbé : $\theta = k_B T/zJ$. Nous nous limiterons à l'étude du cas $r > 0$ qui correspond à une diminution des interactions pour les sites perturbés. Dans la suite, nous utiliserons donc la notation $\mu = 1 - 1/\theta$. Afin d'obtenir une équation sans dimension, nous définissons également $\phi_j = m_j\sqrt{a_0/g}$, ce qui conduit à l'équation suivante pour les m_j :

$$(\mu + rf_j)m_j + m_j^3 - h - (m_{j+1} - 2m_j + m_{j-1}) = 0 \quad (4.2.7)$$

avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} (\mu + rf_1)m_1 + m_1^3 - h - (m_2 - 2m_1) & = 0, \\ (\mu + rf_L)m_L + m_L^3 - h - (-2m_L + m_{L-1}) & = 0. \end{cases} \quad (4.2.8)$$

Les longueurs sont mesurées en unités $\tau = \sqrt{c/a_0}$ et $h = H\sqrt{g/a_0^3}$ est un champ magnétique réduit. On peut noter que l'on n'a pas introduit de terme spécifique de surface dans la densité d'énergie libre. La conséquence de la présence de surfaces libres est de briser la symétrie par translation en supprimant un voisin pour les moments magnétiques de surface. Les équations de surface pour le profil du paramètre d'ordre sont simplement données par la continuité des équations de volume jusqu'à la surface et notre étude concernera seulement les transitions de surface ordinaires (BINDER 1983).

2.2. Perturbation de Fibonacci

La séquence de Fibonacci peut être définie par une substitution à deux chiffres à partir de la règle d'inflation :

$$0 \rightarrow S(0) = 01, \quad 1 \rightarrow S(1) = 0 \quad (4.2.9)$$

qui, pour une suite initiée par 0, conduit à :

$$\begin{aligned} &0 \\ &01 \\ &010 \\ &01001 \\ &01001010 \\ &\dots \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

Comme on l'a vu au chapitre 2, la plupart des propriétés d'une telle séquence peuvent être déduites de sa matrice de substitution :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.2.11)$$

La plus grande valeur propre de $\mathbf{M}$ est donnée par le nombre d'or $\Lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ et la seconde valeur propre s'écrit : $\Lambda_2 = -1/\Lambda_1$. La densité asymptotique de couplages perturbés de la séquence de Fibonacci est donc :

$$\rho_\infty = 1 - \frac{2}{\sqrt{5} + 1} \quad (4.2.12)$$

et son exposant de "divagation" vaut :

$$\omega = \frac{\ln |\Lambda_2|}{\ln \Lambda_1} = -1. \quad (4.2.13)$$

Lorsque le champ d'échelle μ est perturbé comme on l'a vu dans le paragraphe précédent :

$$\mu_j = a_0(\mu + r f_j) \quad (4.2.14)$$

les fluctuations des interactions par liaison pour une chaîne de longueur L

$$\overline{\delta\mu}(L) = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L (\mu_j - \bar{\mu}) = \frac{1}{L} a_0 r (n_L - \rho_\infty L) \quad (4.2.15)$$

renormalisent selon :

$$\overline{\delta\mu'}(L') = \epsilon' \left(\frac{L}{b} \right)^{\omega-1} = b^{y_\mu} \epsilon L^{\omega-1} \quad (4.2.16)$$

où $\epsilon = a_0 r$ est ici directement proportionnel à r , ce qui conduit à $\epsilon' = b^{y_\mu + \omega - 1} \epsilon$. L'apériodicité représente donc une perturbation marginale lorsque $\omega = -1$ en raison de la dimension $y_\mu = 2$ du champ d'échelle modifié. On peut remarquer qu'une perturbation des paramètres g ou c intervenant dans l'expression de la densité d'énergie libre de Landau serait non pertinente (en effet, les dimensions qui leur sont associées valent $y_g = y_c = 0$ (TOULOUSE et PFEUTY 1975)).

2.3. Définition des grandeurs thermodynamiques étudiées

Dans la suite, nous étudierons les exposants critiques de surface et de volume ainsi que les fonctions d'échelle associées à diverses propriétés physiques. Nous traiterons l'aimantation de surface m_s et celle de la première couche m_1 , les susceptibilités de surface et de la première couche χ_s et χ_1 et la chaleur spécifique de surface C_s . Ces grandeurs peuvent être exprimées par les dérivées de la densité d'énergie libre de surface f_s (BINDER 1983) (tableau 4.2.1).

aimantation		susceptibilité		chaleur spécifique	
volume	surface	volume	surface	volume	surface
$m_b = -\frac{\partial f_b}{\partial h}$	$m_s = -\frac{\partial f_s}{\partial h}$	$\chi_b = -\frac{\partial^2 f_b}{\partial h^2}$	$\chi_s = -\frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2}$	$C_b = -\frac{\partial^2 f_b}{\partial t^2}$	$C_s = -\frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2}$
	$m_1 = -\frac{\partial f_s}{\partial h_1}$		$\chi_1 = -\frac{\partial^2 f_s}{\partial h \partial h_1}$		
			$\chi_{11} = -\frac{\partial^2 f_s}{\partial h_1^2}$		

Tableau 4.2.1 Définition des grandeurs thermodynamiques de volume et de surface en fonction des densités d'énergie libre de volume (f_b) et de surface (f_s). h et h_1 sont les champs magnétiques de volume et de surface respectivement et t est la température réduite.

Dans un premier temps, nous allons définir les grandeurs locales. L'aimantation m_1 est simplement donnée par la valeur du paramètre d'ordre sur le site de surface,

alors que l'aimantation locale de volume $m_{(n-1)}$ est définie, pour une chaîne de taille L_n obtenue après n substitutions, comme l'aimantation du site L_{n-1} (figure 4.2.1), ce qui permet de considérer des sites équivalents sur des chaînes de tailles différentes.

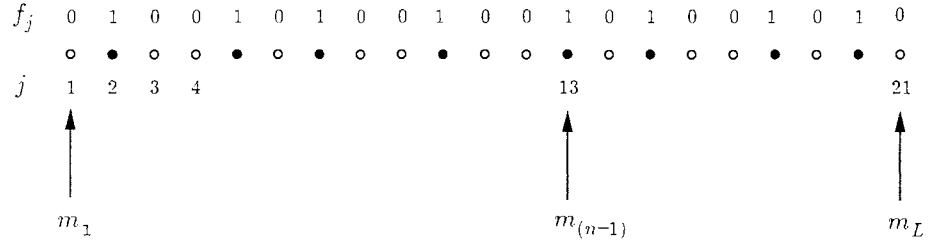


Figure 4.2.1 Chaîne de Fibonacci de 21 sites. L'aimantation locale de volume, pour une chaîne de L_n sites obtenue après n itérations, est calculée sur le site L_{n-1} , ici le site 13.

En plus de ces grandeurs locales, on peut également calculer l'aimantation de surface et l'aimantation moyenne de volume (m_s et m_b respectivement) qui pourraient présenter un intérêt du point de vue expérimental, puisque tout dispositif de mesure réalise de fait une moyenne sur une région de dimension très grande à l'échelle microscopique. L'aimantation moyenne de volume m_b est définie comme la moyenne sur L_{n-2} sites autour du site milieu de la chaîne de taille L_n considérée, afin de préserver la symétrie par rapport au site milieu et de s'affranchir des effets de surface. Par ce biais, on doit retrouver le même comportement que pour une chaîne de taille L_{n-2} en conditions de bords périodiques. Nous avons effectivement vérifié numériquement cette équivalence. Pour une chaîne de longueur L_n avec deux surfaces libres, l'aimantation de surface est définie par la différence entre l'aimantation moyenne de volume m_b et l'aimantation moyenne $\langle m_j \rangle$ de la chaîne complète (BINDER 1983)

$$m_b = \frac{1}{L_{n-2}} \sum_{j \in L_{n-2}} m_j, \quad m_s = \frac{1}{2} \left(m_b - \frac{1}{L_n} \sum_{j=1}^{L_n} m_j \right) \quad (4.2.17)$$

où $j \in L_{n-2}$ signifie que la somme s'étend de $j = \frac{1}{2}(L_n - L_{n-2})$ à $j = \frac{1}{2}(L_n + L_{n-2})$. Une description graphique de ces différentes définitions est donnée sur la figure 4.2.2.

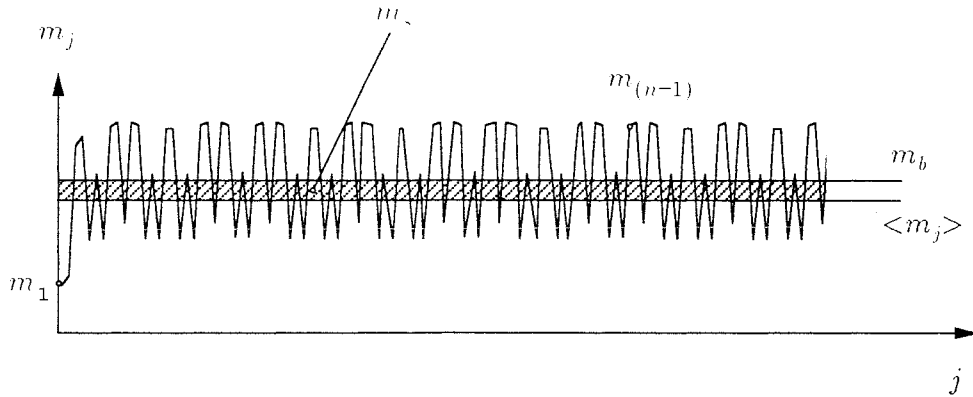


Figure 4.2.2 Allure caractéristique du profil du paramètre d'ordre pour un système perturbé, montrant l'aimantation de la première couche m_1 et l'aimantation locale de volume $m_{(n-1)}$, ainsi que les valeurs moyennes m_b et $\langle m_j \rangle$.

La présence de la surface libre a pour effet d'atténuer la valeur du profil du paramètre d'ordre au voisinage de la surface et ainsi d'abaisser $\langle m_j \rangle$ par rapport à m_b . Dans ce qui suit, on utilisera les symboles $\langle \rangle$ pour les grandeurs moyennées sur le système fini, prenant ainsi en compte les effets de surface.

De la même façon que pour les aimantations, la définition de la densité d'énergie libre de volume dans le tableau 4.2.1 doit être comprise comme une moyenne en éliminant les effets de surface :

$$f_b = \frac{1}{L_{n-2}} \sum_{j \in L_{n-2}} f_b \{m_j\} \quad (4.2.18)$$

tandis que la densité d'énergie libre de surface f_s est définie par le complément à l'énergie libre moyenne de volume (BINDER et HOHENBERG 1972) :

$$F = \sum_{j=1}^{L_n} f_b \{m_j\} = L_n \langle f_b \rangle = L_n f_b + 2f_s. \quad (4.2.19)$$

3. Propriétés magnétiques

3.1. Profil du paramètre d'ordre et température critique

Le profil du paramètre d'ordre est déterminé numériquement par la méthode de Newton-Raphson, en commençant avec des valeurs arbitraires pour le profil d'essai initial m_j . L'équation (4.2.7) conduit à un système de L équations non linéaires couplées :

$$G_i(m_1, m_2, \dots, m_L) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, L \quad (4.3.1)$$

pour les composantes du vecteur $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_L)$. En développant au voisinage de $\mathbf{m}$, solution de l'équation (4.3.1), au premier ordre en $\delta\mathbf{m}$, on obtient :

$$G_i(\mathbf{m} + \delta\mathbf{m}) = G_i(\mathbf{m}) + \sum_{j=1}^L \frac{\partial G_i}{\partial m_j} \delta m_j + O(\delta\mathbf{m}^2). \quad (4.3.2)$$

Un ensemble d'équations linéaires conduit alors aux corrections $\delta\mathbf{m}$:

$$\sum_{j=1}^L \frac{\partial G_i}{\partial m_j} \delta m_j = -G_i(\mathbf{m}). \quad (4.3.3)$$

Cette technique est connue pour permettre une convergence rapide vers la solution numérique exacte. Des exemples de profils obtenus pour la perturbation de Fibonacci sont présentés sur la figure 4.3.1.

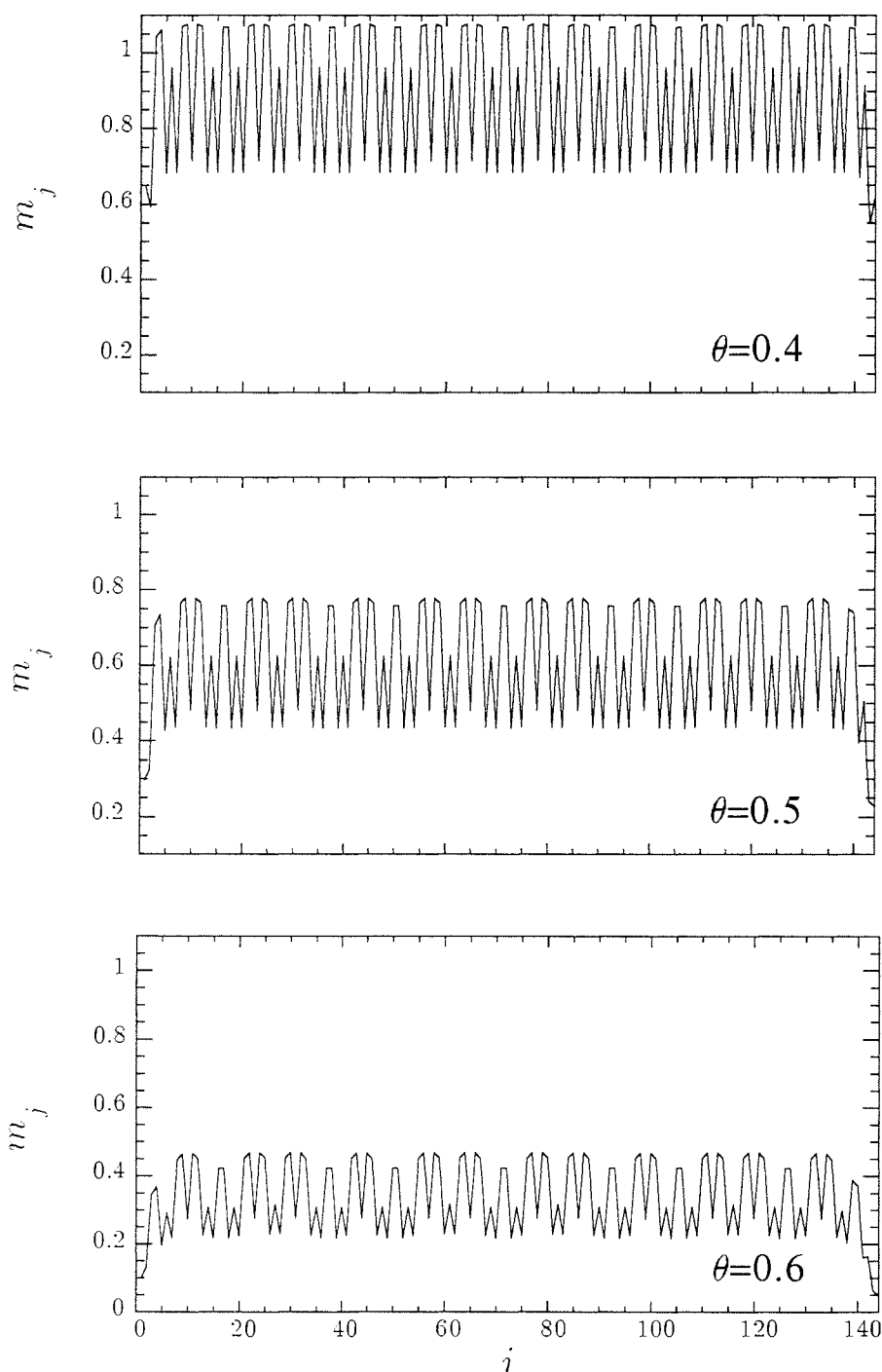


Figure 4.3.1 Profils du paramètre d'ordre pour une perturbation $r = 2$ et trois valeurs de la température inférieures à la température critique. La taille de la chaîne est $L = 144$.

L'amplitude du profil de l'aimantation diminue lorsque la température augmente et s'annule pour une température critique effective dépendant de la taille $\mu_c(L) = 1 - (\theta_c(L))^{-1}$. Cette valeur peut être obtenue par une relation de récurrence déduite de l'équation d'état. Dans la phase haute température, on peut

en effet négliger le terme cubique de l'équation (4.2.7), laquelle, réécrite lorsque $h = 0$, conduit à un système homogène d'équations linéaires couplées :

$$\mathbf{G}\mathbf{m} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & \alpha_2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & \alpha_3 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -1 & \alpha_{L-1} & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & \alpha_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ m_{L-1} \\ m_L \end{pmatrix} = 0 \quad (4.3.4)$$

où $\alpha_j = 2 + \mu + rf_j$. Si le déterminant $D_L(\mu) = \text{Det } \mathbf{G}(\mu)$ ne s'annule pas, le vecteur nul $\mathbf{m} = \mathbf{0}$ est l'unique solution pour la phase haute température. La température critique est alors définie par la valeur limite $\mu_c(L)$ permettant d'obtenir une solution non nulle pour $\mathbf{m}$, c'est-à-dire $D_L(\mu_c) = 0$. Du fait de la structure tridiagonale du déterminant, on obtient, pour toute valeur de μ , la relation de récurrence suivante :

$$\begin{cases} D_L(\mu) = \alpha_L D_{L-1}(\mu) - D_{L-2}(\mu) \\ D_0(\mu) = 1 \\ D_1(\mu) = \alpha_1. \end{cases} \quad (4.3.5)$$

On peut ainsi déterminer $\mu_c(L)$ pour différentes tailles L depuis 144 jusqu'à 46368 et évaluer la valeur critique asymptotique par une extrapolation à taille infinie. Cette technique permet une détermination de la température critique avec une incertitude absolue de l'ordre de 10^{-7} à 10^{-9} en fonction de la valeur de l'amplitude r .

On peut noter que la température critique effective $\theta_c(L)$ croît avec la taille du système, de sorte qu'au point critique du système infini, θ_c , le profil d'aimantation pour des chaînes de taille finie est identiquement nul. Ceci interdit l'utilisation de techniques d'effets de taille finie à θ_c , et le comportement critique doit être examiné à partir du comportement en température des grandeurs physiques.

3.2. Comportements de l'aimantation spontanée de surface et de volume

L'aimantation sur le premier site m_1 s'annule à la même température que le profil lui-même. On calcule les profils pour des chaînes de longueurs données par les tailles successives de la séquence de Fibonacci $L = 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34 \dots$ afin d'évaluer l'influence des effets de taille finie. L'aimantation de la première couche ainsi que celle du site L_{n-1} sont représentées en champ nul sur la figure 4.3.2 sur une échelle log-log⁽¹⁾.

Les effets de taille finie sont mis en évidence par l'écart à une courbe asymptotique, linéaire sur toute la gamme de température. Ces effets ne sont pas trop sensibles, puisqu'ils peuvent être quantifiés en considérant la déviation de la courbe correspondant à une taille $L = 17711$ qui se produit pour

(1) On a représenté ici une taille sur deux, puisque des séquences analogues se retrouvent après deux substitutions.

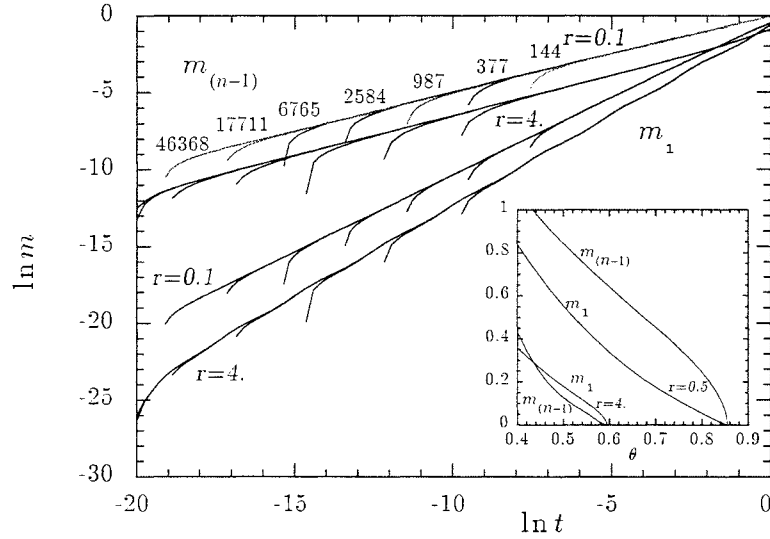


Figure 4.3.2 Tracé en log-log de l'aimantation calculée sur le premier site et sur le site L_{n-1} en fonction de l'écart à la température critique $t = \mu_c - \mu$ pour deux valeurs de l'amplitude de la perturbation r et pour différentes tailles de la chaîne de 144 à 46368. Les effets de taille finie se produisent lorsque les courbes dévient de la courbe asymptotique (linéaire sur toute la gamme de température). Le comportement marginal attendu est mis en évidence par les différentes pentes des courbes et il est plus manifeste pour l'aimantation du premier site que pour celle du site L_{n-1} . La courbe insérée montre le comportement de l'aimantation avec la température.

$t = |\mu_c - \mu| \simeq 10^{-7}$, c'est-à-dire très près du point critique⁽²⁾. Le comportement marginal se manifeste par les pentes différentes obtenues pour les courbes en log-log correspondant aux différentes valeurs de l'amplitude de la perturbation r . En outre, une étude approfondie de ces courbes permet d'observer des oscillations dues à l'invariance d'échelle discrète du système (JONA-LASINIO 1975, NAUENBERG 1975, NIEMEIJER et VAN LEEUWEN 1976, KAREVSKI et TURBAN 1996) et l'aimantation asymptotique peut donc s'écrire :

$$m(t) = \hat{m}(t^{-\nu})t^\beta \quad (4.3.6)$$

où $\hat{m}(t^{-\nu})$ est une fonction d'échelle log-périodique de son argument. Nous avons utilisé ce comportement oscillant pour obtenir une détermination plus précise de la température critique (de l'ordre de 10^{-11} à 10^{-12}) ainsi que des valeurs des exposants de surface et de volume en traçant l'aimantation renormalisée $mt^{-\beta}$ en fonction de $\ln t^{-\nu}$ (figure 4.3.3).

Les valeurs de μ_c et β_1 que l'on retiendra sont celles qui permettent d'obtenir un comportement oscillant sur l'intervalle le plus large avec la variable $\ln t^{-\nu}$. Une modification de l'exposant de surface β_1 a pour conséquence de changer la pente moyenne du régime des oscillations. Ceci pourrait être dû à des corrections

⁽²⁾ On utilise systématiquement dans ce chapitre une variable de température réduite t positive. Le contexte précise si l'on se place dans la phase de basse ou de haute température.

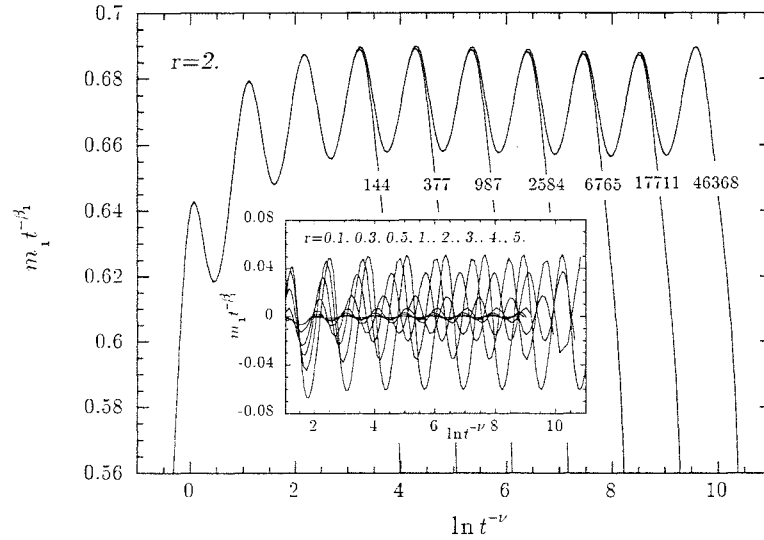


Figure 4.3.3 Oscillations log-périodiques de l'aimantation renormalisée de la première couche $m_1 t^{-\beta_1}$ en fonction du logarithme de la longueur de corrélation $\ln t^{-\nu}$. La déviation par rapport au comportement oscillant pour les grandes valeurs de $t^{-\nu}$ est due aux effets de taille finie et, pour les valeurs proches du point critique, on attribue la chute de la courbe à des difficultés numériques. La courbe insérée montre les oscillations de l'aimantation renormalisée de la première couche pour différentes valeurs de r après soustraction d'une amplitude constante. La fréquence et la phase des oscillations dépendent de la valeur de l'amplitude r .

au “scaling”, mais, si de telles corrections existaient réellement, elles devraient vraisemblablement être négligeables dans cette gamme de température (dans le régime oscillant, t atteint des valeurs de l'ordre de 10^{-9}). L'autre paramètre, μ_c , modifie le nombre d'oscillations présentes sur la courbe et nous avons choisi une valeur permettant d'obtenir le plus grand nombre de telles oscillations. En effet, si $\mu'_c = \mu_c + \Delta\mu_c$, on introduit artificiellement une correction au “scaling” puisque $t^3 = (t' + \Delta\mu_c)^3 \sim t'^3 \left(1 + 3\frac{\Delta\mu_c}{t'}\right)$. Cette correction est d'autant plus grande que l'écart $\Delta\mu_c$ est important. Les valeurs retenues pour θ_c , β_1 et $\beta_{(n-1)}$ sont données pour plusieurs valeurs de l'amplitude de la perturbation r dans le tableau 4.3.1.

La courbe insérée sur la courbe 4.3.3 montre également que les oscillations log-périodiques ont une fréquence qui dépend de r . Pour interpréter ce résultat qui ne trouve pas d'explication dans le cadre de l'invariance par dilatation discrète exacte, on peut avancer l'hypothèse qu'il s'agit d'un effet propre à la séquence de Fibonacci. Pour celle-ci, l'invariance par dilatation discrète n'est en effet qu'approchée, puisque $\Lambda_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{L_{n+1}}{L_n}$.

Finalement, on peut noter sur la figure 4.3.3 que, plus la taille de la chaîne est petite, plus la courbe correspondante s'éloigne rapidement du comportement asymptotique oscillant. Il est toutefois possible de montrer que ces déviations d'effets de taille finie respectent une loi universelle

$$m_1(t, L) = f\left(\frac{\xi}{L}\right) t^{\beta_1} \quad (4.3.7)$$

où $f(x)$ est une fonction d'échelle, $\xi = t^{-\nu}$ étant la longueur de corrélation. On a représenté la fonction d'échelle $f(x)$ sur la figure 4.3.4.

r	θ_c	surface			volume	
		β_1	β_L	β_s	$\beta_{(n-1)}$	β_b
.1	.963977634341(5)	1.00036(2)		0.0002(2)	.500087(1)	0.5002(2)
.2	.93187679929(2)	1.00146(2)	1.0015(1)		.50033(1)	
.3	.90314503363(2)	1.0034(1)	1.0034(1)		.50072(6)	
.5	.85404149087(2)	1.0092(1)		0.0094(2)	.50187(1)	0.505(1)
.8	.796437160887(5)	1.02214(2)		0.0216(2)	.50419(2)	
1.	.76600595095(2)	1.0327(1)		0.0302(2)	.505777(2)	0.516(1)
1.5	.70902241601(2)	1.0621(1)			.50943(1)	
2.	.67010909237(2)	1.0913(1)		0.087(1)	.51186(3)	0.538(1)
2.5	.64234629279(2)	1.1178(1)			.51294(1)	
3.	.621796760462(5)	1.1410(1)	1.1410(1)	0.133(1)	.5132(1)	0.555(1)
3.5	.60610567508(2)	1.1602(1)			.51327(4)	
4.	.593804120472(5)	1.1766(1)		0.1692(4)	.5130(1)	0.563(1)
4.5	.58394117369(2)	1.1904(1)			.5122(1)	
5.	.5758805295248(5)	1.2026(1)		0.195(1)	.51125(2)	0.567(1)

Tableau 4.3.1 Valeurs numériques de la température critique et des exposants magnétiques pour les aimantations de surface et de volume. Les valeurs entre parenthèses donnent l'incertitude sur le dernier chiffre.

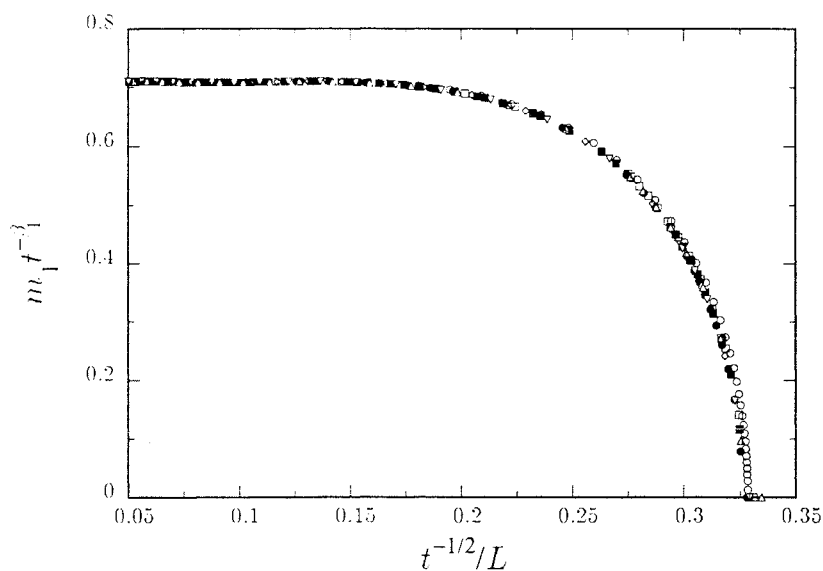


Figure 4.3.4 Fonction d'échelle $m_1 t^{-\beta_1}$ en fonction de ξ/L pour $r = 0.2$ et $L = 144$ ($\blacksquare$), 377 ($\bullet$), 987 ($\diamond$), 2584 (∇), 6765 ($\triangle$), 17711 ($\square$) et 46368 ($\circ$).

L'exposant critique associé à la surface droite (m_L) de la chaîne de Fibonacci a également été calculé pour différentes valeurs de r et donne, avec une bonne précision, la même valeur que pour la surface gauche (m_1) comme on peut le voir dans le tableau 4.3.1. On constate en effet qu'en négligeant les deux dernières valeurs f_L et f_{L-1} , la séquence lue de gauche à droite ou de droite à gauche est la même :

		f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	...					
		0	1	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	1	...
0	1	0	1	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	1	...
f_L	f_{L-1}	f_{L-2}	f_{L-3}	f_{L-4}	f_{L-5}	f_{L-6}	f_{L-7}	f_{L-8}	f_{L-9}	...					

Par ailleurs, les profils présentés sur la figure 4.3.1 montrent clairement que les sites de la chaîne ne sont pas équivalents et les profils d'aimantation doivent être localement renormalisés avec différentes valeurs des exposants en fonction du site⁽³⁾ (BERCHE, BERCHE et TURBAN 1996).

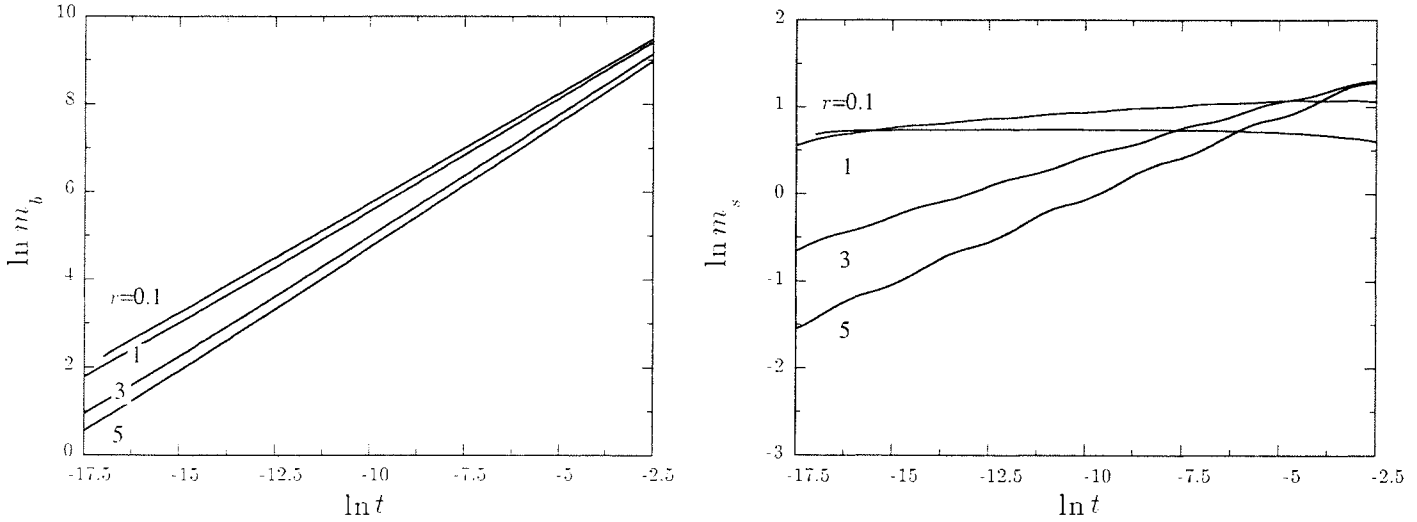


Figure 4.3.5 Tracé en log-log des aimantations moyennes de volume et de surface en fonction de l'écart à la température critique pour $L = 46368$ et $r = 0.1, 1, 3, 5$.

Après la détermination des quantités locales, le calcul des aimantations moyennes de surface et de volume nous permet de déterminer les exposants critiques, respectivement notés β_s et β_b dans le tableau 4.3.1.

(3) La situation est analogue à celle que nous avons rencontrée pour l'aimantation de volume dans le modèle d'Ising bidimensionnel perturbé.

A partir de ces valeurs, on retrouve bien les exposants de la transition ordinaire non perturbée lorsque l'amplitude de la perturbation tend vers 0. La variation de m_b et m_s est représentée en fonction de t avec une échelle log-log sur la figure 4.3.5 avec $L = 46368$ et $r = 0.1, 1, 3, 5$.

3.3. Susceptibilités et isothermes critiques

En conservant le champ magnétique h dans l'équation (4.2.7), on peut calculer l'aimantation sous champ et en déduire les exposants des isothermes critiques $\delta_{(n-1)}$ et δ_1 à partir des comportements des aimantations locales $m_{(n-1)}$ et m_1 en fonction de h au point critique :

$$\begin{aligned} m_{(n-1)} &\sim h^{1/\delta_{(n-1)}}, \\ m_1 &\sim h^{1/\delta_1}, \quad t = 0. \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

Les courbes log-log sont suffisamment linéaires pour autoriser une détermination directe de ces exposants. Dans le cas de l'aimantation sur le premier site, la loi d'échelle incluant un champ magnétique de volume prend la forme suivante lors d'un changement d'échelle de longueur d'un facteur b :

$$m_1(t, h) = b^{-\beta_1/\nu} m_1(b^{y_t} t, b^{y_h} h) \quad (4.3.9)$$

où y_t est égal à l'inverse de l'exposant de la longueur de corrélation $y_t = 1/\nu$ et la valeur de y_h , d'après (4.3.8), est donnée par : $y_h = \beta_1 \delta_1 / \nu = \beta \delta / \nu$. Le choix $b = t^{-\nu}$ pour le facteur d'échelle amène alors au comportement d'échelle suivant :

$$m_1(t, h) = t^{\beta_1} f_{m_1}^{\pm}(ht^{-\Delta}) \quad (4.3.10)$$

où $\Delta = \beta_1 \delta_1$ est l'exposant de "saut" et $f_{m_1}^{\pm}$ une fonction d'échelle universelle, $\pm$ se référant aux deux phases haute et basse température. Nous avons vérifié numériquement ce comportement d'échelle en traçant $m_1 t^{-\beta_1}$ en fonction de $ht^{-\Delta}$ (figure 4.3.6) et le même type de fonction universelle a également été obtenu pour l'aimantation locale en L_{n-1} : $m_{(n-1)} t^{-\beta_{(n-1)}} = f_{m_{(n-1)}}^{\pm}(ht^{-\Delta})$.

On peut noter la qualité des courbes universelles alors que, comme nous le verrons dans la discussion, l'introduction d'un même exposant Δ pour le site de surface et le site en L_{n-1} présente quelques difficultés.

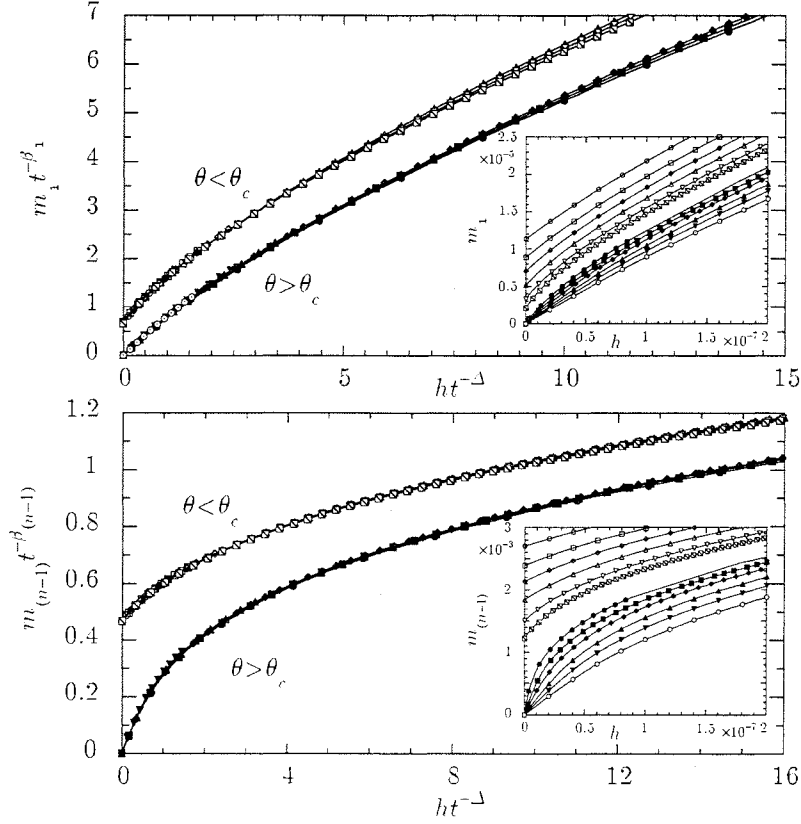


Figure 4.3.6 Equations d'état renormalisées pour l'aimantation de la première couche et du site L_{n-1} pour $r = 2$. Les valeurs des températures sont $\theta = 0.670090, 0.670094, 0.670097, 0.670100, 0.670103, 0.670105$ en-dessous de θ_c et $0.670111, 0.670113, 0.670115, 0.670118, 0.670121, 0.670125$ au-dessus de θ_c . La figure du haut présente les fonctions d'échelle $f_{m_1}^{\pm}$, tandis que la figure du bas concerne les fonctions d'échelle $f_{m_{(n-1)}}^{\pm}$ pour le site L_{n-1} . Les courbes insérées montrent l'aimantation de la première couche et du site L_{n-1} en fonction du champ magnétique de volume.

Les valeurs de δ_1 et $\delta_{(n-1)}$ sont données dans le tableau 4.3.2 et l'équation d'état renormalisée garantit la validité de leur détermination, puisque l'on obtient des courbes qui sont correctement décrites par une même fonction universelle dans chaque phase.

Les comportements de m_s et m_b au point critique permettent d'obtenir les valeurs de δ_s et δ_b , également données dans le tableau 4.3.2. On peut remarquer la faible précision dans la détermination de δ_s , puisque la pente des courbes $\ln m_s$ en fonction de $\ln h$ est très petite lorsque r atteint la valeur non perturbée $r = 0$.

r	surface				volume			
	γ_1	δ_1	γ_s	δ_s	$\gamma_{(n-1)}$	$\delta_{(n-1)}$	γ_b	δ_b
.1	.5013(2)	1.5024(2)	1.498(1)		0.9997(1)	2.9989(1)	1.0005(1)	
.2	.5006(2)	1.5004(2)			0.9993(2)	2.9972(3)		
.3	.4992(2)	1.4977(2)			0.9993(2)	2.9949(9)		
.5	.4958(2)	1.4901(2)	1.493(1)	312(11)	0.9989(2)	2.9895(9)	.99790(2)	2.98136(2)
.8	.487(1)	1.4751(3)	1.486(1)	85(2)	0.9986(3)	2.981(2)		
1.	.4796(2)	1.4641(2)	1.480(2)	53(1)	0.9985(4)	2.9744(9)	.99253(2)	2.93144(2)
1.5	.4568(2)	1.4378(4)			0.9988(7)	2.963(3)		
2.	.4316(2)	1.4135(1)	1.438(2)	16.37(2)	0.999(2)	2.9571(1)	.9792(1)	2.82375(3)
2.5	.412(1)	1.3845(6)			0.9992(9)	2.954(2)		
3.	.388(1)	1.3484(6)	1.394(2)	11.2(2)	0.9988(6)	2.952(2)	.9660(1)	2.7513(2)
3.5	.372(1)	1.3108(5)			0.9986(5)	2.949(2)		
4.	.354(1)	1.2989(4)	1.360(2)	10.01(5)	0.9988(8)	2.948(2)	.9619(5)	2.6976(3)
4.5	.341(1)	1.2571(2)			0.999(1)	2.950(2)		
5.	.328(1)	1.2467(6)	1.330(2)	8.3(4)	0.999(2)	2.953(2)	.9514(2)	2.65938(2)

Tableau 4.3.2 Valeurs numériques des exposants critiques associés aux isothermes critiques et aux susceptibilités. γ_b et δ_b se rapportent au comportement de l'aimantation moyenne m_b . Les valeurs entre parenthèses donnent l'incertitude sur le dernier chiffre.

La susceptibilité sur le premier site $\chi_1 = \frac{\partial m_1}{\partial h}$ s'obtient en dérivant l'équation (4.3.9) par rapport au champ magnétique de volume h . Elle diverge avec un exposant γ_1 lorsque l'on approche du point critique. Numériquement, l'aimantation de la première couche est calculée pour différentes valeurs du champ magnétique de volume (de l'ordre de 10^{-9}) et χ_1 est déduite d'une dérivation discrète (différence finie). On peut obtenir de la même façon la susceptibilité pour le site L_{n-1} : $\chi_{(n-1)} = \partial m_{(n-1)} / \partial h$. Des oscillations log-périodiques apparaissent également pour ces grandeurs et la détermination des exposants peut être faite de la même façon que dans le paragraphe précédent pour l'aimantation. A nouveau, la précision de cette détermination est confirmée par les courbes renormalisées pour la susceptibilité. Par exemple $\chi_{(n-1)} t^{\gamma_{(n-1)}} = f_{\chi_{(n-1)}}^{\pm}(ht^{-\Delta})$, représentée sur la figure 4.3.7, montre bien deux courbes universelles pour $\theta < \theta_c$ et $\theta > \theta_c$.

Les valeurs des exposants sont données dans le tableau 4.3.2 dans lequel figurent aussi γ_s et γ_b , associés aux dérivées de l'aimantation moyenne de surface et de volume.

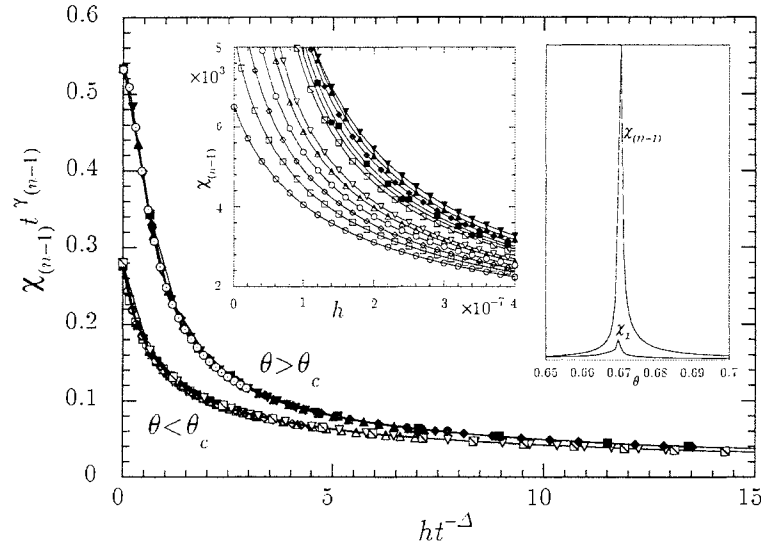


Figure 4.3.7 Susceptibilité locale de volume renormalisée donnant le comportement des fonctions universelles $f_{\chi_{(n-1)}}^{\pm}$ en-dessous et au-dessus de θ_c pour $r = 2$. Les valeurs des températures sont $\theta = 0.670090, 0.670094, 0.670097, 0.670100, 0.670103, 0.670105$ en-dessous de θ_c et $0.670111, 0.670113, 0.670115, 0.670118, 0.670121, 0.670125$ au-dessus de θ_c . Les courbes insérées montrent les comportements de $\chi_{(n-1)}$ en fonction de h pour les mêmes températures (à gauche) et les singularités de $\chi_{(n-1)}$ et χ_1 en fonction de θ en champ nul (à droite).

4. Chaleurs spécifiques

A partir des définitions du paragraphe 2, on rappelle les expressions des énergies libres de surface et de volume :

$$f_s = \frac{1}{2} L_n (\langle f_b \rangle - f_b). \quad (4.4.1)$$

$$f_b = \frac{1}{L_{n-2}} \sum_{j \in L_{n-2}} f_b \{m_j\}. \quad (4.4.2)$$

où $\langle f_b \rangle$ et f_b se comportent comme les densités d'énergies libres de chaînes aperiodiques en conditions de bords libres et conditions périodiques respectivement. Les parties singulières des densités d'énergies libres, avec $h_1 = 0$, sont des fonctions homogènes :

$$f_s(t, h) = t^{2-\alpha_s} f_s(ht^{-\Delta}), \quad (4.4.3)$$

$$f_b(t, h) = t^{2-\alpha_b} f_b(ht^{-\Delta}). \quad (4.4.4)$$

Elles permettent d'obtenir les exposants de la chaleur spécifique de surface et de volume. Les valeurs de α_s et α_b sont simplement déduites des pentes des courbes en log-log de f_s et f_b en fonction de t . Elles sont données dans le tableau 4.4.1.

r	α_s	α_b
.1	0.51496(7)	-0.00031(1)
.5	0.50112(5)	-0.00733(1)
.8	0.48448(5)	-0.01709(1)
1.	0.47075(4)	-0.02462(1)
2.	0.40265(1)	-0.05924(1)
3.	0.35077(4)	-0.07813(1)
4.	0.31516(3)	-0.08579(1)
5.	0.28935(6)	-0.08805(1)

Tableau 4.4.1 Valeurs numériques des exposants critiques de la chaleur spécifique. Les valeurs entre parenthèses donnent l'incertitude sur le dernier chiffre.

On a représenté sur la figure 4.4.1 l'amplitude de la densité d'énergie libre de volume $f_b t^{\alpha_b - 2}$ en fonction de $\ln t^{-\nu}$ avec $r = 2$, qui présente le même type de comportement que l'aimantation renormalisée et permet de confirmer la valeur de l'exposant α_b . On peut noter que la discontinuité de la chaleur spécifique de volume disparaît pour le système perturbé pour lequel la singularité est adoucie, puisque l'exposant α_b est négatif.

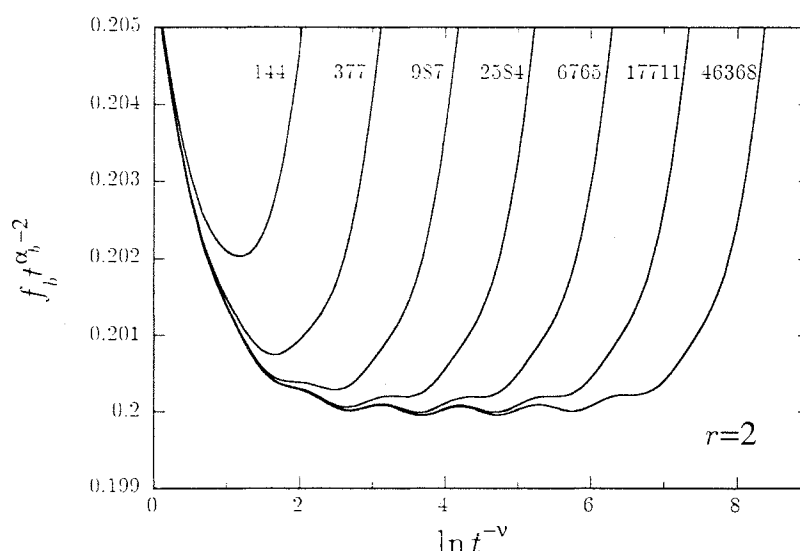


Figure 4.4.1 Oscillations log-périodiques de l'amplitude de la densité d'énergie libre de volume $f_b t^{\alpha_b - 2}$ en fonction du logarithme de la longueur de corrélation $\ln t^{-\nu}$.

5. Discussion

Nous avons calculé numériquement plusieurs exposants critiques de surface et de volume pour un système aperiodique marginal dans le cadre d'une théorie de champ moyen. Le comportement non universel attendu amène à des exposants qui varient de façon continue avec l'amplitude de la perturbation r . Les variations de ces exposants sont représentées sur la figure 4.5.1 en fonction de r .

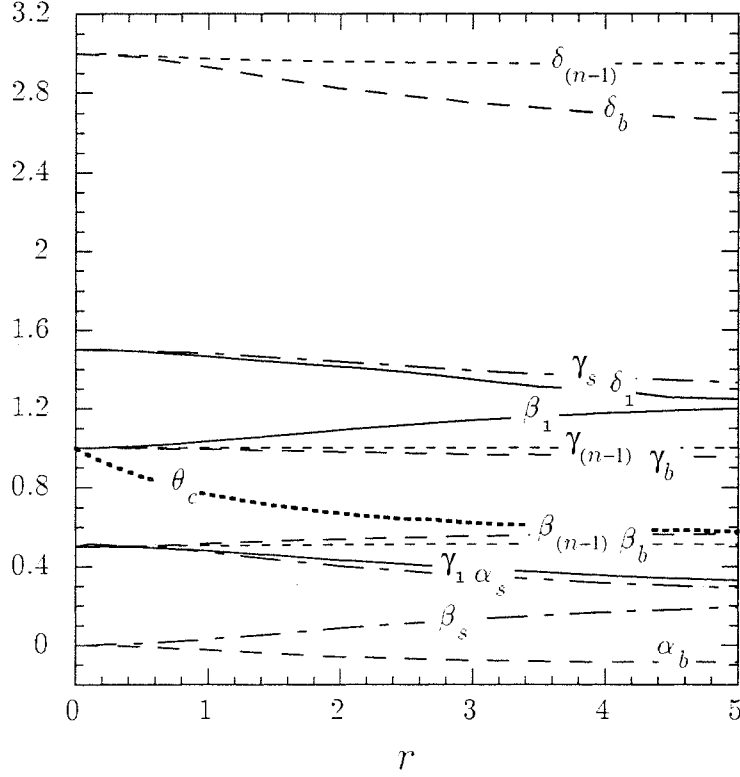


Figure 4.5.1 Variation des exposants de surface et de volume avec l'amplitude de la perturbation r (exposants de la première couche : —, exposants de surface : — · —, exposants locaux de volume : ----, exposants moyens de volume : — — —).

De plus, nous avons analysé les résultats en faisant appel à des fonctions d'échelle. Celles-ci font parfois intervenir le champ magnétique de volume h et l'exposant de "saut" $\Delta = \beta\delta = y_h/y_t$. C'est le cas, par exemple, des fonctions universelles représentées sur les figures 4.3.6 et 4.3.7.

Il faut toutefois noter que la comparaison, dans le tableau 4.3.1, entre l'exposant de volume β_b et l'exposant local $\beta_{(n-1)}$ montre clairement qu'il n'est pas possible, dans le cas de ce système aperiodique, de définir un exposant de volume unique. Cela avait déjà été suggéré par la possibilité de réaliser une renormalisation locale des profils avec des exposants dépendant du site considéré. Cela signifie donc

que l'aimantation de volume est susceptible de présenter un comportement de multiscaling, analogue à celui que l'on rencontre dans le modèle d'Ising, ce qui interdit d'assigner une valeur définie à la dimension anormale associée au champ magnétique de volume y_h . Les fonctions universelles représentées sur les figures 4.3.6 et 4.3.7 ne donnent alors qu'une description approximative du comportement d'échelle de la chaîne aperiodique, et leur qualité doit être attribuée à la faible variation des exposants avec l'amplitude de la perturbation r . Les fonctions d'échelle faisant exclusivement intervenir la température ou un champ magnétique local h_1 , sont en revanche parfaitement légitimes. C'est le cas par exemple pour les densités d'énergie libre ou les chaleurs spécifiques.

Par ailleurs, les lois d'échelle faisant intervenir la dimension du système sont satisfaites, dans une théorie de champ moyen, lorsque d est égale à la dimension critique supérieure d_c du modèle en ϕ^4 correspondant. De même que pour le modèle d'Ising bidimensionnel avec une aperiodicité marginale, on prévoit un comportement fortement anisotrope dans le modèle gaussien. Ce comportement devrait se traduire par une variation de la dimension critique supérieure $d_c(r)$ avec l'amplitude de la perturbation, la valeur habituelle $d_c = 4$ correspondant au système isotrope.

Les relations "d'hyperscaling" doivent alors être satisfaites par les exposants de champ moyen pour une valeur de d égale à la dimension critique supérieure $d_c(r)$:

$$2 - \alpha_b = \nu d_c(r) \quad (4.5.1a)$$

$$2 - \alpha_s = \nu[d_c(r) - 1]. \quad (4.5.1b)$$

On peut utiliser ces relations pour estimer la valeur de $d_c(r)$ pour ce système aperiodique. Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 4.5.1.

r	$(2 - \alpha_b)/\nu$	$(2 - \alpha_s)/\nu + 1$
.1	4.00	3.97
.5	4.01	4.00
.8	4.03	4.03
1	4.05	4.06
2	4.12	4.19
3	4.16	4.28
4	4.17	4.37
5	4.18	4.42

Tableau 4.5.1 Valeurs numériques de la dimension critique supérieure $d_c(r)$ déduite des relations "d'hyperscaling".

Les deux déterminations de $d_c(r)$ sont en bon accord pour les faibles perturbations. Les résultats suggèrent que la précision dans la détermination des exposants a probablement été surestimée, mais la variation de $d_c(r)$ avec l'amplitude

de la perturbation est nette. Elle doit être reliée à une forte anisotropie marginale dans le modèle en ϕ^4 correspondant.

Ces résultats peuvent être interprétés à partir d'un schéma de renormalisation. Dans le cas du modèle homogène, la dimension $y_g = 4 - d$ du terme en ϕ^4 est pertinente au point fixe gaussien (noté G) lorsque $d < 4$. Les propriétés critiques du système sont alors gouvernées par un point fixe non trivial (noté NT) où l'exposant de la longueur de corrélation ν est supérieur à $1/2$. A la dimension critique supérieure $d_c = 4$, les deux points fixes sont confondus et échangent leurs stabilités, puisque pour $d > 4$, c'est le point fixe gaussien qui devient stable, g constituant une variable non pertinente dangereuse qui brise la relation d'"hyperscaling" pour le modèle en ϕ^4 . La compétition entre ces deux points fixes pour le modèle homogène ($r = 0$) est représentée dans la projection (g, r) de l'espace des paramètres sur la figure 4.5.2.

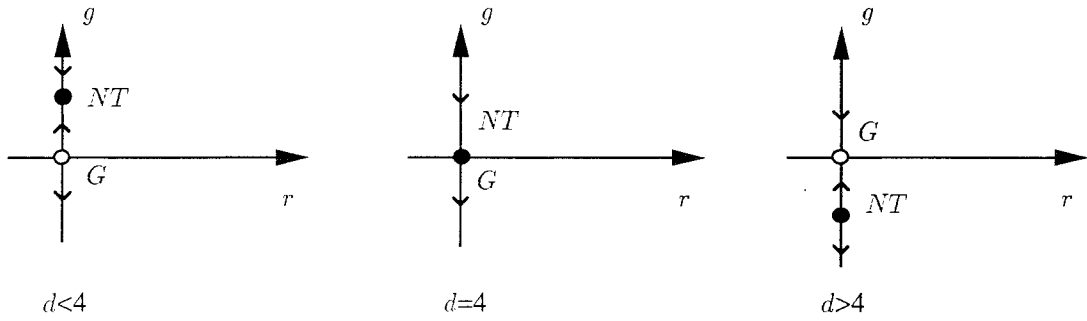


Figure 4.5.2 Echange des stabilités entre point fixe gaussien (G) et point fixe non trivial (NT) en fonction de la dimension du système.

Dans le cas du modèle aperiodique ($r \neq 0$), lorsque $d < 4$, la perturbation de Fibonacci est non pertinente pour le modèle en ϕ^4 puisque $\nu > 1/2$. Le modèle gaussien, en revanche, est caractérisé à toute dimension par un exposant de la longueur de corrélation égal à $1/2$: la séquence de Fibonacci constitue donc toujours une perturbation marginale et l'espace des paramètres présente une ligne de points fixes en $g = 0$. Le comportement critique est alors déterminé par le point fixe non trivial, stable.

Lorsque $d = 4$, l'exposant ν du modèle en ϕ^4 prend la valeur $1/2$, la perturbation de Fibonacci devient également marginale et la ligne de points fixes correspondante rejoint celle du modèle gaussien en $r = 0$. On attend effectivement une ligne de points fixes non triviale dans l'espace des paramètres si la perturbation aperiodique n'est ni marginalement pertinente ni marginalement non pertinente, ce que nous supposons ici. Du fait de la perturbation marginale, on a donc apparition d'une forte anisotropie dans les propriétés critiques gouvernées par la ligne de points fixes non triviale, stable, comme dans le cas homogène.

Enfin, lorsque $d > 4$, on peut envisager deux possibilités. Dans le premier cas, l'exposant ν du modèle en ϕ^4 , continuant à décroître, la perturbation de Fibonacci devient pertinente. L'exposant ν remonterait alors à sa valeur gaussienne de manière discontinue à la dimension critique supérieure ce qui semble peu vraisemblable. Dans le deuxième cas, l'exposant ν du modèle en ϕ^4 reste égal à $1/2$. Le système

aperiodique est toujours décrit par une ligne de points fixes avec échange de stabilité avec la ligne de points fixes du modèle gaussien pour r inférieur à une valeur critique $r_c(d)$. Au-dessus de $r_c(d)$, la ligne de points fixes du modèle en ϕ^4 reste stable et la dimension critique supérieure est telle que $d = d_c$ pour $r = r_c(d)$.

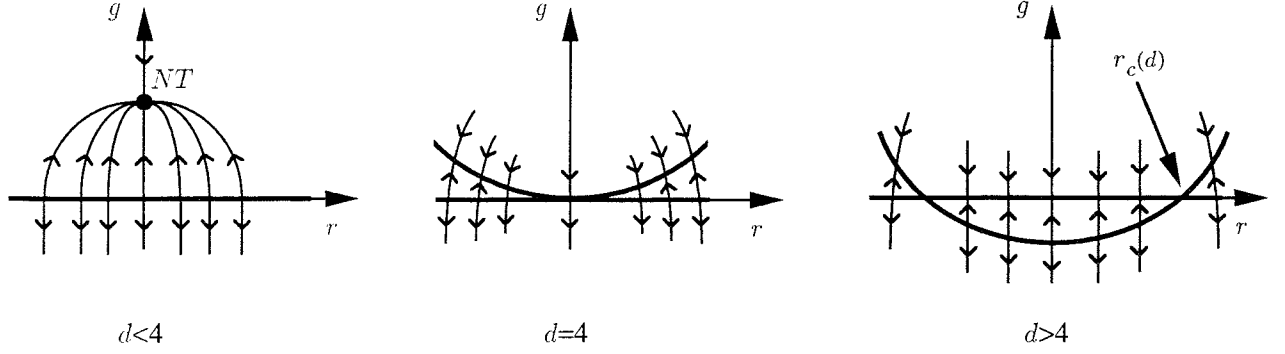


Figure 4.5.3 Conjecture pour le schéma de renormalisation pour le modèle aperiodique. Les courbes en traits épais correspondent aux lignes de points fixes du modèle gaussien lorsque $g = 0$ et du modèle en ϕ^4 lorsque $g \neq 0$. Lorsque $d > 4$, les deux lignes de points fixes se croisent en $r_c(d)$ tel que $d = d_c$ pour un système où l'amplitude de la modulation est $r = r_c(d)$.

Ce mécanisme avec croisement de lignes de points fixes assure la continuité des exposants critiques et garantit que, à mesure que la dimension spatiale augmente, la ligne de points fixes gaussienne est stable sur une plage de plus en plus étendue de valeurs de r . Ces trois situations sont représentées sur la figure 4.5.3.

Conclusion

L'étude de l'influence de perturbations diverses sur les propriétés critiques s'est considérablement développée depuis quelques décennies. En particulier, l'étude théorique des systèmes quasi-périodiques ou, plus généralement, apériodiques, a suscité un grand intérêt depuis la découverte des quasi-cristaux. L'enjeu consiste à identifier le rôle de perturbations apériodiques dans les propriétés critiques et à fournir une meilleure compréhension des propriétés des systèmes désordonnés.

Ce n'est que très récemment que l'influence de l'apériodicité sur le comportement critique a été qualitativement comprise grâce à un travail de Luck généralisant au cas de perturbations apériodiques le critère de Harris établi pour les systèmes désordonnés.

Par ailleurs, la possibilité de réaliser expérimentalement des multicouches apériodiques qui pourraient constituer une nouvelle classe de structures artificielles présentant des propriétés de surface et de volume intéressantes nous a conduit à aborder leur étude. En effet, bien que des super-réseaux apériodiques aient déjà été réalisés par épitaxie par jet moléculaire (MAJKRZAK *et al* 1991), aucune étude expérimentale n'a été menée jusqu'à présent du point de vue des phénomènes critiques. L'objet de cette thèse était donc de déterminer les propriétés critiques de systèmes perturbés par des séquences apériodiques marginales de volume.

Ainsi, nous avons déterminé de façon analytique l'aimantation de surface du modèle d'Ising en couches perturbé par des séquences apériodiques dans le cadre des problèmes de liaison et de site. La première situation correspond à une distribution apériodique des interactions d'échange transmises entre atomes magnétiques par l'intermédiaire des électrons d'atomes non magnétiques : échange indirect ou super-échange. Dans la seconde en revanche, les couches elles-mêmes sont distribuées selon la séquence apériodique et interagissent via un mécanisme d'échange direct. Le critère de Luck, appliqué au problème de liaison, a été étendu au problème de site pour discuter la pertinence des perturbations. Nous avons ainsi montré que, pour certaines perturbations apériodiques, l'apériodicité de site pouvait être plus dangereuse que celle de liaison, la première conduisant parfois à des comportements

marginaux là où la seconde était non pertinente.

Nous avons ensuite complété notre étude des perturbations apériodiques marginales du modèle d'Ising par la détermination de plusieurs propriétés critiques de surface et de volume. Nous avons montré en particulier que l'apériodicité induit un comportement d'échelle anisotrope et nous avons identifié l'exposant d'anisotropie z à la somme des dimensions anormales de l'aimantation locale sur les deux surfaces du système $x_{ms} + \bar{x}_{ms}$. Le comportement d'échelle anisotrope a par ailleurs été vérifié numériquement pour plusieurs propriétés critiques de surface et de volume. On peut noter aussi que l'exposant d'anisotropie z a depuis été calculé analytiquement par Iglói et Turban (IGLÓI et TURBAN 1996), confirmant la conjecture proposée ici.

Nous avons également déterminé l'aimantation de surface de multicouches apériodiques et mis en évidence le "cross-over" entre point fixe homogène et point fixe apériodique. Nous avons vérifié le comportement anisotrope de ces systèmes multicouches à partir de l'étude de la longueur de corrélation.

L'intérêt de ces systèmes réside dans le fait que l'anisotropie peut être contrôlée, soit par l'amplitude de la modulation apériodique, soit par la répartition des couplages perturbés sur le système, c'est-à-dire par la séquence apériodique elle-même, soit enfin par l'épaisseur des couches dans le cas des séquences apériodiques en multicouches. Ceci constitue le résultat majeur de notre travail. Il est particulièrement intéressant à noter, puisque les systèmes dans lesquels l'anisotropie peut être contrôlée sont rares. On peut mentionner les systèmes bidimensionnels confinés en géométrie parabolique (IGLÓI, PESCHEL et TURBAN 1993), certains pouvant présenter des propriétés locales anisotropes comme c'est le cas pour les polymères (TURBAN et BERCHE 1993).

Il faut néanmoins remarquer que l'éventualité d'un comportement critique anisotrope est conditionnée par la possibilité de trouver une perturbation marginale en accord avec le critère de Luck. Si c'est assez facile pour le modèle d'Ising bidimensionnel, pour lequel l'exposant de la longueur de corrélation valant 1, il suffit d'obtenir une séquence caractérisée par un exposant de divagation nul, la situation semble moins évidente pour les systèmes tridimensionnels, caractérisés par des exposants non fractionnaires. Ceci amène à s'intéresser aux perturbations marginales dans le cadre d'une théorie de champ moyen, susceptible de décrire les systèmes avec interactions à longue portée. L'exposant ν étant cette fois égal à $1/2$, c'est la séquence de Fibonacci qui remplit alors les conditions requises. Le calcul des propriétés critiques est cependant plus délicat que pour le modèle d'Ising, puisque les équations d'état sont non linéaires. Nous avons déterminé numériquement les exposants critiques de surface et de volume de l'aimantation, des isothermes critiques, de la susceptibilité et de la chaleur spécifique. Ces résultats sont compatibles avec une augmentation continue de la dimension critique supérieure avec l'amplitude de la perturbation, conséquence de la forte anisotropie marginale du modèle en ϕ^4 .

Pour compléter ce travail, il semblerait utile d'étudier la possibilité d'avoir un comportement multifractal pour l'aimantation de volume comme il est suggéré, dans les chapitres 3 et 4. Par ailleurs, le cas des perturbations apériodiques pertinentes nécessiterait également d'être étudié de façon détaillée. La réalisation expérimentale de multicouches apériodiques constituerait enfin un prolongement

très intéressant. Si des perturbations marginales sont difficiles à obtenir pour un système tridimensionnel de la classe d'universalité d'Ising par exemple, des cas de perturbations pertinentes sont connus. Celles-ci devraient donner lieu à des transitions de surface au-dessus de la température critique de volume ou à des singularités essentielles, ces deux situations pouvant probablement être aisément discernables d'une transition du second ordre ordinaire en surface. Il ne semble donc pas exclu de mettre en évidence expérimentalement l'influence de l'apériodicité sur les phénomènes critiques.

Liste des figures

	Page
1.2.1 Trajectoires de renormalisation en présence de champs d'échelle pertinents et non pertinents.	15
1.2.2 Renormalisation vers une ligne de points fixes lorsqu'il existe une variable marginale.	15
1.3.1 Modèle de Lenz-Ising à $2d$ sur réseau carré.	20
1.3.2 Diagramme de phase du modèle d'Ising bidimensionnel dans l'espace des paramètres.	20
1.3.3 Aimantation spontanée et chaleur spécifique du modèle d'Ising homogène à deux dimensions.	21
1.3.4 Modèle d'Ising homogène anisotrope et la chaîne quantique correspondante dans la limite anisotrope extrême.	22
1.3.5 Diagramme de phase du modèle d'Ising dans la limite anisotrope extrême.	24
1.3.6 Aimantation de surface et de volume du modèle d'Ising en champ transverse homogène en fonction de l'analogie de la température.	31
1.4.1 Réseau de McCoy-Wu : distribution de couplages aléatoires horizontaux J_i .	35
2.2.1 Modèle d'Ising en couches aperiodiques et la chaîne quantique d'Ising correspondante dans la limite anisotrope extrême.	39
2.2.2 Aimantation de surface pour la séquence de Thue-Morse en fonction de $1 - t = (\lambda_c/\lambda)^2$ pour différentes valeurs de r .	45
2.2.3 Aimantation de surface pour la séquence "doublement de période".	46
2.2.4 Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s pour la séquence marginale "doublement de période" en fonction du rapport des couplages r .	47
2.2.5 Aimantation de surface pour la séquence de Rudin-Shapiro.	48
2.2.6 Variation des fluctuations des couplages en fonction de la taille de la chaîne quantique (en log-log) pour les séquences de Fibonacci (non pertinente), "doublement de période" (marginale) et Rudin-Shapiro (pertinente).	49

2.2.7	Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s pour la séquence "pliage ternaire" en fonction du rapport des couplages r .	51
2.2.8	Illustration du procédé permettant d'obtenir la séquence "pliage de papier".	52
2.2.9	Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s pour la séquence "pliage de papier" en fonction du rapport des couplages r .	54
2.3.1	Représentation schématique des problèmes de liaison et de site.	55
2.3.2	Dépendance en température de l'aimantation de surface pour la séquence de Thue-Morse dans le cadre du problème de site.	62
2.3.3	Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s en fonction de r/s pour la séquence de Thue-Morse dans le cadre du problème de site.	63
2.3.4	Dépendance en température de l'aimantation de surface pour la séquence "doublement de période" dans le cadre du problème de site.	65
2.3.5	Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s en fonction de r^2/s pour la séquence "doublement de période" dans le cadre du problème de site.	66
2.3.6	Dépendance en température de l'aimantation de surface pour la séquence "pliage ternaire" dans le cadre du problème de site.	67
3.2.1	Variation des dimensions anormales x_{ms} en fonction du rapport des couplages r pour les séquences marginales "doublement de période", "pliage de papier" et "pliage ternaire".	71
3.2.2	Variation de l'exposant de l'énergie de surface x_{es} en fonction du rapport des couplages r pour les séquences "doublement de période", "pliage de papier" et "pliage ternaire".	72
3.2.3	Courbe en log-log de la première énergie d'excitation ε_1 en fonction de la taille L de la chaîne pour la séquence "pliage de papier" avec des conditions périodiques et pour différentes valeurs de r .	73
3.2.4	Variation de l'exposant d'anisotropie z en fonction du rapport des couplages r pour les séquences "doublement de période", "pliage de papier" et "pliage ternaire".	76
3.2.5	Vérification du comportement d'échelle des excitations et de leurs dérivées par rapport à la température pour la séquence "pliage de papier" avec $r = 2$ et $\tilde{5}$ et $L = 2^8, 2^9$ et 2^{10} .	77
3.2.6	Vérification du comportement anisotrope par effets de taille finie de la densité d'énergie libre pour la séquence "pliage ternaire" avec $m = 3$ et des chaînes de taille L variant de 3 à 3^{10} .	79
3.2.7	Fonctions d'échelle pour la fonction de corrélation de surface spin-spin pour les séquences "doublement de période", "pliage de papier" et "pliage ternaire".	81
3.2.8	Fonctions d'échelle pour la fonction de corrélation de surface énergie-énergie pour les trois séquences.	81

3.2.9	Amplitude de la densité d'énergie pour les trois séquences avec les rapports de couplages $r = 2$ et 5 .	84
3.2.10	Exposant magnétique de volume obtenu par effets de taille finie en fonction de l'amplitude de la modulation aperiodique pour différentes valeurs du rapport l/L .	86
3.2.11	Variation de l'exposant x_m sur le site central de la chaîne pour la séquence marginale "doublement de période" en fonction de l'amplitude de la perturbation locale s pour $r = 2$ et 5 .	87
3.2.12	Profil de l'aimantation locale renormalisée pour la séquence "doublement de période" avec $L = 2^6, 2^8$ et 2^{10} et $r = 2$ et 5 .	88
3.2.13	Profil de l'aimantation locale renormalisée pour la séquence "pliage de papier" avec $L = 2^8, 2^9$ et 2^{10} et $r = 2$ et 5 .	89
3.2.14	Courbe en log-log de l'aimantation locale $m(l)$ en fonction de la température réduite t sur des sites particuliers pour la séquence "doublement de période" avec $r = 5$ et $L = 2^{10}$.	90
3.3.1	Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s^{multi} en fonction de r pour la multicouche aperiodique "doublement de période".	97
3.3.2	Illustration du "cross-over" entre le point fixe homogène et le point fixe aperiodique pour la séquence "doublement de période".	97
3.3.3	Illustration du "cross-over" entre le point fixe homogène ($\beta_s = 1/2$) et le point fixe aperiodique (ici, $\beta_s^{\text{multi}} = 2$) pour la séquence "doublement de période".	98
3.3.4	Courbes universelles pour la séquence "doublement de période".	99
3.3.5	Fonction $f(\varepsilon)$ pour $L = 2^4, p = q = 2, r = 1.1$ et pour plusieurs valeurs de λ dans la phase ordonnée.	100
3.3.6	A gauche : variation en log-log de la longueur de corrélation dans la direction temporelle $\xi_{ }$ en fonction de la température réduite pour la séquence "doublement de période" pour une chaîne de taille $L = 2^6$ avec $r = 0.9$ et $p = 10, 20$ et 30 . A droite : variation en log-log des deux premières excitations au point critique en fonction du nombre de couches pL du système pour $r = 2, p = 2$ et $r = 3, p = 3$.	101
3.3.7	Variation de l'exposant de l'aimantation de surface β_s^{multi} en fonction de r pour la multicouche aperiodique "pliage de papier".	103
3.3.8	Courbes universelles pour la séquence "pliage de papier".	104
4.1.1	Profils du paramètre d'ordre pour les différentes catégories de transitions en surface.	109
4.2.1	Chaîne de Fibonacci de 21 sites. L'aimantation locale de volume, pour une chaîne de L_n sites obtenue après n itérations est calculée sur le site L_{n-1} , ici le site 13.	113

4.2.2	Allure caractéristique du profil du paramètre d'ordre pour un système perturbé, montrant l'aimantation de la première couche m_1 et l'aimantation locale de volume $m_{(n-1)}$, ainsi que les valeurs moyennes m_b et $\langle m_j \rangle$.	113
4.3.1	Profils du paramètre d'ordre pour une perturbation $r = 2$ et trois valeurs de la température inférieures à la température critique. La taille de la chaîne est $L = 144$.	115
4.3.2	Tracé en log-log de l'aimantation calculée sur le premier site et sur le site L_{n-1} en fonction de l'écart à la température critique $t = \mu_c - \mu$ pour deux valeurs de l'amplitude de la perturbation r et pour différentes tailles de la chaîne de 144 à 46368.	117
4.3.3	Oscillations log-périodiques de l'aimantation renormalisée de la première couche $m_1 t^{-\beta_1}$ en fonction du logarithme de la longueur de corrélation $\ln t^{-\nu}$. La courbe insérée montre les oscillations de l'aimantation renormalisée de la première couche pour différentes valeurs de r après soustraction d'une amplitude constante.	118
4.3.4	Fonction d'échelle $m_1 t^{-\beta_1}$ en fonction de ξ/L pour $r = 0.2$ et $L = 144, 377, 987, 2584, 6765, 17711$ et 46368.	119
4.3.5	Tracé en log-log des aimantations moyennes de volume et de surface en fonction de l'écart à la température critique pour $L = 46368$ et $r = 0.1, 1, 3, 5$.	120
4.3.6	Equations d'état renormalisées pour l'aimantation de la première couche et du site L_{n-1} pour $r = 2$. La figure du haut présente les fonctions d'échelle $f_{m_1}^\pm$, tandis que la figure du bas concerne les fonctions d'échelle $f_{m_{n-1}}^\pm$ pour le site L_{n-1} . Les courbes insérées montrent l'aimantation de la première couche et du site L_{n-1} en fonction du champ magnétique de volume.	122
4.3.7	Susceptibilité locale de volume renormalisée donnant le comportement des fonctions universelles $f_{\chi_{(n-1)}}^\pm$ en-dessous et au-dessus de θ_c pour $r = 2$. Les courbes insérées montrent les comportements de $\chi_{(n-1)}$ en fonction de h pour les mêmes températures et les singularités de $\chi_{(n-1)}$ et χ_1 en fonction de θ en champ nul.	124
4.4.1	Oscillations log-périodiques de l'amplitude de la densité d'énergie libre de volume $f_b t^{\alpha_b-2}$ en fonction du logarithme de la longueur de corrélation $\ln t^{-\nu}$.	125
4.5.1	Variation des exposants de surface et de volume avec l'amplitude de la perturbation r .	126
4.5.2	Echange des stabilités entre point fixe gaussien (G) et point fixe non trivial (NT) en fonction de la dimension du système.	128
4.5.3	Conjecture pour le schéma de renormalisation pour le modèle apériodique. Les courbes en traits épais correspondent aux lignes de points fixes du modèle gaussien lorsque $g = 0$ et du modèle en ϕ^4 lorsque $g \neq 0$.	129

Liste des tableaux

	Page
1.1.1 Définition du comportement des grandeurs thermodynamiques au voisinage du point critique.	12
1.2.1 Définition des exposants critiques à partir de la dimension du système d et des dimensions des champs d'échelle y_t et y_h .	16
1.3.1 Tableau de correspondance entre mécanique quantique et physique statistique.	25
2.3.1 Coefficients de l'équation séculaire (2.3.4) avec les valeurs propres correspondantes pour des substitutions commençant par différentes lettres.	57
2.3.2 Comparaison entre les problèmes de liaison et de site pour quelques séquences typiques. Les deux dernières lignes se réfèrent au modèle d'Ising à deux dimensions.	58
3.2.1 Exposants de l'énergie de surface pour les trois séquences marginales étudiées en fonction du rapport des couplages r .	72
3.2.2 Exposants de la première excitation et de ses dérivées par rapport à t et à t_s pour les trois séquences avec conditions de bords libres.	75
3.2.3 Exposant de la chaleur spécifique pour les trois séquences marginales étudiées en fonction du rapport des couplages r .	80
3.2.4 Exposants des fonctions de corrélation de surface spin-spin déduits des pentes des courbes log-log au point critique.	82
3.2.5 Exposants des fonctions de corrélation de surface énergie-énergie déduits des pentes des courbes log-log au point critique.	82
3.2.6 Exposants de l'énergie de volume pour les trois séquences marginales étudiées en fonction du rapport des couplages r .	84
3.2.7 Environnements des sites étudiés.	91
3.3.1 Exposants de la longueur de corrélation dans la direction temporelle pour la séquence "doublement de période" en fonction du rapport des couplages r et du nombre de couches $p = q$.	102

3.3.2	Exposants de la longueur de corrélation, de l'aimantation de surface et de la densité d'énergie de surface pour la séquence "doublement de période" en fonction du rapport des couplages r et du nombre de couches $p = q$.	102
4.2.1	Définition des grandeurs thermodynamiques de volume et de surface en fonction des densités d'énergie libre de volume (f_b) et de surface (f_s).	112
4.3.1	Valeurs numériques de la température critique et des exposants magnétiques pour les aimantations de surface et de volume.	119
4.3.2	Valeurs numériques des exposants critiques associés aux isothermes critiques et aux susceptibilités.	123
4.4.1	Valeurs numériques des exposants critiques de la chaleur spécifique.	125
4.5.1	Valeurs numériques de la dimension critique supérieure $d_c(r)$ déduite des relations "d'hyperscaling".	127

Références bibliographiques

- AU-YANG H., MCCOY B.M. (1974) *Phys. Rev. B*, **10**, 886.
- BAAKE M., CHASELON P., SCHLOTTMANN M. (1989) *Nucl. Phys. B*, **314**, 625.
- BARBER M.N. (1973) *Phys. Rev. B*, **8**, 407.
- BARBER M.N. (1983) *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 8, ed. Domb C. and Green M.S. (London : Academic Press) p 145.
- BARIEV R.Z. (1979) *Sov. Phys. JETP*, **50**, 613.
- BELAVIN A.A., POLYAKOV A.M., ZAMOLODCHIKOV A.B. (1984) *Nucl. Phys.*, **B241**, 333.
- BENZA V.G. (1989) *Europhys. Lett.*, **8**, 321.
- BENZA V.G., KOLÁR M., ALI M.K. (1990) *Phys. Rev. B*, **41**, 9578.
- BERCHE B. (1991) *Thèse de doctorat*. Université de Nancy I.
- BERCHE B., BERCHE P.E., HENKEL M., IGLÓI F., LAJKÓ P., MORGAN S., TURBAN L. (1995) *J. Phys. A*, **28**, L165.
- BERCHE P.E., BERCHE B., TURBAN L. (1996) *J. Physique I (France)*, **6**, 621.
- BERCHE P.E., BERCHE B. (1996) *A paraître dans : J. Phys. A*.
- BETHE H. (1931) *Z. Phys.*, **71**, 205.
- BHATTACHARJEE S.M. (1994) *Mod. Phys. Lett. B*, **8**, 127.
- BINDER K., HOHENBERG P.C. (1972) *Phys. Rev. B*, **6**, 3461.
- BINDER K. (1983) *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 8, ed. Domb C. and Green M.S. (London : Academic Press) p 1.
- BINDER K. (1985) *Z. Phys. B*, **61**, 13.
- BINDER K., NAUENBERG M., PRIVMAN V., YOUNG A.P. (1985) *Phys. Rev. B*, **31**, 1498.
- BINDER K., WANG J.S. (1989) *J. Stat. Phys.*, **55**, 87.
- BOGOLJUBOV N.N. (1958) *Sov. Phys. JETP*, **34**, 41.
- BRAY A.J., MOORE M.A. (1977a) *J. Phys. A*, **10**, 1927.
- BRAY A.J., MOORE M.A. (1977b) *Phys. Rev. Lett.*, **38**, 1046.
- BURKHARDT T.W. (1984) *Surface Critical Phenomena in Systems with a Bulk Phase Transition. Proceedings of the Winter School Karpacz, Poland*.

- CARDY J.L. (1984) *Nucl. Phys.*, **B240**, [FS 12], 514.
- CECCATTO H.A. (1989) *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 203.
- CHRISTE P., HENKEL M. (1993) *Introduction to Conformal Invariance and its Applications to Critical Phenomena* (Berlin : Springer).
- COLLET P., ECKMANN J.P. (1980) *Iterated Maps on the Interval as Dynamical Systems* (Boston : Birkhäuser).
- DEKKING M., MENDÈS-FRANCE M., VAN DER POORTEN A. (1983a) *Math. Intelligencer*, **4**, 130.
- DEKKING M., MENDÈS-FRANCE M., VAN DER POORTEN A. (1983b) *Math. Intelligencer*, **4**, 190.
- DIEHL H.W., DIETRICH S. (1981) *Z. Phys. B*, **42**, 65.
- DIEHL H.W. (1982) *J. Appl. Phys.*, **53**, 7914.
- DOMB C., HUNTER D.L. (1965) *Proc. Phys. Soc.*, **86**, 1147.
- DOMB C. (1972) *J. Phys. C*, **5**, 1399.
- DORIA M.M., SATIJA I.I. (1988) *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 444.
- DORIA M.M., NORI F., SATIJA I.I. (1989) *Phys. Rev. B*, **39**, 6802.
- DUMONT J.M. (1990) *Number Theory and Physics. Springer Proc. Phys.*, vol. 47, ed. Luck J.M., Moussa P. and Waldschmidt M. (Berlin : Springer) p 185.
- DUNEAU M., DUNLOP F., OGUEY C. (1993) *J. Phys. A*, **26**, 2791.
- FERDINAND A.E., FISHER M.E. (1969) *Phys. Rev.*, **185**, 832.
- FEYNMAN R.P. (1948) *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367.
- FISHER M.E. (1966) *Phys. Rev. Lett.*, **16**, 11.
- FISHER M.E., FERDINAND A.E. (1967) *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 169.
- FISHER M.E. (1971) *Critical Phenomena. Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course 51* ed. Green M.S. (New York : Academic Press) p 1.
- FISHER M.E. (1973) *J. Vac. Sci. Technol.*, **10**, 665.
- FRADKIN E., SUSSKIND L. (1978) *Phys. Rev. D*, **17**, 2637.
- FRIEDAN D., QIU Z., SHENKER S.H. (1984) *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1575.
- GARG A., LEVINE D. (1987) *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1683.
- GINZBURG V.L., LANDAU L.D. (1950) *Collected Papers of Landau L.D.* ed. Ter Haar D. (New York : Gordon and Breach, 1965) p 546.
- GINZBURG V.L., PITAEVSKII L.P. (1958) *Sov. Phys. JETP*, **34**, 858.
- GODRÈCHE C., LUCK J.M., ORLAND H.J. (1986) *J. Stat. Phys.*, **45**, 777.
- GODRÈCHE C., LUCK J.M. (1990) *J. Phys. A*, **23**, 3769.
- GODRÈCHE C., LUCK J.M. (1992) *Phys. Rev. B*, **45**, 176.
- GOLDENFELD N. (1992) *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group. Frontiers in Physics*, vol 85, (Reading, Mass. : Addison-Wesley).
- GREST G.S., SAK J. (1978) *Phys. Rev. B*, **17**, 3607.
- GRIFFITHS R.B. (1970) *Phys. Rev. Lett.*, **24**, 1479.
- GRIMM U., BAAKE M. (1996) *cond-mat/9604116 preprint*.
- GRINSTEIN G., LUTHER A. (1976) *Phys. Rev. B*, **13**, 1329.
- GUIMARÃES L.G., DRUGOWICH DE FELÍCIO J.R. (1986) *J. Phys. A*, **19**, L341.

- GUYOT P., KRAMER P., DE BOISSIEU M. (1991) *Rep. Prog. Phys.*, **54**, 1373.
- HAMER C.J., BARBER M.N. (1980) *J. Phys. A*, **13**, L169.
- HAMER C.J., BARBER M.N. (1981) *J. Phys. A*, **14**, 241.
- HARRIS A.B. (1974) *J. Phys. C*, **7**, 1671.
- HARRIS A.B., LUBENSKY T.C. (1974) *Phys. Rev. Lett.*, **33**, 1540.
- HENKEL M., SCHÜTZ G. (1988) *J. Phys. A*, **21**, 2617.
- HENKEL M. (1992) *Int. J. Mod. Phys. C*, **3**, 1011.
- HENKEL M., PATKÓS A. (1992) *J. Phys. A*, **25**, 5223.
- HENKEL M. (1994) *J. Stat. Phys.*, **75**, 1023.
- HENLEY C.R. (1987) *Comment Cond. Matter Phys.*, **13**, 59.
- HENLEY C.R., LIPOWSKY R. (1987) *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1679.
- HILHORST H.J., VAN LEEUWEN J.M.J. (1981) *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1188.
- HIRAMOTO H., KOHMOTO M. (1992) *Int. J. Mod. Phys. B*, **6**, 281.
- HORNREICH R.M., LUBAN M., SHTRIKMAN S. (1975) *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1678.
- HORNREICH R.M., BRUCE A.D. (1978) *J. Phys. A*, **11**, 595.
- IGLÓI F. (1986) *J. Phys. A*, **19**, 3077.
- IGLÓI F. (1988) *J. Phys. A*, **21**, L911.
- IGLÓI F. (1993) *J. Phys. A*, **26**, L703.
- IGLÓI F., PESCHEL I., TURBAN L. (1993) *Adv. Phys.*, **42**, 683.
- IGLÓI F., TURBAN L. (1994) *Europhys. Lett.*, **27** (2), 91.
- IGLÓI F., LAJKÓ P., SZALMA F. (1995) *Phys. Rev. B*, **52**, 7159.
- IGLÓI F., LAJKÓ P. (1996) *J. Phys. A*, **29**, 4803.
- IGLÓI F., TURBAN L. (1996) *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 1206.
- ISING E. (1925) *Z. Phys.*, **31**, 253.
- JANOT C., DUBOIS J.M., DE BOISSIEU M. (1989) *Am. J. Phys.*, **57**, 972.
- JANSSEN T. (1988) *Phys. Rep.*, **168**, 55.
- JONA-LASINIO G. (1975) *Nuovo Cimento*, **26B**, 99.
- JORDAN P., WIGNER E. (1928) *Z. Phys.*, **47**, 631.
- JULLIEN R. (1981) *Can. J. Phys.*, **59**, 605.
- KADANOFF L.P. (1966) *Physics*, **2**, 263.
- KADANOFF L.P., GÖTZE W., HAMBLÉN D., HECHT R., LEWIS E.A.S., PALCIAUSKAS W., RAYL M., SWIFT J. (1967) *Rev. Mod. Phys.*, **39**, 395.
- KAGANOV M.I. (1972) *Sov. Phys. JETP*, **35**, 631.
- KAGANOV M.I., OMEL'YANCHUK A.N. (1972) *Sov. Phys. JETP*, **34**, 895.
- KAREVSKI D., PALÁGYI G., TURBAN L. (1995) *J. Phys. A*, **28**, 45.
- KAREVSKI D. (1996) *Thèse de doctorat*. Université Henri Poincaré, Nancy 1.
- KAREVSKI D., TURBAN L. (1996) *J. Phys. A*, **29**, 3461.
- KOGUT J.B. (1979) *Rev. Mod. Phys.*, **51**, 659.
- KRAMERS H.A., WANNIER G.H. (1941) *Phys. Rev.*, **60**, 252.
- KUMAR P. (1974) *Phys. Rev. B*, **10**, 2928.
- LANDAU L.D. (1937) *Collected Papers of Landau L.D.* ed. Ter Haar D. (New-York : Gordon and Breach, 1965) p 193.
- LANGIE G., IGLÓI F. (1992) *J. Phys. A*, **25**, L487.

- LE BELLAC M. (1988) *Des phénomènes critiques aux champs de jauge* (Paris : InterEditions).
- LEDUE D., LANDAU D.P., TEILLET J. (1995) *Phys. Rev. B*, **51**, 12523.
- LENZ W. (1920) *Physik Z*, **21**, 613.
- LIEB E., SCHULTZ T., MATTIS D. (1961) *Ann. Phys.*, **16**, 407.
- LIN Z., TAO R. (1990) *Physics Letters A*, **150**, 11.
- LIN Z., TAO R. (1992a) *Phys. Rev. B*, **46**, 10808.
- LIN Z., TAO R. (1992b) *J. Phys. A*, **25**, 2483.
- LUBENSKY T.C., RUBIN M.H. (1975) *Phys. Rev. B*, **12**, 3885.
- LUCK J.M. (1992) *Systèmes désordonnés unidimensionnels*. Collection Aléa Saclay.
- LUCK J.M. (1993a) *J. Stat. Phys.*, **72**, 417.
- LUCK J.M. (1993b) *Europhys. Lett.*, **24**, 359.
- MAJKRZAK C.F., KWO J., HONG M., YAFET Y., GIBBS D., CHIEN C.L., BOHR J. (1991) *Adv. Phys.*, **40**, 99.
- MCCOY B.M., WU T.T. (1968a) *Phys. Rev. Lett.*, **21**, 549.
- MCCOY B.M., WU T.T. (1968b) *Phys. Rev.*, **176**, 631.
- MCCOY B.M. (1970) *Phys. Rev. B*, **2**, 2795.
- MCCOY B.M., WU T.T. (1973) *The Two-Dimensional Ising Model* (Cambridge, Mass. : Harvard University Press).
- MCCOY B.M., PERK J.H.H. (1980) *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 840.
- MILLS D.L. (1971) *Phys. Rev. B*, **3**, 3887.
- NAUENBERG M. (1975) *J. Phys. A*, **8**, 925.
- NEGELE J.W., ORLAND H. (1988) *Quantum Many Particle Systems* (Redwood City : Addison Wesley).
- NIEMEIJER T., VAN LEEUWEN J.M.J. (1976) *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 6. ed. Domb C. and Green M.S. (London : Academic Press) p 425.
- NIEUWENHUIZEN TH. M., ORLAND H. (1989) *Phys. Rev. B*, **40**, 5094.
- NIGHTINGALE M.P. (1976) *Physica*, **83A**, 651.
- OITMAA J., AYDIN M., JOHNSON M.J. (1990) *J. Phys. A*, **23**, 4537.
- OKABE Y., NIIZEKI K. (1988a) *J. Phys. Soc. Japan*, **57**, 16.
- OKABE Y., NIIZEKI K. (1988b) *J. Phys. Soc. Japan*, **57**, 1536.
- OKABE Y., NIIZEKI K. (1990) *J. Phys. A*, **23**, L733.
- ONSAGER L. (1944) *Phys. Rev.*, **65**, 117.
- PESCHEL I. (1984) *Phys. Rev. B*, **30**, 6783.
- PFEUTY P. (1970) *Ann. Phys.*, **57**, 79.
- PFEUTY P. (1979) *Phys. Lett.*, **72A**, 245.
- POLYAKOV A.M. (1970) *Sov. Phys. JETP*, **12**, 381.
- POLYAKOV A.M. (1987) *Gauge Fields and Strings* (Chur : Harwood Academic).
- QUEFFÉLEC M. (1987) *Substitution Dynamical Systems - Spectral Analysis (Lecture Notes in Mathematics 1294)* ed. Dold A. and Eckmann B. (Berlin : Springer) p 97.
- SAKAMOTO S., YONEZAWA F., AOKI K., NOSÉ S., HORI M. (1989) *J. Phys. A*, **22**, L705.

- SCHECHTMAN D., BLECH I., GRATIAS D., CAHN J.W. (1984) *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1951.
- SCHMIDT H. (1957) *Phys. Rev.*, **105**, 425.
- SCHULTZ T.D., MATTIS D.C., LIEB E.H. (1964) *Rev. Mod. Phys.*, **36**, 856.
- SHAPIR Y.S., AHARONY A. (1981) *J. Phys. C*, **14**, L905.
- SØRENSEN S., JARIĆ M.V., RONCHETTI M. (1991) *Phys. Rev. B*, **44**, 9271.
- STANLEY H.E. (1971) *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford : Clarendon Press).
- STANLEY H.E. (1974) *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol 3, ed. Domb C. and Green M.S. (London : Academic Press) p 486.
- STANLEY H.E., CHANG T.S., HARBUS F., LIU L.L. (1976) *Local Properties at Phase Transitions. Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course 59* ed. Müller K.A. and Rigamonti A. (Amsterdam : North Holland) p 45.
- STEINHARDT P., DiVICENZO D. (1991) *Quasicrystals: The State of the Art* ed. Steinhardt P. and DiVicenzo D. (Singapore : World Scientific).
- SUZUKI M. (1971) *Prog. Theor. Phys.*, **46**, 1377.
- SUZUKI M. (1976) *Prog. Theor. Phys.*, **56**, 1454.
- TOULOUSE G., PFEUTY P. (1975) *Introduction au groupe de renormalisation et à ses applications* (Grenoble : Presses universitaires de Grenoble).
- TRACY C.A. (1988a) *J. Stat. Phys.*, **51**, 481.
- TRACY C.A. (1988b) *J. Phys. A*, **21**, L603.
- TURBAN L. (1985) *J. Phys. A*, **18**, L325.
- TURBAN L., BERCHE B. (1993) *Z. Phys. B*, **92**, 307.
- TURBAN L., BERCHE B. (1993) *J. Physique I (France)*, **3**, 925.
- TURBAN L., BERCHE P.E., BERCHE B. (1994) *J. Phys. A*, **27**, 6349.
- TURBAN L., IGLÓI F., BERCHE B. (1994) *Phys. Rev. B*, **49**, 12695.
- WATSON P.G. (1970) *J. Phys. C*, **3**, L25.
- WIDOM B. (1965) *J. Chem. Phys.*, **43**, 3898.
- WILSON K.G. (1971) *Phys. Rev. B*, **4**, 3174.
- WILSON K.G., KOGUT J.B. (1974) *Phys. Rep. C*, **12**, 75.
- YOU J.Q., YANG Q.B. (1990) *Phys. Rev. B*, **41**, 7073.
- YOU J.Q., YAN J.R., ZHONG J.X. (1992) *J. Math. Phys.*, **33**, 3901.
- ZHANG C., DE'BELL K. (1993) *Phys. Rev. B*, **47**, 8558.

Nom: **BERCHE**

Prénom: **Pierre-Emmanuel**

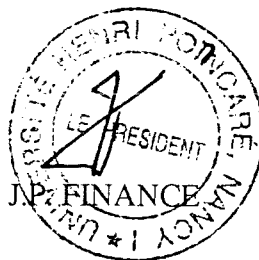
DOCTORAT de l'UNIVERSITE HENRI POINCARÉ, NANCY-I

en PHYSIQUE & CHIMIE DE LA MATIERE & DES MATERIAUX

VU, APPROUVÉ ET PERMIS D'IMPRIMER

Nancy, le 30 DÉC 1996 UHP 131

Le Président de l'Université



Résumé

L'étude théorique des systèmes quasi-périodiques ou, plus généralement, apériodiques, a suscité un grand intérêt depuis la découverte des quasi-cristaux, en 1984. L'enjeu est de parvenir à identifier le rôle de perturbations apériodiques dans les propriétés critiques, fournissant une meilleure compréhension des propriétés des systèmes désordonnés.

Cette thèse porte sur l'étude des propriétés critiques de systèmes soumis à des perturbations apériodiques marginales de volume, conformément au critère de Luck. De telles perturbations conduisent à un comportement critique non universel, caractérisé par des exposants variant de façon continue avec l'amplitude de la perturbation. Dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel "en couches", l'aimantation de surface est déterminée analytiquement, la densité d'énergie de surface et les propriétés de volume sont étudiées numériquement. Il résulte de cette étude que l'apériodicité induit un comportement d'échelle fortement anisotrope. L'exposant d'anisotropie z , fonction de l'amplitude de la perturbation, peut être contrôlé par l'apériodicité.

La chaîne de spins perturbée par la séquence apériodique de Fibonacci est également étudiée dans l'approximation de champ moyen grâce à la théorie de Ginzburg-Landau. Les propriétés critiques de surface et de volume, déterminées numériquement, présentent à nouveau le comportement marginal attendu.

Mots-clés

phénomènes critiques, modèle d'Ising, apériodicité, marginalisme, anisotropie