



## 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](mailto: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.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php)

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



S.C.D. - U.H.P. NANCY 1  
BIBLIOTHÈQUE DES SCIENCES  
Rue du Jardin Botanique - BP 11  
54601 VILLERS-LES-NANCY Cedex

U.F.R. Sciences & Techniques de la Matière et des Procédés  
Ecole Doctorale Energie Mécanique et Matériaux  
Formation Doctorale Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux

# THÈSE

présentée pour l'obtention du titre de :

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy-I

DISCIPLINE : SCIENCES PHYSIQUES  
SPÉCIALITÉ : PHYSIQUE STATISTIQUE

par Stéphane ABRIET

Dynamique hors équilibre dans le modèle XY et la chaîne  
quantique d'Ising

Soutenance publique prévue le 28 juin 2004

Membres du jury :

Rapporteurs : L. F. CUGLIANDOLO, Professeur, Paris VI  
M. PLEIMLING, Privatdozent, Université d'Erlangen, Allemagne

Examineurs : A. GAMBASSI, Docteur, Institut Max Planck de Stuttgart, Allemagne  
M. HENKEL, Professeur, U.H.P. Nancy I (Président du jury)  
D. KAREVSKI, Maître de Conférences, U.H.P. Nancy I (Co-directeur de thèse)  
L. TURBAN, Professeur, U.H.P. Nancy I (Directeur de thèse)

Invité extérieur : E. CARLON, Docteur, Interdisciplinary Research Institute, Lille

## Remerciements

Je tiens à remercier chaleureusement toute l'équipe de Physique Statistique pour avoir fait preuve de grandes qualités scientifiques et humaines tout au long de ces trois années. Je remercie tout particulièrement Loïc et Dragi pour avoir eu la patience de m'encadrer pendant cette thèse ainsi qu'Alan pour ses conseils avisés.

Je remercie également Leticia et Michel d'avoir accepté de faire partie du jury.

La rédaction du manuscrit n'est pas une période facile, aussi je remercie du fond du cœur mes amis proches pour leur soutien et leurs encouragements permanents.

Enfin, un grand merci à ma famille pour avoir fait preuve de compréhension durant cette longue préparation.

Stéphane.

# Table des matières

## PREMIERE PARTIE

<b>Dynamique du modèle XY</b>	<b>3</b>
<b>1 Dynamiques hors de l'équilibre</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction . . . . .	5
1.2 Généralités sur les dynamiques hors de l'équilibre . . . . .	9
1.2.1 <i>Quelques exemples</i> . . . . .	9
1.2.2 <i>Les différentes approches dynamiques</i> . . . . .	11
1.2.3 <i>Propriétés thermodynamiques</i> . . . . .	16
1.2.4 <i>Comportement d'échelle dynamique dans les transitions de phase</i> . . . . .	20
<b>2 Etude par simulation Monte Carlo</b>	<b>27</b>
2.1 Simulation des trempes . . . . .	27
2.1.1 <i>Algorithme des dynamiques utilisées</i> . . . . .	27
2.1.2 <i>Préparation de l'état initial</i> . . . . .	28
2.2 Calcul des quantités thermodynamiques . . . . .	31
2.2.1 <i>Grandeurs moyennes et fluctuations</i> . . . . .	31
2.2.2 <i>Fonctions d'autocorrélation</i> . . . . .	31
2.2.3 <i>Susceptibilité magnétique</i> . . . . .	32
2.2.4 <i>Fonction de réponse</i> . . . . .	34
2.2.5 <i>Rapport de fluctuation dissipation</i> . . . . .	35
2.2.6 <i>Estimation des erreurs</i> . . . . .	36
<b>3 Le modèle XY bidimensionnel</b>	<b>37</b>
3.1 Propriétés à l'équilibre . . . . .	37
3.1.1 <i>Présentation générale</i> . . . . .	37
3.1.2 <i>La transition de Kosterlitz-Thouless</i> . . . . .	38
3.1.3 <i>Comportement dynamique</i> . . . . .	41
3.2 Résultats sur les trempes dans la phase critique . . . . .	43
3.2.1 <i>Trempes depuis un état ordonné</i> . . . . .	43
3.2.2 <i>Trempes depuis un état critique</i> . . . . .	50
3.2.3 <i>Trempes à partir d'un état désordonné</i> . . . . .	56
3.3 Discussion . . . . .	64

<b>4 Le modèle XY tridimensionnel</b>	<b>67</b>
4.1 Généralités à l'équilibre . . . . .	67
4.2 Dynamique hors équilibre . . . . .	68
4.2.1 <i>Dynamique dans la phase ferromagnétique</i> . . . . .	68
4.2.2 <i>Dynamique critique</i> . . . . .	69
4.3 Résultats numériques . . . . .	70
4.3.1 <i>Trempe dans la phase basse température</i> . . . . .	70
4.3.2 <i>Trempe critique</i> . . . . .	77
4.4 Conclusion . . . . .	83

## DEUXIEME PARTIE

### Relaxation dans la chaîne quantique d'Ising 85

<b>5 Chaîne quantique d'Ising</b>	<b>89</b>
5.1 Introduction . . . . .	89
5.2 Modèle d'Ising quantique . . . . .	91
5.2.1 <i>Cas homogène</i> . . . . .	91
5.2.2 <i>Cas désordonné</i> . . . . .	94
5.3 Calculs dynamiques . . . . .	97
5.3.1 <i>Evolution temporelle des opérateurs échelle</i> . . . . .	99
5.3.2 <i>Calcul des aimantations moyennes</i> . . . . .	101
5.3.3 <i>Fonctions de corrélation connexes <math>C_L^{x,z}(t)</math></i> . . . . .	103
<b>6 Dynamique hors de l'équilibre</b>	<b>105</b>
6.1 Aimantations de surface et de volume . . . . .	105
6.1.1 <i>Aimantations sous champ critique</i> . . . . .	105
6.1.2 <i>Valeurs asymptotiques des aimantations transverses</i> . . . . .	109
6.2 Fonctions de corrélation des spins de surface . . . . .	109
6.2.1 <i>Fonctions de corrélation sous champ critique</i> . . . . .	109
6.2.2 <i>Valeurs asymptotiques</i> . . . . .	110
6.3 Conclusion . . . . .	115
<b>A. Calcul des fonctions de corrélation dans l'approximation des ondes de spin</b>	<b>119</b>
<b>B. Réponse angulaire et fonction de réponse</b>	<b>123</b>
<b>C. Invariance d'échelle locale et fonctions de réponse</b>	<b>127</b>

# PREMIERE PARTIE

## Dynamique du modèle XY

Дружеството се нарича „А“

БЪЛГАРСКО БЪЛЛЕ

ИЗДАНИЕ 1952  
МАРТИ 1952  
БЪЛГАРСКО БЪЛЛЕ

# Chapitre 1

## Dynamiques hors de l'équilibre

Un des principaux buts des recherches actuelles en physique statistique est d'établir une théorie générale décrivant la dynamique de processus hors de l'équilibre. Si le principe de base de la physique statistique à l'équilibre repose sur la théorie de Boltzmann, il n'existe en revanche aucune approche systématique traitant de l'évolution de systèmes loin de leur état d'équilibre. Dans cette situation, certains matériaux voient leurs propriétés physiques dynamiques évoluer dans le temps de manière différente en fonction de la durée écoulée depuis leur préparation. Ce phénomène, largement répandu dans la dynamique hors de l'équilibre des matériaux est appelé *vieillessement*.

### 1.1 Introduction

Si le phénomène de vieillissement dans les polymères [1] était déjà connu à la fin des années 70, son étude fut relancée dans le cadre des verres de spin [2, 3] quelques années plus tard. Dans ces matériaux, lorsqu'on modifie un paramètre de contrôle extérieur (par exemple la température) le temps d'équilibration peut devenir si long qu'il peut dépasser la durée de l'expérience. Une signature typique de ce comportement vitreux est la décroissance algébrique ou de type "exponentielle étirée" des fonctions de corrélation. Dans ce cas, le système *vieillit* puisque ses propriétés dynamiques dépendent de son *âge* défini par le temps écoulé depuis sa préparation. Par exemple, des mesures dynamiques des propriétés optiques et mécaniques d'un verre de silice montrent que ce matériau est apparemment à l'équilibre puisque les grandeurs mesurées restent constantes au cours de l'expérience si sa durée n'excède pas quelques heures. En revanche, si la durée des mesures devient de l'ordre de l'âge du matériau, on observe alors une évolution au cours du temps de ses propriétés physiques.

Les principales manifestations du vieillissement résident dans la brisure de l'invariance par translation dans le temps<sup>1</sup> et la violation du théorème de fluctuation-dissipation (FDT). D'autres manifestations plus spectaculaires ont été mises en évidence dans certains verres de spin présentant une brisure de l'ergodicité et des effets de mémoire et de rajeunissement [4, 5].

---

<sup>1</sup>Les grandeurs dynamiques ne dépendent plus seulement de l'intervalle de temps entre les mesures mais aussi de l'*âge* du système.

Néanmoins, les verres de spins ne constituent pas les seuls systèmes magnétiques pouvant présenter du vieillissement. Les modèles de ferromagnétiques "purs", trempés depuis un état désordonné vers leur phase critique ou ordonnée, n'atteignent jamais leur état d'équilibre dans la limite thermodynamique. Dans ces systèmes, les raisons de ce phénomène sont interprétées en terme de croissance d'amas en équilibre à la température du bain [6].

Par exemple, pour le modèle d'Ising ( $d \geq 2$ ) trempé à une température  $T < T_c$  croissent des domaines ordonnés d'aimantation  $\pm m_{eq}(T)$  et de longueur typique [6]  $L(t) \sim t^{1/z}$  où  $z > 0$  est l'exposant dynamique. Le système, présentant alors une dynamique de diffusion de parois séparant les domaines d'aimantation  $+m_{eq}(T)$  et  $-m_{eq}(T)$ , reste dans un état hors de l'équilibre.

Si le système est trempé à sa température critique, des amas corrélés de longueur typique  $\xi(t)$  se développent en suivant une loi de croissance [6]  $\xi(t) \sim t^{1/z_c}$  où  $z_c$  est l'exposant dynamique critique, différent de  $z$  dans le cas général. Pour un système de taille  $L \rightarrow \infty$ , les amas critiques croissent indéfiniment et impliquent un temps d'équilibration divergeant avec la taille du réseau.

Grâce à des résultats provenant de mesures expérimentales [7, 8] et de simulations numériques [9, 10], le comportement asymptotique des fonctions de corrélation  $C(t, s) = \langle \phi(t)\phi(s) \rangle$  a pu être interprété<sup>2</sup>, dans les ferromagnétiques purs trempés à  $T < T_c$ , en terme de rapport entre les longueurs typiques des domaines équilibrés aux instants  $s$  et  $t > s$  [6] :  $C(t, s) \sim f[L(t)/L(s)]$  avec  $L(t) > L(s)$ . Dans ce contexte, il est admis que les fonctions de corrélation  $C(t, s)$  adoptent une forme d'échelle décrite uniquement par les variables  $(t/s)^{1/z}$ . Il a été également montré que dans la limite asymptotique  $t \gg s \gg 1$ , cette forme d'échelle présente une décroissance purement algébrique [9, 11, 12, 13] caractérisée par un nouvel exposant  $\lambda$  :  $C(t, s) \sim (t/s)^{-\lambda/z}$  avec  $t \geq s$ .

Dans le cas de trempes à la température critique, cet exposant<sup>3</sup>  $\lambda$  est relié à l'exposant *d'initial slip*  $\theta$ , régissant la dynamique du système aux temps courts, par la relation [14]  $\lambda = d - \theta z_c$ . Dans la limite asymptotique, les fonctions de corrélation adoptent également un comportement algébrique de la forme<sup>4</sup> :  $C(t, s) \sim (t/s)^{-\lambda/z_c}$  où  $z_c$  est l'exposant dynamique critique donnant l'évolution de la longueur de corrélation :  $\xi(t) \sim t^{1/z_c}$ .

L'hypothèse d'échelle a été confirmée par des calculs analytiques de fonctions de corrélation et de réponse dans des modèles exactement solubles (notamment le modèle sphérique [15, 16] et la chaîne d'Ising [17]). Une analyse plus fine de ces fonctions montre que dans le régime d'échelle, les fonctions de corrélation et de réponse se comportent comme :  $C(t, s) \simeq s^{-b} f_C(t/s)$  et  $R(t, s) \simeq s^{-1-a} f_R(t/s)$  où  $f_{C,R}(x) \sim x^{-\lambda/z_c}$  et  $a, b$  sont de nouveaux exposants propres à la dynamique du système. Dans le cas général,  $b = 0$  lorsque la trempé est en-dessous de la température critique et il a été montré que  $a = 1/2$  dans le modèle d'Ising décrivant une dynamique de Glauber pour  $d > 1$  [18, 19] et  $a = d/2 - 1$  dans le

<sup>2</sup> $\phi$  désigne un paramètre d'ordre

<sup>3</sup>Nous conservons ici l'écriture générale  $\lambda$  alors que dans les prochaines parties nous le noterons  $\lambda^c$ .

<sup>4</sup>Nous conservons dans cette introduction une notation générale pour décrire les temps  $t$  et  $s$ . Dans la suite  $s$  sera noté  $t_w$  puisqu'il fait référence à un temps d'attente ("waiting time").

modèle sphérique [16, 15, 20]. En revanche, au point critique, on montre par des arguments d'échelle que :  $a = b = 2\beta/\nu z_c$  où  $\beta$  et  $\nu$  sont les exposants critiques d'équilibre.

Grâce à une réécriture de la violation du FDT sous la forme :

$$R(t, s) = X(t, s) \frac{\partial C(t, s)}{\partial s}$$

où le *taux de fluctuation-dissipation*  $X(t, s)$  mesure l'écart de la dynamique par rapport à la situation d'équilibre ( $X = 1$ ), Cugliandolo et al. [21, 22, 23] ont souligné l'intérêt particulier de la quantité  $X_\infty \equiv \lim_{s \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, s)$ . Leurs études sur les verres de spin en champ moyen ont notamment révélé que  $X_\infty$  pouvait être déduit de la susceptibilité magnétique lorsque celle-ci ne dépend que de  $C(t, t_w)$ . Dans les systèmes magnétiques purs, le taux de fluctuation dissipation tend généralement vers une constante  $X_\infty (< 1)$  nommée *rapport de fluctuation-dissipation* (FDR) et pouvant être interprétée en terme de température effective. Il a été montré analytiquement et numériquement que cette constante s'annule pour des systèmes ferromagnétiques trempés en-dessous de leur point critique [24, 15] alors qu'elle peut prendre une valeur non nulle au point critique [21, 17, 25, 16]. Le FDR est par ailleurs présenté par Godrèche et Luck comme une quantité universelle [17, 20, 18]. Les travaux analytiques de Schehr et al. [26] ainsi que Calabrese et al. [27] ont confirmé ces prédictions sur le modèle  $O(N)$ . Récemment, Chatelain a testé explicitement l'hypothèse de Godrèche et Luck sur de nombreux modèles à deux dimensions [28]. Ces résultats semblent conforter l'idée d'universalité de  $X_\infty$ .

Les premières études de la dynamique hors de l'équilibre du modèle XY (ou  $O(2)$ ) à deux dimensions trempé dans sa phase critique ont été initiées par Bray et Rutenberg il y a un peu moins de dix ans. La particularité de ce modèle, ne présentant pas d'aimantation spontanée à température finie, est que la loi de croissance des amas critiques dépend de la configuration initiale. En effet, si le système est préparé dans un état initial suffisamment ordonné, le développement d'amas critiques de longueur typique  $\xi$  suit la loi habituelle :  $\xi(t) \sim t^{1/2}$  ( $z_c = 2$ ). Dans cette situation, Bray et Rutenberg [29] puis Berthier et al. [30] ont calculé analytiquement les fonctions d'autocorrélation  $C(t, s)$  et les fonctions de réponse  $R(t, s)$  en utilisant l'approximation des ondes de spin. Ces calculs ont été confirmés par Cugliandolo et al. [21] ainsi que Picone et al. [31] grâce à une formulation de théorie des champs utilisant le formalisme de Martin-Siggia-Rose (MSR) [32], toujours dans une approximation de basse température.

Si par contre, le système est initialement désordonné, l'annihilation des défauts topologiques<sup>5</sup> donnent lieu à une loi de croissance de type  $\xi(t) \sim \sqrt{t/\ln t}$  [33, 34]. Dans ce cas les fonctions de corrélation et de réponse sont calculées par simulation Monte Carlo puisqu'il n'existe aucune approche analytique. Ainsi Berthier et al. [30] ont déduit, à partir de simulations et d'arguments d'échelle, une forme asymptotique des fonctions d'autocorrélation pour une température donnée.

Dans ce contexte, nous nous intéressons dans un premier temps à la dynamique hors de l'équilibre du modèle XY 2D trempé dans sa phase critique à une température  $T_f$  depuis

<sup>5</sup>représentés par des vortex libres

un état ordonné ( $T_i = 0$ ) ou critique ( $T_i \neq T_f$ ). Grâce aux simulations Monte Carlo, nous étudions notamment l'influence de la température de trempe sur les prédictions de l'approximation des ondes de spin pour  $C(t, s)$ . Nous comparons également les calculs analytiques de la réponse linéaire  $R(t, s)$  avec les résultats issus des simulations puisque récemment, Chate Lain [35] puis Ricci-Tersenghi [36] ont établi une méthode de calculs numériques de réponse magnétique.

Dans un second temps, nous procédons à une étude similaire de  $C(t, s)$  et  $R(t, s)$  dans le cas où le système est préparé dans un état totalement désordonné ( $T_i \rightarrow \infty$ ). Nous tentons de généraliser à différentes températures critiques la conjecture de Berthier donnant  $C(t, s) \simeq (t - s)^{-\eta(T_f)/2} \Phi_C[\xi(t)/\xi(s)]$ , où  $\eta(T_f)$  est l'exposant critique des corrélations à l'équilibre à  $T_f$  et  $\Phi_C$  est une fonctions d'échelle. Nous étudions également le comportement d'échelle de la réponse linéaire. Enfin, nous terminerons cette étude du modèle XY 2D par une analyse du FDR s'appuyant sur les calculs numériques et les formes asymptotiques de  $C(t, s)$  et  $R(t, s)$ .

La majeure partie de ces résultats a été publiée dans la revue *The European Physical Journal B* [37].

Contrairement à son homologue à deux dimensions, le modèle XY 3D présente une aimantation spontanée à basse température. De ce fait, nous nous attendons à ce que les fonctions de corrélation et de réponse présentent respectivement les comportements d'échelle "habituels" du type :  $C(t, s) \simeq s^{-b} f_C(t/s)$  et  $R(t, s) \simeq s^{-1-a} f_R(t/s)$ . Dans l'approximation ondes de spin, les fonctions d'autocorrélation ont été obtenues par Picone et Henkel [31] sur des systèmes présentant initialement des corrélations spatiales algébriques. De plus, dans le cadre d'une théorie des champs de type MSR, Calabrese et Gambassi [27] ont déterminé, dans le cas d'une dynamique critique du modèle  $O(N)$ , une forme de  $C(t, s)$  et  $R(t, s)$  grâce à un développement en  $\epsilon = 4 - d$  obtenu par des méthodes de renormalisation. Leurs calculs s'avèrent être en accord avec les formes de  $C(t, s)$  et  $R(t, s)$  déduites de l'invariance d'échelle. D'autre part, ils établissent plusieurs estimations de FDR pour  $N = 1, 2, 3, \infty$  et  $d = 2, 3, 4$ , obtenant  $X_\infty = 0.416(8)$  pour le modèle XY 3D ( $N = 2$ ). Il semble donc intéressant d'étudier par simulation Monte Carlo la dynamique hors équilibre du modèle XY 3D trempé depuis un état complètement désordonné vers ses phases critique et ordonnée. D'une part, cette étude permet d'apprécier la validité des résultats obtenus par les hypothèses d'échelle sur un nouveau modèle obéissant à une dynamique de croissance de domaines. D'autre part, ce travail donne l'occasion de tester les résultats de la théorie d'invariance d'échelle locale (IEL) (pour une revue, voir la réf.[38]) sur les fonctions de réponse. Jusqu'à présent, cette théorie a donné des résultats remarquables sur le modèle d'Ising pour  $2 \leq d < 4$  et  $d > 4$  [39, 40] ainsi que dans le modèle sphérique tridimensionnel [41, 42].

Nous étudions d'abord, par simulations Monte Carlo, la dynamique hors de l'équilibre du modèle XY 3D trempé dans sa phase ordonnée. En considérant plusieurs température de trempe, nous calculons numériquement les fonctions d'autocorrélation, d'autoréponse et les taux de fluctuation-dissipation. Nous comparons nos résultats sur  $C(t, s)$  et  $R(t, s)$  avec les expressions déduites d'arguments d'échelle et de la théorie IEL pour les fonctions de réponse. De ces analyses, nous pouvons extraire les valeurs des exposants dynamiques  $\lambda$  et  $a$  et en

déduire le comportement asymptotique du FDR.

La dynamique critique du modèle XY 3D, initialement désordonné, est également abordée par des calculs numériques de fonctions de corrélation et de réponse. Ici encore, nous vérifions la validité des résultats issus de l'hypothèse d'échelle et de la théorie IEL (pour  $R(t, s)$ ). Nous nous intéressons également à l'influence des effets de taille finie sur les fonctions d'autocorrélation. Enfin, nous étudions la limite asymptotique du taux de fluctuation-dissipation  $X(t, s)$  pour conclure sur une estimation du FDR que nous comparons avec la valeur  $X_\infty = 0.416(8)$  obtenue par Calabrese et al. [27].

Le lecteur pourra se référer à la réf.[43] pour consulter l'article correspondant à ces travaux.

## 1.2 Généralités sur les dynamiques hors de l'équilibre

### 1.2.1 Quelques exemples

#### "Driven dynamics"

Un système présente une dynamique hors équilibre lorsqu'il est soumis à une force extérieure le maintenant en permanence dans un état non équilibré. Ce type de dynamique ne présente alors aucun temps d'équilibration accessible.

En mécanique des fluides, de faibles contraintes de cisaillement appliquées à un liquide visqueux peuvent engendrer une très lente relaxation [44]. Cette expérience peut être réalisée au moyen d'un viscosimètre de Couette (voir figure 1.1). Les équations de la dynamique sont alors modifiées par l'ajout d'un terme convectif  $\vec{v}\vec{\nabla}\rho(\mathbf{r}, t)$ . Expérimentalement<sup>6</sup>, il a été observé que la viscosité du fluide diminue lorsque les vitesses de rotation respectives des cylindres augmentent, favorisant ainsi son écoulement. En revanche il existe un seuil  $\omega_s$  en dessous duquel la viscosité plafonne à son maximum. Par conséquent, pour une faible contrainte de cisaillement ( $\omega$  faible), le fluide reste maintenu dans un état hors de l'équilibre sous l'effet de son comportement dynamique visqueux.

Les dynamiques hors équilibre peuvent être également rencontrées dans les milieux granulaires. Dans ces matériaux, lorsque l'énergie typique d'activation thermique  $k_B T$  reste inférieure à l'énergie potentielle de déplacement des grains ( $E_p \sim mgd$ ), ces derniers restent confinés dans un état métastable. Par contre, si le milieu reçoit un apport d'énergie mécanique sous forme de vibrations ou de chocs successifs, des transitions entre états métastables apparaissent du fait de la migration de grains. Le système évolue alors lentement vers des configurations plus denses.

Les dynamiques vitreuses, encore mal comprises actuellement, peuvent également présenter des propriétés de non stationnarité. Considérons un liquide à haute température soumis à un abaissement de température à taux constant  $r = -\Delta T/\Delta t$ . A chaque étape du refroidi-

<sup>6</sup>Les trois exemples qui suivent proviennent de la référence [45]

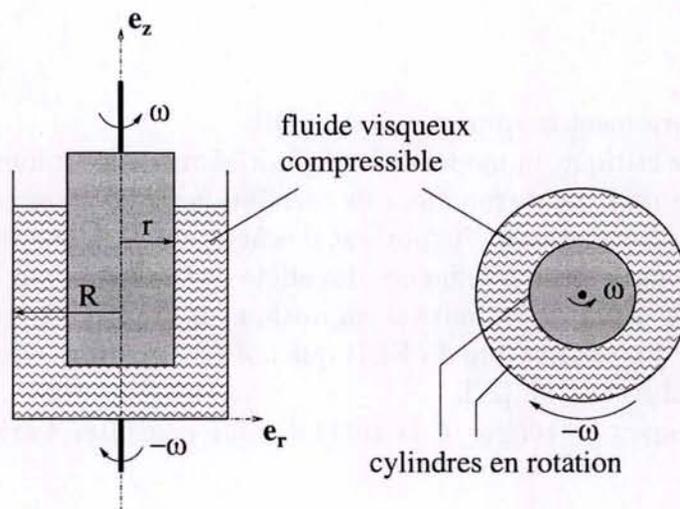


FIG. 1.1 – Cisaillement d'un liquide par un viscosimètre de Couette.

dissement, la viscosité relaxe rapidement. Si le taux  $r$  de la trempe est suffisamment rapide, le liquide ne cristallise pas en dessous de  $T_s$  et reste maintenu dans un état surfondu. Cet état métastable est caractérisé par une viscosité augmentant exponentiellement lorsque  $T$  diminue. Il existe donc une température  $T_g$  en dessous de laquelle le temps de relaxation du liquide devient supérieur à  $\Delta t$ . Dans cette situation, l'équilibration du liquide n'est plus atteinte au cours de l'expérience. Le caractère non équilibré de la dynamique se manifeste par une brisure de l'ergodicité traduite par une variation des quantités thermodynamiques mesurées (volume, entropie, etc...) avec les paramètres de l'expérience.

Les études sur la propagation de particules soumises à un potentiel aléatoire ont également révélé des aspects propres aux dynamiques hors équilibre [46]. Par exemple, leur comportement est fortement dépendant des conditions initiales. Ces systèmes sont décrits par un Hamiltonien standard :

$$H = \int d^d x \left[ (\vec{\nabla} \phi(\vec{x}))^2 + V(\phi(\vec{x}), \vec{x}) \right], \quad (1.1)$$

où  $\phi$  représente la position transverse de la particule en  $\vec{x}$  dans un potentiel gaussien  $V$  défini par :  $\langle V(\phi, \vec{x}) V(\phi', \vec{x}') \rangle = -\mathcal{V}[(\phi - \phi')^2] \delta^d(\vec{x} - \vec{x}')$ . Les résultats obtenus grâce à une approche hydrodynamique montrent que ces systèmes relaxent de manière très lente. L'extension de cette étude à l'évolution de structures élastiques sous l'action de potentiels aléatoires (voir la réf. [47] pour une revue récente) conduit aux mêmes conclusions.

### Dynamique hors équilibre dans les systèmes magnétiques

Les systèmes magnétiques peuvent présenter de très lents processus de relaxation. Le temps typique de relaxation devient alors très grand du fait d'un réarrangement structural

du matériau. Par conséquent, la relaxation ne peut être observée lorsque le temps de relaxation dépasse la durée de l'expérience  $t_{exp}$ .

Les verres de spins [48] sont constitués par un alliage d'ions magnétiques répartis dans une matrice métallique non magnétique, par exemple  $Ag_{1-x}Mn_x$ . Les ions magnétiques interagissent sous l'effet d'interactions RKKY :  $J(r) \sim r^{-3} \cos(kr)$ . Si la répartition des ions magnétiques est aléatoire, l'ensemble des couplages magnétiques  $\{J_i\}$  est décrit par une variable aléatoire comprenant des interactions ferro- et antiferromagnétiques. Comme les systèmes magnétiques purs, les verres de spins présentent une transition de phase séparant une phase paramagnétique d'une phase basse température. Lorsqu'un échantillon thermalisé à haute température est instantanément trempé sous sa température de transition  $T_g$ , la relaxation du système devient trop lente pour être expérimentalement observée. Cette dynamique hors équilibre a été mise en évidence par des mesures d'aimantation et de susceptibilité magnétique  $\chi$  [3, 2] dans des alliages de  $CuMn$ . Si un faible champ magnétique  $\mathbf{h}$  est appliqué à partir du temps  $t_w$  (l'origine des temps est fixée au moment de la trempe), les mesures de susceptibilité magnétique  $\chi = M/h$  montrent que l'amplitude de  $\chi$  évaluée pour  $t > t_w$  décroît lentement avec le temps d'exposition au champ  $t - t_w$ . Par ailleurs, en élaborant un programme de température  $T(t)$ , il a été observé [49] que ces systèmes présentaient des propriétés de rémanence.

Ces études initiées dans les verres de spin se sont rapidement étendues aux systèmes magnétiques purs. Dans ces systèmes, la divergence du temps de relaxation est due à la croissance de domaines ordonnés de taille typique  $L(t) \sim t^{1/z}$ , où  $z > 0$  est l'exposant dynamique [6]. Dans la limite thermodynamique, la taille du système étant infinie, le temps de relaxation  $t_{rel} \sim L^z$  devient infini et l'état d'équilibre n'est jamais atteint. Dans la pratique, le temps de relaxation est fini mais reste très grand devant la durée de l'expérience. La figure 1.2 montre la croissance de domaines ordonnés dans le modèle d'Ising trempé depuis un état désordonné vers sa phase ferromagnétique. On remarque que pour des temps suffisamment longs, ces domaines remplissent tout le système et la dynamique est alors décrite par une lente diffusion des interfaces.

## 1.2.2 Les différentes approches dynamiques

### Approche microscopique

La distribution de probabilité des états microscopiques accessibles d'un système physique hors équilibre est généralement une fonction non triviale du temps. Pour des temps très longs, nous nous attendons à ce que le système atteigne un état d'équilibre décrit par une distribution de Boltzmann. L'évolution microscopique d'un système classique est régie par une équation de Liouville donnant l'évolution de l'opérateur densité  $\rho$  :

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = - \{H, \rho\} , \quad (1.2)$$

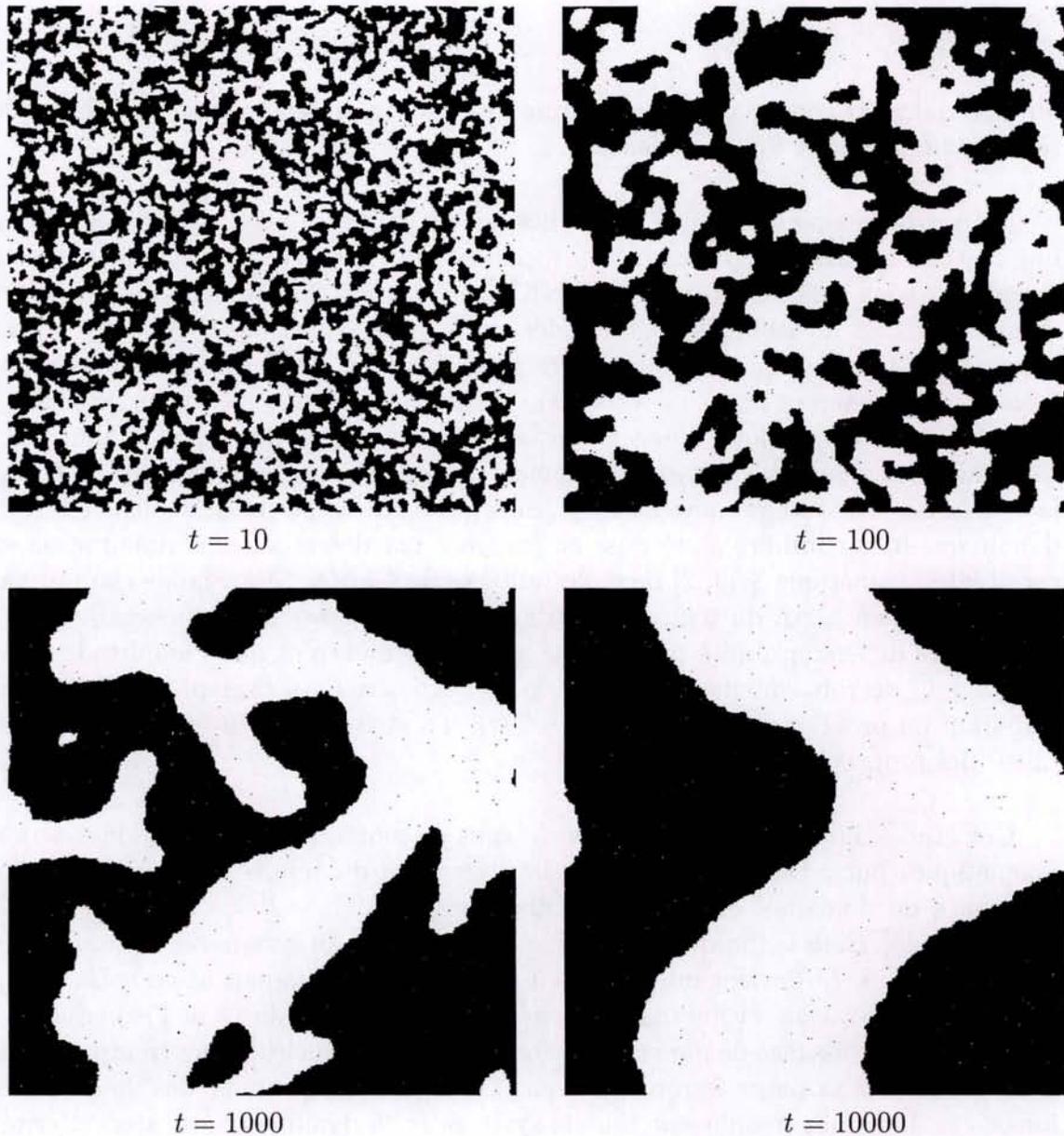


FIG. 1.2 - Visualisation par simulation Monte Carlo de la dynamique hors équilibre du modèle d'Ising ( $\sigma = \pm 1$ ) trempé à  $t = 0$  depuis un état désordonné vers sa phase basse température ( $T_1 = T_c/2$ ). Les configurations du système aux instants  $t = 10, 100, 1000$  et  $10000$  révèlent la croissances de domaines d'aimantation  $+m$  (amas noirs) et  $-m$  (amas blancs). Nous utilisons des conditions de bords périodiques.

où  $H$  est le Hamiltonien du système et  $\{, \}$  sont des crochets de Poisson. Les valeurs moyennes sont alors données par :

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \int_{\Sigma} \rho(0) A(t) B(t') dqdp, \quad (1.3)$$

où  $q$  et  $p$  sont respectivement les coordonnées et les moments conjugués de l'espace des phases  $\Sigma$  et  $\rho(0)$  est la matrice densité à l'instant initial.

Lorsque l'on dispose d'équations régissant les transitions entre états microscopiques, l'évolution d'un système peut être déterminée en assimilant sa dynamique à un processus stochastique dicté par une équation maîtresse. Pour cela, supposons que  $x$  soit une variable aléatoire dépendante du temps  $t$ , alors la séquence  $\{x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)\}$ , où  $t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n$  constitue un processus stochastique (voir figure 1.3). La probabilité pour que  $x$  soit à la fois compris

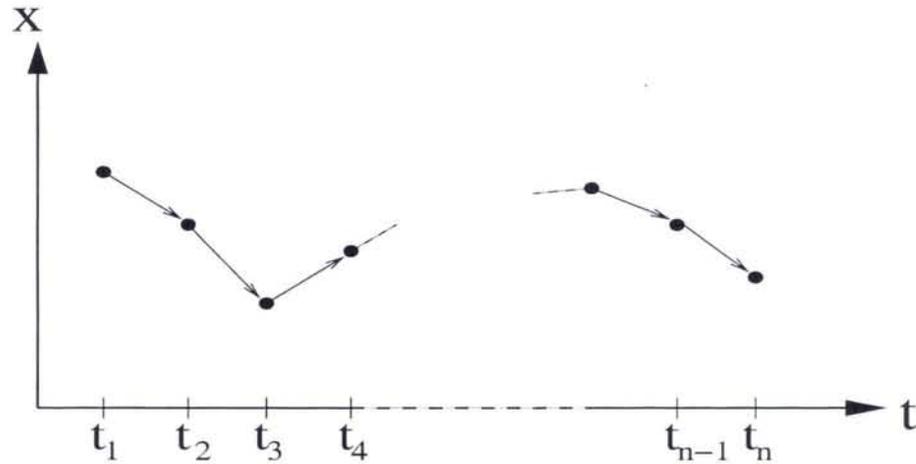


FIG. 1.3 – Processus stochastique décrit par la variable aléatoire  $x$ .

dans l'intervalle  $[x_1, x_1 + dx_1]$  à l'instant  $t_1$ , compris dans  $[x_2, x_2 + dx_2]$  à  $t_2$ , ..., compris dans  $[x_n, x_n + dx_n]$  à  $t_n$  est définie par  $P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) dx_1 \dots dx_n$ , où la normation de la distribution de probabilité  $P_n$  est définie par :

$$\int dx_1 \dots dx_n P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = 1. \quad (1.4)$$

Les moyennes et les corrélations à  $n$ -points s'écrivent alors :

$$\langle x(t_1) \dots x(t_n) \rangle = \int dx_1 \dots \int dx_n P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) x_1 \dots x_n. \quad (1.5)$$

Dans le cas où les  $n$  événements du processus stochastique sont totalement décorrélés, la distribution de probabilité se décompose sous la forme :

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = \prod_{j=1}^n P_1(x_j, t_j).$$

Dans la pratique, la description microscopique d'un système physique ordinaire utilise une chaîne de Markov. Dans un processus markovien, la variable  $x$  à l'instant  $t_n$  dépend uniquement de sa valeur à l'instant  $t_{n-1}$ . La densité de probabilité  $P_n$  devient alors un produit de

probabilités conditionnelles :

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = P_{1|1}(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \times P_{1|1}(x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n-2}, t_{n-2}) \times \dots \quad (1.6)$$

$$\dots \times P_{1|1}(x_2, t_2 | x_1, t_1)$$

où  $P_{1|1}(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$  est la distribution de probabilité d'avoir la variable  $x$  comprise dans l'intervalle  $[x_n, x_n + dx_n]$  à l'instant  $t_n$ , sachant qu'elle était dans  $[x_{n-1}, x_{n-1} + dx_{n-1}]$  à  $t_{n-1}$ .

L'évolution de la distribution  $P_1(x, t)$  est régie par une équation maîtresse :

$$\frac{\partial P_1(x, t)}{\partial t} = \int dx' [P_1(x', t)W(x' \rightarrow x) - P_1(x, t)W(x \rightarrow x')] , \quad (1.7)$$

où  $W(x' \rightarrow x)$  est le taux de transition<sup>7</sup> de  $x \rightarrow x'$ . Lorsqu'elle est unique, la solution stationnaire<sup>8</sup>  $P_{eq}(x)$  de cette équation vérifie :  $P_{eq}(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} P_1(x, t)$  et les taux de transitions satisfont l'équation de bilan détaillé :

$$P_{eq}(x')W(x' \rightarrow x) = P_{eq}(x)W(x \rightarrow x') . \quad (1.8)$$

Pour un système en contact avec un bain thermique de température  $T$  décrit par un Hamiltonien  $H(x)$ , la probabilité  $P_{eq}(x)$  est alors donnée, dans l'ensemble canonique, par la distribution de Boltzmann :

$$P_{eq}(x) = \frac{1}{Z(T)} e^{-H(x)/k_B T} , \quad (1.9)$$

où  $Z(T)$  est la fonction de partition du système.

L'équation-maîtresse permet d'aborder la dynamique de systèmes décrits à partir de lois donnant les taux de transition entre états microscopiques. Considérons par exemple un processus de diffusion asymétrique [50, 51] défini par les processus élémentaires et leur taux associé suivants [52] :

<i>Processus</i>	<i>taux</i>	
$A\emptyset \rightarrow \emptyset A$	$\tau_d$	(1.10)
$\emptyset A \rightarrow A\emptyset$	$\tau_g$	

Ce processus est régi par une équation maîtresse pour la probabilité  $P(B_N; t)$  de trouver à l'instant  $t$ ,  $N$  particules réparties sur les sites décrits par  $B = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ . L'équation-maîtresse s'écrit alors :

$$\frac{d}{dt}P(B; t) = \sum_{i=1}^N \{ \tau_d P(B_i^-; t-1) + \tau_g P(B_i^+; t-1) \} - N(\tau_d + \tau_g)P(B; t) , \quad (1.11)$$

où  $B_i^\pm = \{n_1, n_2, \dots, n_{i-1}, n_i \pm 1, n_{i+1}, \dots, n_N\}$ . Cette approche est également utilisée dans l'étude de processus de réaction-diffusion, dans les dynamiques de population ou encore dans la chaîne d'Ising avec une dynamique de Glauber [53, 54].

<sup>7</sup>Les taux de transition entre états microscopiques sont choisis ici indépendants du temps.

<sup>8</sup>En fait, on montre que tout cycle arbitraire constitué de  $N$  étapes  $\{x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_{N-1} \rightarrow x_0\}$  vérifiant  $W(x_0 \rightarrow x_1)W(x_1 \rightarrow x_2) \dots W(x_{N-1} \rightarrow x_0) = W(x_0 \rightarrow x_{N-1}) \dots W(x_2 \rightarrow x_1)W(x_1 \rightarrow x_0)$  est une condition nécessaire et suffisante de l'existence d'une solution de l'équation de bilan détaillé.

### Approche hydrodynamique : équation de Langevin

La description microscopique de processus stochastiques n'est envisageable que pour des systèmes présentant un nombre raisonnable de degrés de liberté. Le nombre de ces degrés de liberté peut être réduit en réévaluant les observables à une échelle mésoscopique. Le comportement dynamique des observables étant essentiellement étudié dans la limite des temps longs, il n'est pas nécessaire de connaître la cinétique complète aux temps courts. Les évolutions des quantités thermodynamiques sont ainsi évaluées sur une échelle de temps plus appropriée à condition de substituer aux variations microscopiques "rapides", une force aléatoire représentée par un bruit statistique. Une telle dynamique est décrite par une équation de Langevin qui, dans le cas de systèmes ne présentant aucune loi de conservation, s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial \varphi_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\delta H[\varphi(\mathbf{r}, t)]}{\delta \varphi_\alpha(\mathbf{r}, t)} + \zeta_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad (1.12)$$

où  $\varphi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  est un champ à  $n$  composantes et  $H[\varphi]$  est la fonctionnelle de l'énergie libre du système. La variable  $\zeta(\mathbf{r}, t)$  représente un bruit blanc<sup>9</sup> gaussien caractérisé par ses corrélations :

$$\langle \zeta_\alpha(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta_\alpha(\mathbf{r}, t) \zeta_{\alpha'}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \delta_{\alpha\alpha'} \quad (1.13)$$

où  $\langle \cdot \rangle$  désigne une moyenne sur les réalisations du bruit. Les équations (1.12) et (1.13) constituent le modèle A introduit par Hohenberg et Halperin [55]. Le premier terme de l'équation de Langevin (1.12) représente la relaxation du champ vers une configuration qui minimise la fonctionnelle  $H[\varphi]$ . Dans la plupart des cas le second terme assure, grâce à (1.13), un retour à une distribution de probabilité à l'équilibre définie par (1.9), c'est-à-dire la thermalisation. La résolution de l'équation de Langevin permet de calculer l'évolution des observables dynamiques, fonctions de  $\varphi(\mathbf{r}, t)$ , en réalisant une moyenne sur les réalisations du bruit et les conditions initiales.

### 1.2.3 Propriétés thermodynamiques

#### Brisure de l'invariance par translation dans le temps

Les mesures de susceptibilité magnétique  $\chi$  [3, 2] sur des verres de spin, trempés à basse température sous champ, révèlent une brisure de l'invariance par translation dans le temps. Les simulations numériques ont permis de vérifier cette propriété sur d'autres fonctions thermodynamiques à deux temps et sur d'autres modèles statistiques. Parmi les quantités dynamiques considérées, les fonctions de corrélation  $\langle \sigma(t) \sigma(t_w) \rangle$  et les fonctions de réponse<sup>10</sup>  $\delta \langle \sigma(t) \rangle / \delta h(t_w)$  présentent un intérêt majeur puisqu'elles sont accessibles expérimentalement. La figure 1.5 montre la brisure de l'invariance par translation dans le temps des fonctions d'autocorrélation  $C(t, t_w) = \langle \sigma(t) \sigma(t_w) \rangle$  dans le modèle d'Ising ( $\sigma = \pm 1$ ) trempé à  $T < T_c$

<sup>9</sup>Le bruit statistique est choisi *blanc* pour satisfaire les conditions d'équilibre.

<sup>10</sup>Ces notations compactes pour les corrélations et la réponse désignent en fait les moyennes spatiales  $\langle \sigma(t) \sigma(t_w) \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i(t) \sigma_i(t_w) \rangle$  et  $\frac{\delta \langle \sigma(t) \rangle}{\delta h(t_w)} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\delta \langle \sigma_i(t) \rangle}{\delta h(t_w)}$

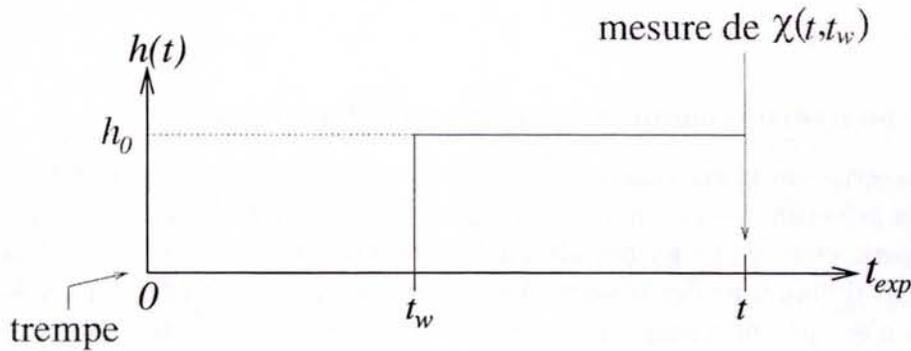


FIG. 1.4 – Mesure de la susceptibilité  $\chi(t, t_w) = M(t, t_w)/h$  par application d'un champ magnétique  $h$  pour  $t \geq t_w$  (scénario Zero Field Cooled). La quantité  $M(t, t_w)$  est l'aimantation à  $t$  induite par le champ  $h$ .

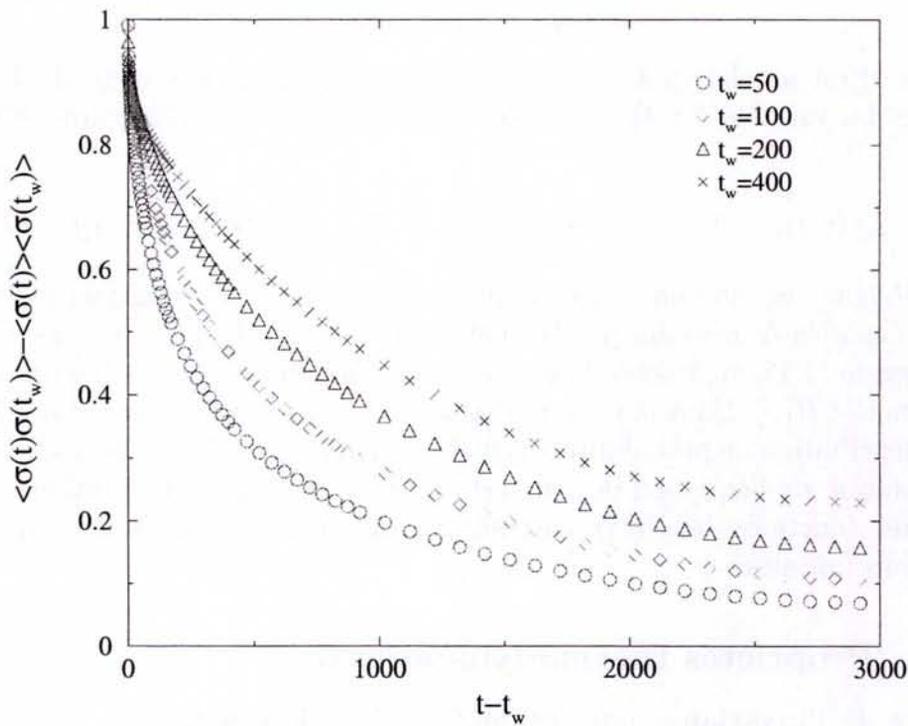


FIG. 1.5 – Fonctions de corrélation connectées dans le modèle d'Ising 2D trempé à  $T_c/2$  depuis un état désordonné. La représentation en fonction de  $t - t_w$  montre clairement une dépendance des corrélations sur  $t - t_w$  et  $t_w$ .

depuis sa phase haute température. La réponse linéaire du système à l'instant  $t$  à un champ appliqué à  $t_w$ , dépend donc à la fois de la différence  $\tau = t - t_w$  et du temps d'attente  $t_w$ . Cette dépendance de  $t_w$  des fonctions thermodynamiques est associée au phénomène de

vieillessement dans la mesure où le temps d'attente fixe l'âge du système.

### Le théorème de fluctuation-dissipation

Dans un système à l'équilibre, la réponse à un champ extérieur et la fonction d'auto-corrélation  $C_{\mathcal{O}}(t_w + \tau, t_w) \equiv \langle \mathcal{O}(t_w + \tau) \mathcal{O}(t_w) \rangle$  sont reliées par le théorème de fluctuation dissipation (FDT) :

$$R_{\mathcal{O}}(t_w + \tau, t_w) = \left. \frac{\delta \langle \mathcal{O}(t_w + \tau, t_w) \rangle}{\delta h(t_w)} \right|_{h \rightarrow 0} = R_{\mathcal{O},eq}(\tau) = -\frac{1}{T} \frac{\partial C_{\mathcal{O},eq}(\tau)}{\partial \tau}, \quad (1.14)$$

où le champ  $h$  est conjugué à l'observable  $\mathcal{O}$ . Dans le cas d'un système magnétique, si  $h$  est un champ extérieur, alors le FDT relie la réponse du moment magnétique  $\phi : R(t, t_w) = R_{eq}(t - t_w) \equiv \delta \langle \phi(t) \rangle / \delta h(t_w)$  à la fonction d'autocorrélation<sup>11</sup> :  $C(t, t_w) \equiv \langle \phi(t) \phi(t_w) \rangle = C_{eq}(t - t_w)$ . Considérons un paramètre d'ordre  $\phi(t)$  décrit par une équation de Langevin :

$$\frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = -K[\phi] + \zeta(t), \quad (1.15)$$

où le bruit statistique  $\zeta(t)$  vérifie (1.13) avec  $k_B = 1$ . Grâce à (1.15) nous pouvons calculer<sup>12</sup> :

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t_w} - \frac{\partial}{\partial t} \right) \langle \phi(t) \phi(t_w) \rangle &= \langle \phi(t) [-K[\phi](t_w) + \zeta(t_w)] \rangle - \langle \phi(t_w) [-K[\phi](t) + \zeta(t)] \rangle \\ &= A(t, t_w) + \langle \phi(t) \zeta(t_w) \rangle - \langle \phi(t_w) \zeta(t) \rangle, \end{aligned} \quad (1.16)$$

où pour des raisons de causalité  $\langle \phi(t_w) \zeta(t) \rangle = 0$  puisque  $t_w < t$ , et donc :

$$A(t, t_w) = \langle \phi(t_w) K[\phi](t) \rangle - \langle \phi(t) K[\phi](t_w) \rangle. \quad (1.17)$$

A l'équilibre, toute fonction de corrélation à deux temps vérifie :

$$\langle B(t_1) D(t_2) \rangle = \langle B(t_2) D(t_1) \rangle \quad (1.18)$$

si les observables  $B$  et  $D$  sont fonction de  $\phi(t)$  du fait de la symétrie par renversement du temps, ceci implique donc que  $A(t, t_w) = 0$ . La fonction d'autocorrélation étant invariante par translation dans le temps :  $(\frac{\partial}{\partial t_w} - \frac{\partial}{\partial t}) \rightarrow 2 \frac{\partial}{\partial t_w}$ , ce qui conduit à<sup>13</sup> :

$$\frac{\partial}{\partial t_w} \langle \phi(t) \phi(t_w) \rangle = \frac{1}{2} \langle \phi(t) \zeta(t_w) \rangle \equiv TR(t, t_w). \quad (1.19)$$

En introduisant la susceptibilité magnétique  $\chi(t, t_w) = \int_{t_w}^t R(t, u) du$ , le théorème de fluctuation-dissipation peut se réécrire sous une forme intégrale :

$$\begin{aligned} \chi(t, t_w) &= \frac{1}{T} (C(t, t) - C(t, t_w)) \\ &= \frac{1}{T} (1 - C(t, t_w)), \end{aligned} \quad (1.20)$$

<sup>11</sup>Nous supposons ici que  $\langle \phi(t) \rangle = 0$  pour tout  $t$ .

<sup>12</sup>La démonstration qui suit est inspirée de la référence [21].

<sup>13</sup>L'identité  $\frac{1}{2} \langle \phi(t) \zeta(t_w) \rangle \equiv TR(t, t_w)$  est démontrée dans la référence [45].

si  $C(t, t) = 1$ .

Cugliandolo et al. [21, 22, 23] ont montré que la violation du FDT [56] peut être paramétrée par un facteur  $X(t, t_w)$  appelé taux de fluctuation-dissipation défini par :

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}. \quad (1.21)$$

L'écart de  $X(t, t_w)$  par rapport à l'unité permet d'apprécier la déviation de la dynamique par rapport à la situation d'équilibre. Dans de nombreux systèmes, le taux de fluctuation-dissipation tend vers une constante dans la limite des longs temps d'observation  $t$ . Dans le cas où la susceptibilité n'est fonction que de  $C$  et indépendante de  $t_w$ , la forme intégrée de (1.21) donne :

$$\chi(C) = \frac{1}{T} \int_C^1 X(C') dC'. \quad (1.22)$$

Le taux de fluctuation-dissipation est donc ici égal à :

$$X(C) = -T \frac{d\chi(C)}{dC}. \quad (1.23)$$

Une manière de visualiser la violation du FDT est de représenter l'évolution de la susceptibilité magnétique  $\chi(t, t_w) = M(t, t_w)/h$  (voir figure 1.4) en fonction de  $C(t, t_w)$  [24]. Le graphe de la figure 1.6 est une représentation paramétrique de  $\chi(C(t, t_w))$  dans le modèle XY 2D trempé dans sa phase critique depuis un état initial complètement désordonné. Pour des temps courts, la fonction d'autocorrélation décroît linéairement avec  $\chi(t, t_w)$ . La dynamique est dite de *quasi-équilibre*, le FDT est satisfait et d'après (1.22) :  $T_c \chi(C(t, t_w)) \simeq 1 - C(t, t_w)$  puisque<sup>14</sup>  $X(C) = 1$ . Lorsque  $t - t_w$  augmente, le régime de vieillissement s'instaure et l'évolution linéaire de  $\chi(C)$  est abandonnée au profit d'un régime transitoire dans lequel  $X(C)$ , déterminé grâce à (1.23) diminue. Dans le régime de vieillissement ( $t \gg t_w$ ),  $X(C)$  tend vers une constante supposée universelle [18, 17, 28] notée  $X_\infty$  et appelée rapport de fluctuation-dissipation (FDR).

#### 1.2.4 Comportement d'échelle dynamique dans les transitions de phase

Nous nous intéressons au comportement d'échelle des fonctions de corrélation et de réponse dans des systèmes présentant une transition de phase dynamique. Une manière de réaliser une telle dynamique est de tremper brutalement à une température  $T_f \leq T_c$  un corps ferromagnétique initialement dans un état désordonné ( $T_i \rightarrow \infty$ ) (voir figure 1.7). A partir d'hypothèses et d'arguments d'échelle, il est possible de prédire le comportement de ces fonctions dynamiques dans la limite asymptotique :  $t \gg t_w \gg 1$ . Le temps  $t_w$  est appelé *temps d'attente* et  $t$  est le *temps d'observation*.

<sup>14</sup>Les propriétés de  $C(t, t_w)$  sont évoquées dans la prochaine partie.

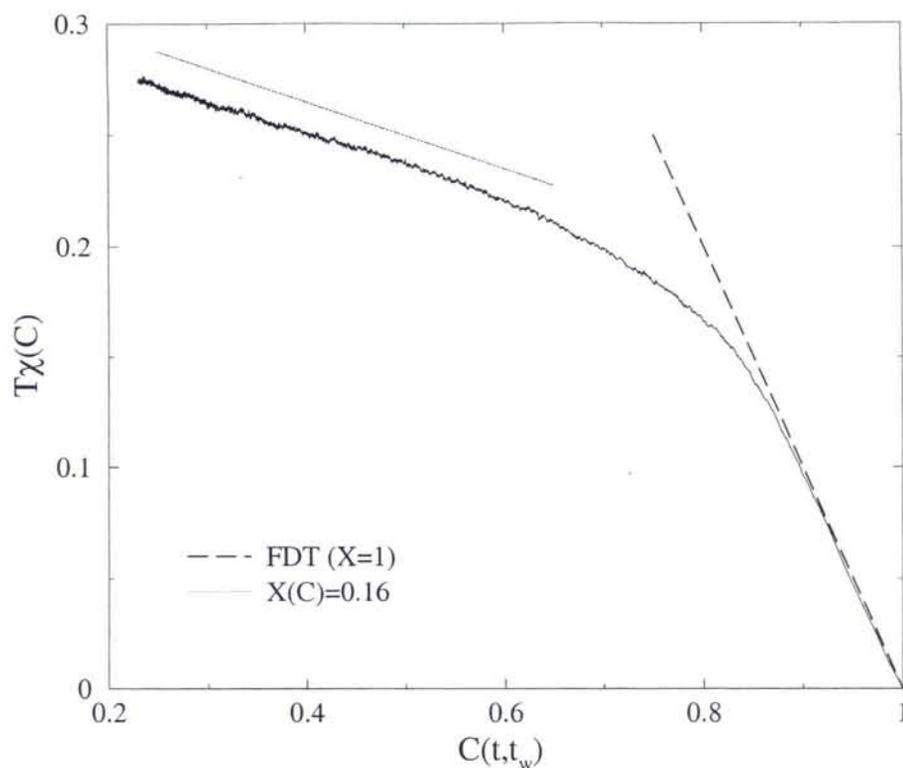


FIG. 1.6 – Susceptibilité magnétique dans le modèle XY 2D trempé depuis un état désordonné vers sa phase critique. La réponse intégrée a été calculée pour un temps d'attente  $t_w = 300$  sur un réseau carré de longueur  $L = 512$ .

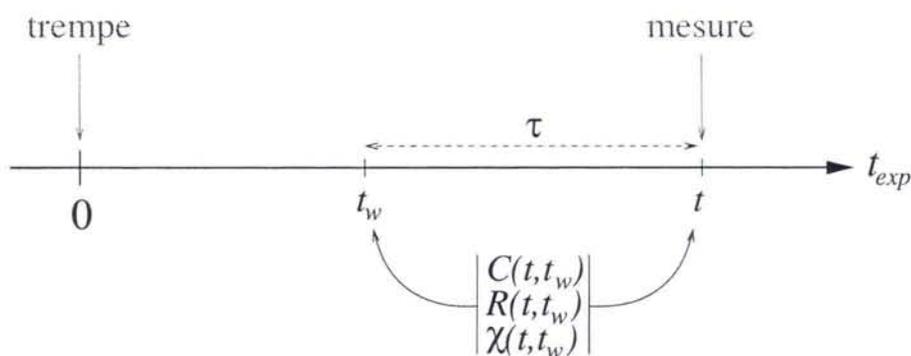


FIG. 1.7 – Mesure des fonctions dynamiques à deux temps lors d'une trempe.

### Trempe dans la phase ordonnée ( $T_f < T_c$ )

**Brisure de symétrie** La relaxation d'un système désordonné vers sa phase de basse température se manifeste par la croissance de domaines en équilibre avec le bain thermique. Par

exemple, dans le cas du modèle d'Ising, la phase ordonnée présente deux états d'équilibre d'aimantation  $\pm M_{eq}(T_f)$  (figure 1.8). La relaxation s'organise donc autour de la formation de deux types d'amas, d'aimantation respective  $+M_{eq}(T_f)$  et  $-M_{eq}(T_f)$ , comme le montre la simulation de la figure 1.2. La croissance de ces domaines de taille typique  $L$  évolue de

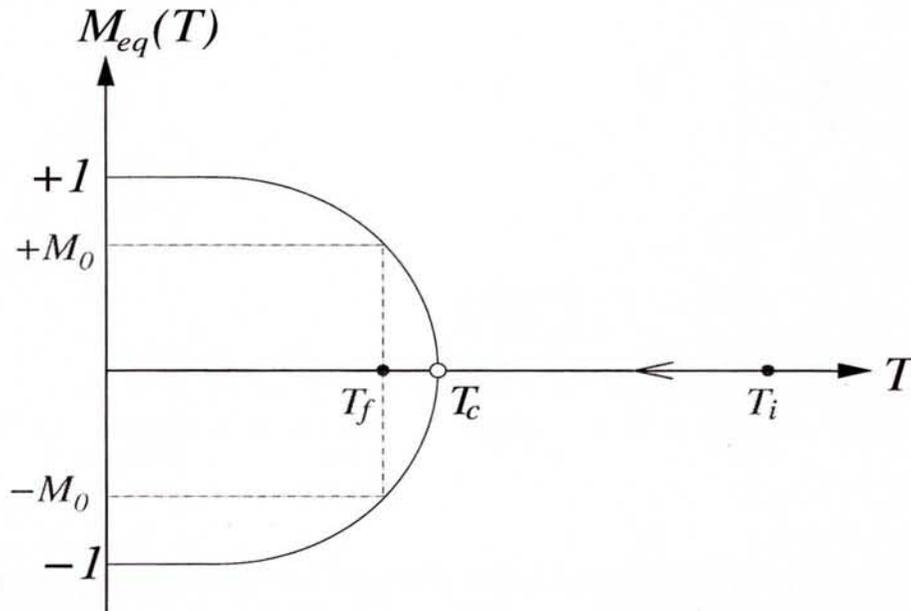


FIG. 1.8 – Trempe en-dessous de  $T_c$  depuis une phase désordonnée dans le modèle d'Ising.

manière algébrique :

$$L(t) \sim t^{1/z}, \quad (1.24)$$

où  $z > 0$  est l'exposant dynamique<sup>15</sup>. L'évolution de la croissance des amas d'aimantation opposée obéit au principe de minimisation de l'énergie de surface due aux spins situés à la frontière des domaines. Il a été montré [6] dans le cas de dynamiques non conservatives<sup>16</sup> que  $z = 2$ .

**Echelles de temps caractéristiques** Trois échelles de temps caractéristiques interviennent dans une dynamique de croissance de domaines :

1.  $t_{mic}$  : la durée typique de renversement d'un spin est notée  $t_{mic} \sim \Lambda^z$  où  $\Lambda$  est une longueur typique de l'ordre du pas du réseau. Ce temps est associé à l'ensemble des processus microscopiques de la dynamique.
2.  $t_w$  : durant le temps écoulé entre l'instant initial et le temps d'attente, les domaines ordonnés ont crû pour atteindre une taille typique  $L(t_w) \sim t_w^{1/z}$ . A l'intérieur de ces

<sup>15</sup>Remarquons que la longueur de corrélation  $\xi = \xi_{eq}(T)$  reste finie et inférieure à la taille des domaines ordonnés.

<sup>16</sup>Pour des systèmes à paramètre d'ordre conservé (fluides binaires [6], chaîne d'Ising avec dynamique de Kawasaki [57, 58]) les analyses numériques et théoriques montrent que  $z = 3$ .

domaines les spins sont en équilibre thermique avec le bain. De ce fait, pour des différences de temps  $\tau \equiv t - t_w \ll t_w$ , le système paraît équilibré et satisfait le théorème de fluctuation dissipation (voir figure 1.6).

3.  $t_{sc}$  : pour  $\tau \gtrsim t_w$ , la croissance algébrique d'amas équilibrés conduit à une dynamique régie par la diffusion des parois de domaines. Le FDT n'est plus satisfait et l'invariance par translation dans le temps est brisée. D'après l'hypothèse d'échelle dynamique, le système évolue en fonction de la variable d'échelle  $t/t_w$ . Pour  $\tau > t_{sc}$ , les fonctions de corrélation et de réponse entrent dans un régime d'échelle où leur dépendance en fonction de  $t/t_w$  devient algébrique. D'autre part, le taux de fluctuation dissipation  $X(t, t_w) < 1$  tend vers une constante notée  $X_\infty$ .

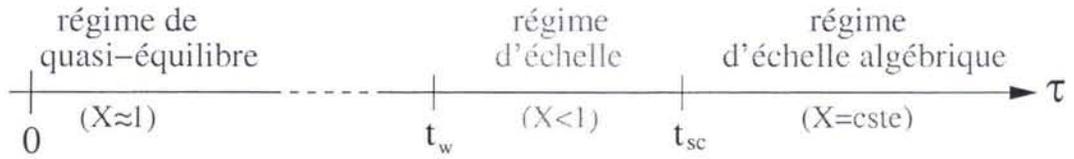


FIG. 1.9 – Echelle de temps caractéristiques lors d'une transition de phase dynamique.

**Hypothèse d'échelle dynamique** Les simulations et les mesures expérimentales de facteurs de structure  $\tilde{C}(\mathbf{k}, t)$  [7, 8] et de corrélations spatiales  $C(\mathbf{r}, t)$  montrent que pour des temps longs, l'évolution du système est paramétrée par la longueur typique des amas  $L(t)$  [6]. Cette hypothèse implique les formes d'échelle suivantes :

$$C(\mathbf{r}, t) \approx g\left(\frac{r}{L(t)}\right) \quad (1.25)$$

et

$$\tilde{C}(\mathbf{k}, t) \approx L^d(t)g'(kL(t)) , \quad (1.26)$$

où  $L(t) \sim t^{1/z}$  pour un modèle de ferromagnétique trempé sous son point de Curie. De façon plus générale, l'hypothèse d'échelle statue que l'évolution de la plupart des quantités à deux temps  $t_w$  et  $t \geq t_w$  est paramétrée par une fonction d'échelle de la variable  $L(t_w)/L(t)$  lorsque  $t \gg t_w \gg 1$ .

Pour les fonctions d'autocorrélation à deux temps, l'hypothèse d'échelle donne<sup>17</sup> :

$$C(t, t_w) \sim f\left(\frac{L(t_w)}{L(t)}\right) . \quad (1.27)$$

Dans la limite  $L(t) \gg L(t_w)$  correspondante à  $t - t_w > t_{sc} \gg 1$ , la fonction d'échelle  $f$  adopte un comportement algébrique :  $f(y) \sim y^{\lambda_C}$  où  $\lambda_C$  est un nouvel exposant dynamique

<sup>17</sup>L'effet de la température n'apparaît pas explicitement dans ces formes d'échelle, il intervient implicitement dans la loi de  $L(t)$ .

introduit par Fisher et Huse [9] lors de l'étude de la relaxation de verres de spin. Avec la relation (1.24), la loi d'échelle relative aux fonctions d'autocorrélation devient :

$$C(t, t_w) \approx \mathcal{A}_C f_C \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad (1.28)$$

avec  $f_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-\lambda_C/z}$  pour  $t \gg t_w$ .

**Formes d'échelle** Les résultats analytiques sur le modèle sphérique [16] et les simulations sur les modèles d'Ising uni- et bidimensionnel [18] montrent qu'au départ de la dynamique, les fonctions d'autocorrélation décroissent rapidement de  $C(t_w, t_w) = 1$  vers une valeur plateau :  $q_{EA} = M_{eq}^2(T)$  où  $M_{eq}(T)$  est la densité d'aimantation à l'équilibre à la température  $T$ . Ainsi, dans le régime d'échelle, les corrélations se comportent comme [6] :

$$C(t, t_w) \simeq M_{eq}^2(T) f_C \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad (1.29)$$

où, dans la limite asymptotique :

$$f_C(x) \simeq A_C x^{-\lambda_C/z}. \quad (1.30)$$

On remarque qu'en se plaçant à l'instant  $t = t_w$ , on identifie l'amplitude de  $C(t, t_w)$  dans (1.28) avec  $C(t_w, t_w) \approx M_{eq}^2(T)$  si  $t_w \rightarrow \infty$ , redonnant ainsi la forme (1.29).

L'hypothèse d'échelle appliquée aux fonctions d'autoréponse  $R(t, t_w)$  implique que, dans la limite  $t \gg t_w$ , son comportement dynamique est encore décrit par le rapport de deux longueurs typiques  $L(t)$  et  $L(t_w)$ , toujours avec  $L(t) \sim t^{1/z}$ . De ce fait, on en déduit que dans la limite  $t \gg t_w$  :

$$R(t, t_w) \approx \bar{f} \left( \frac{L(t_w)}{L(t)} \right) = \bar{f} \left( \left[ \frac{t_w}{t} \right]^{1/z} \right). \quad (1.31)$$

Comme pour les fonctions d'autocorrélation, le comportement asymptotique de la fonction d'échelle  $\bar{f}$  est algébrique dans la limite asymptotique et caractérisé par l'exposant  $\lambda_R$ . La forme générale admise pour  $R(t, t_w)$  est donc de la forme :

$$R(t, t_w) \simeq t_w^{-1-a} f_R \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad (1.32)$$

où  $a > 0$  est un nouvel exposant et dans la limite  $x = t/t_w \gg 1$  ;

$$f_R(x) \simeq A_R x^{-\lambda_R/z}, \quad (1.33)$$

où  $\lambda_R$  est l'exposant de la réponse [16] et  $A_R$  est une amplitude.

La conjecture (1.32) est d'une part en accord avec les calculs analytiques de fonction de réponse dans le modèle sphérique à  $d$  dimensions [15] où

$$R(t, t_w) \simeq (4\pi)^{-d/2} \left( \frac{t}{t_w} \right)^{d/4} (t - t_w)^{-d/2}.$$

D'autre part, l'extension de la théorie de l'invariance conforme appliquée aux systèmes dynamiques<sup>18</sup> [38, 39, 42] donne une forme générale pour  $R(t, t_w)$  (voir annexe C.) tout à fait en accord avec (1.32) et (1.33). Ce calcul aboutit à :

$$R(t, t_w) \approx \left(\frac{t}{t_w}\right)^{1+a-\lambda_R/z} (t-t_w)^{-1-a}, \quad (1.34)$$

confirmant également l'hypothèse d'échelle sur la réponse. S'il a été longtemps admis que les exposants  $\lambda_C$  et  $\lambda_R$  étaient égaux, les calculs des fonctions de corrélation et de réponse de Picone et Henkel dans le modèle sphérique ont montré qu'ils sont distincts lorsque l'état initial comporte des corrélations initiales à longue portée [16, 12]. Dans cette situation :

$$\lambda_C = \lambda_R + \alpha, \quad (1.35)$$

où  $\alpha$  est défini par la transformée de Fourier des corrélations initiales :

$$\tilde{C}(\mathbf{k}, 0) \approx |\mathbf{k}|^\alpha. \quad (1.36)$$

Ce résultat a été par la suite confirmé numériquement [30, 37] dans le modèle XY 2D. Lorsque la configuration initiale des spins est totalement désordonnée ( $T_i \rightarrow \infty$ ), les fonctions  $f_C$  et  $f_R$  décroissent alors avec le même exposant  $-\lambda/z$  où  $\lambda = \lambda_C = \lambda_R$ .

Le comportement dynamique du taux de fluctuation-dissipation  $X(t, t_w)$  peut se déduire de (1.29) et (1.32) grâce à sa définition (1.21). En effet, d'après (1.29, 1.30) :

$$\frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w} \simeq \frac{M_{eq}^2(T)}{t_w} A_{C'} \left(\frac{t}{t_w}\right)^{-\lambda/z}, \quad t \gg t_w \quad (1.37)$$

d'où :

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{\partial_{t_w} C(t, t_w)} \simeq T \frac{A_R}{A_{C'}} \frac{t_w^{-a}}{M_{eq}^2(T)}, \quad t \gg t_w \gg 1. \quad (1.38)$$

Ainsi dans le cas d'une trempe en dessous du point critique, le rapport de fluctuation-dissipation s'annule :  $X_\infty \equiv \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w) = 0$ .

## Trempe critique

**Description phénoménologique** Dans le cas d'une trempe critique depuis un état désordonné, le système relaxe en développant des amas critiques, comme le montre la figure 1.10. Alors qu'à l'équilibre dans la limite thermodynamique  $\xi \rightarrow \infty$ , dans une trempe critique des domaines critiques de taille typique  $\xi$  croissent de manière algébrique [6] :

$$\xi(t) \sim t^{1/z_c}, \quad (1.39)$$

<sup>18</sup>Le résultat est obtenu en considérant que  $R(t, t_w)$  se transforme de manière covariante sous l'action de transformations d'échelle locales.

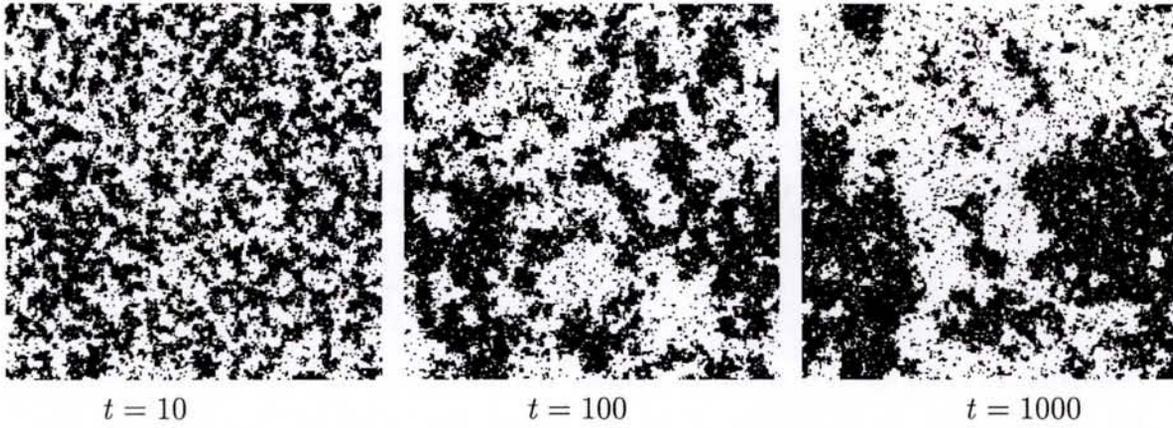


FIG. 1.10 – Croissance des domaines critiques dans le modèle d'Ising ( $L^2 = 256^2$ ) trempé à  $T_c$  depuis un état initial désordonné. La valeur des temps d'observation correspond au nombre de balayages Monte Carlo effectués.

où  $z_c$ , l'exposant critique dynamique, est a priori différent<sup>19</sup> de  $z$ . Le système paraît critique sur une longueur de l'ordre de  $\xi(t)$  bien qu'il soit décorrélé sur une échelle de longueur supérieure à  $t^{1/z_c}$ . La divergence du temps de relaxation s'explique par la croissance continue des amas corrélés<sup>20</sup>. Le temps de relaxation  $t_{rel}$  étant lié à la longueur des domaines critiques par :  $t_{rel} \sim \xi^{z_c}$ , il devient donc ici infini.

**Comportement critique** Le comportement critique des corrélations spatiales déduit d'arguments d'échelle [18] conduit à :

$$C(\mathbf{r}, t) \approx |\mathbf{r}|^{-2\beta/\nu} g^c \left( \frac{|\mathbf{r}|}{L(t)} \right), \quad (1.40)$$

où  $\beta$  et  $\nu$  sont les exposants critiques habituels et  $L(t) \sim t^{1/z_c}$ . La forme d'échelle des fonctions d'autocorrélation peut être déduite de (1.29) en remarquant qu'au voisinage du point critique  $M_{eq}^2(T) \sim |T - T_c|^{2\beta} \sim \xi_{eq}^{2\beta/\nu}$  et  $\xi_{eq} \sim t_w^{1/z_c}$ . Dans le régime d'échelle  $t - t_w > t_{eq}$ , les fonctions de corrélations prennent la forme d'échelle<sup>21</sup> :

$$C(t, t_w) \simeq t_w^{-a_c} f_C \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad a_c = 2\beta/\nu z_c = (d - 2 + \eta)/z_c. \quad (1.41)$$

Dans la limite asymptotique,  $f_C$  décroît algébriquement :

$$f_C(x) \simeq A_C x^{-\lambda_C/z_c}. \quad (1.42)$$

<sup>19</sup>Pour le modèle d'Ising bidimensionnel,  $z_c \simeq 2.17 \neq 2$  [59].

<sup>20</sup>toujours dans la limite d'un système infini

<sup>21</sup>Bien que les amplitudes et les fonctions d'échelle critiques de  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$  soient différentes de celles définies dans (1.30) et (1.33), nous conservons la même écriture afin de ne pas alourdir les notations. Il en est de même avec les exposants critiques  $\lambda_C$  et  $\lambda_R$ .

L'exposant critique  $\lambda_C$  est défini par [14]  $\lambda_C = d - z_c \theta$  où  $\theta$  est l'exposant critique d'*initial slip* décrivant la dynamique aux temps courts.

Toujours d'après l'hypothèse d'échelle, le profil des fonctions de réponse se présente ici sous la forme  $R(t, t_w) \sim \bar{f}(\xi(t_w)/\xi(t))$  lorsque  $\xi(t) \gg \xi(t_w)$  avec dans le cas général  $\xi(t) \sim t^{1/z_c}$ . Comme dans le cas d'une trempe dans la phase ordonnée, le comportement asymptotique de  $\bar{f}$  est algébrique et caractérisé par l'exposant critique de la réponse  $\lambda_R$ . De ce fait,  $R(t, t_w) \sim f_R(t/t_w)$  avec  $f_R(x) \sim x^{-\lambda_R/z_c}$  pour  $x \gg 1$ . D'autre part, pour de faibles intervalles de temps  $t - t_w$ , la fonction de réponse est reliée à  $C(t, t_w)$  par le FDT :  $TR(t, t_w) = \partial_{t_w} C(t, t_w)$  et en utilisant la forme (1.41) on obtient

$$\begin{aligned} TR(t, t_w) &= -a_c t_w^{-1-a_c} f_C(t/t_w) + t_w^{-1-a_c} (t/t_w) f'_C(t/t_w) \\ &= t_w^{-1-a_c} \left[ -a_c f_C \left( \frac{t}{t_w} \right) + \frac{t}{t_w} f'_C \left( \frac{t}{t_w} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.43)$$

$$\simeq t_w^{-1-a_c} f_R \left( \frac{t}{t_w} \right) . \quad (1.44)$$

Remarquons que lorsque le régime de vieillissement s'instaure, le FDT n'est plus satisfait et la fonction d'échelle  $f_R$  n'est plus reliée à  $f_C$  par le passage de (1.43) à (1.44).

Dans le régime d'échelle, on admet alors que

$$R(t, t_w) \sim t_w^{-1-a_c} f_R \left( \frac{t}{t_w} \right) , \quad (1.45)$$

où pour  $t \gg t_w \gg 1$  :

$$f_R(x) \simeq A_R x^{-\lambda_R/z_c} . \quad (1.46)$$

La forme (1.45) reste en accord avec le calcul de  $R(t, t_w)$  basé sur l'hypothèse d'invariance d'échelle locale (voir annexe C.) où :

$$R(t, t_w) \approx \left( \frac{t}{t_w} \right)^{1+a_c-\lambda_R/z_c} (t-t_w)^{-1-a_c} , \quad (1.47)$$

Le comportement asymptotique du taux de fluctuation-dissipation déduit des formes d'échelle de  $\partial_{t_w} C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$  conduit à :

$$\frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w} \simeq t_w^{-1-a_c} f_{C'} \left( \frac{t}{t_w} \right) , \quad (1.48)$$

où  $f_{C'}(x) \simeq A_{C'} x^{-\lambda_{C'}/z_c}$  pour  $x \gg 1$  et donc :

$$X(t, t_w) \simeq T_c \frac{f_R(t/t_w)}{f_{C'}(t/t_w)} \approx \mathcal{X} \left( \frac{t}{t_w} \right) . \quad (1.49)$$

Le rapport de fluctuation-dissipation tend ici vers une valeur non triviale puisque :

$$X_\infty = T_c \frac{A_R}{A_{C'}} . \quad (1.50)$$

D'après Godrèche et Luck [18, 17, 20], cette quantité représente une nouvelle grandeur universelle caractérisant une dynamique critique. Chatelain [28] a notamment vérifié par simulation Monte Carlo que le FDR n'était pas sensible à la géométrie du réseau pour les modèles d'Ising, de Potts ( $q = 4$ ) et vectoriel (*clock model*) à quatre états. Ses résultats semblent également indiquer que des systèmes appartenant à une même classe d'universalité à l'équilibre présentent le même FDR. L'universalité du FDR a également été vérifiée dans le modèle  $O(N)$  en dimension  $d = 4 - \epsilon$  par des méthodes de renormalisation [26, 27]. Le FDR a également été calculé pour la chaîne d'Ising avec une dynamique de type Glauber [60, 17] où  $X_\infty = 1/2$ . Dans le modèle d'Ising bidimensionnel, il a été trouvé  $X_\infty \simeq 0.34$  [25] et dans le modèle sphérique [20, 16]  $X_\infty = 1 - 2/d$  si  $2 < d < 4$  et  $X_\infty = 1/2$  si  $d > 4$  (voir la réf.[21] pour d'autres modèles.).

# Chapitre 2

## Etude par simulation Monte Carlo

### 2.1 Simulation des trempes

#### 2.1.1 Algorithme des dynamiques utilisées

Les simulations Monte Carlo [61] décrivant la dynamique hors équilibre de modèles à paramètre d'ordre de symétrie continue utilisent des algorithmes dits de *single spin flip*. Dans ces algorithmes, les spins sont "réactualisés" un par un avec un taux de transition propre à la dynamique utilisée. Les algorithmes de bain thermique se décrivent en trois étapes :

1. choisir un spin au hasard dans le réseau et le faire tourner d'un angle aléatoire puis calculer la variation d'énergie locale  $\Delta E_i = E'_i - E_i$  associée à la rotation du spin  $i$
2. adopter cette nouvelle configuration avec un taux de probabilité  $p$
3. retourner à l'étape 1.

L'algorithme de Metropolis est défini par

$$p_M = \min[1, \exp(-\Delta E_i/T_f)] , \quad (2.1)$$

où  $T_f$  est la température du bain thermique.

Pour une dynamique de type Glauber, le taux de probabilité  $p_G$  varie continûment avec la différence d'énergie  $\Delta E_i$  et vaut :

$$p_G = \frac{\exp(-E'_i/T_f)}{\exp(-E'_i/T_f) + \exp(-E_i/T_f)} = \frac{\exp(-\Delta E_i/T_f)}{\exp(-\Delta E_i/T_f) + 1} . \quad (2.2)$$

En considérant un système de  $N$  spins décrit par un Hamiltonien XY de la forme :

$$\mathcal{H}\{\theta\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) , \quad (2.3)$$

avec  $i, j$  premiers voisins, la différence d'énergie locale lors d'une transition  $\theta_i \rightarrow \theta'_i$  prend la forme :

$$\Delta E_i = - \sum_j [\cos(\theta'_i - \theta_j) - \cos(\theta_i - \theta_j)] . \quad (2.4)$$

Pour un système constitué de  $N$  spins, le temps est mesuré en nombre de balayages Monte Carlo, où chaque balayage équivaut à  $N$  tentatives de renversement de spins. Même si les taux de transition  $p_M$  et  $p_G$  diffèrent, les exposants dynamiques extraits des fonctions thermodynamiques restent les mêmes comme le prouvent les figures 2.1 et 2.2. La figure 2.1 représente la fonction d'autocorrélation  $\langle \sigma(t)\sigma(0) \rangle$  calculée avec les dynamiques de Metropolis et de Glauber lors d'une trempe dans la phase critique du modèle XY 2D initialement désordonné. La figure 2.2 donne l'aimantation et la fonction d'autocorrélation calculées dans le modèle XY 3D trempé dans sa phase ordonnée. L'intérêt de la dynamique de type Glau-

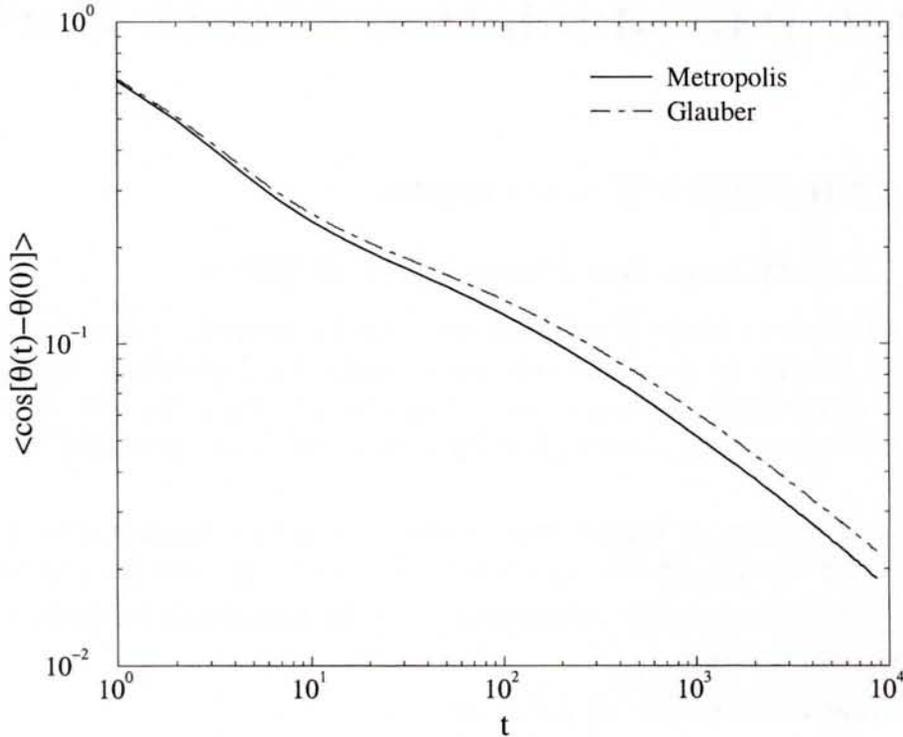


FIG. 2.1 – Evolution de la fonction d'autocorrélation  $\langle \cos[\theta(t) - \theta(0)] \rangle$  dans des simulations Monte Carlo utilisant des dynamiques Metropolis et Glauber dans le modèle XY ( $L^2 = 128^2$ ) trempé dans sa phase critique à  $T = 0.1$ .

ber est qu'elle permet, grâce à son taux de transition continu, de calculer la réponse linéaire de l'aimantation.

### 2.1.2 Préparation de l'état initial

Lors des simulations Monte Carlo, nous serons amenés à considérer trois types de configurations initiales.

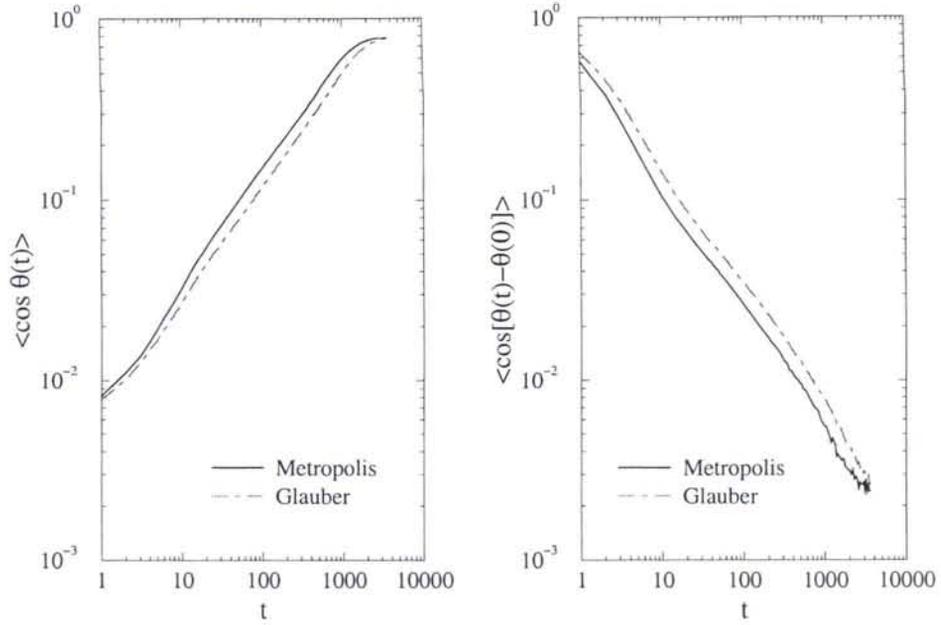


FIG. 2.2 – Aimantations et fonctions d'autocorrélation moyennées spatialement obtenues avec des dynamiques Metropolis et Glauber dans le modèle XY 3D ( $L^3 = 32^3$ ) trempé à  $T_c/2$ .

L'échantillon peut être initialement parfaitement ordonné ( $T_i = 0$ ). Dans ce cas, tous les spins pointent parallèlement dans une même direction arbitraire.

A l'inverse, la configuration initiale des spins peut être totalement désordonnée ( $T_i \rightarrow \infty$ ). L'angle initial des spins est alors choisi aléatoirement dans l'intervalle  $[0; 2\pi[$ .

La troisième option consiste à thermaliser l'échantillon à une température initiale donnée. L'équilibration thermique nécessite une simulation Monte Carlo utilisant l'algorithme de Wolff [62]. Cet algorithme dit "de cluster", ne renverse pas qu'un seul spin à chaque opération mais tout un bloc de spins. Les algorithmes de cluster sont particulièrement adaptés à la préparation d'échantillons thermalisés à une température proche du point critique. En effet, au voisinage du point critique, la longueur de corrélation  $\xi$  diverge :  $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$  où  $\nu (> 0)$  est l'exposant critique associé à la longueur de corrélation. Or le temps d'équilibration  $\tau$  est relié à  $\xi$  par l'exposant dynamique  $z_c$  de telle sorte que  $\tau \sim \xi^{z_c} \sim |T - T_c|^{-\nu z_c}$ . Ainsi au voisinage du point critique, le temps d'équilibration  $\tau$  diverge. Ce phénomène est appelé *ralentissement critique*. L'algorithme de Wolff pallie ce ralentissement critique dans la mesure où le renversement de spin affecte des amas entiers de longueur typique  $L \sim \xi$ . Cet algorithme est défini comme suit :

1. choisir un spin  $\vec{S}_i$  au hasard ainsi qu'un vecteur directeur  $\vec{r}$  aléatoirement choisi
2. opérer une réflexion de  $\vec{S}_i$  par rapport au plan perpendiculaire à  $\vec{r}$  :  $\vec{S}_i \rightarrow R(\vec{r})\vec{S}_i \equiv \vec{S}'_i$  et marquer ce site

- activer toutes ses liaisons voisines avec une probabilité

$$p(\vec{S}_i, \vec{S}_j) = 1 - \exp\{\min[0, 2\beta(\vec{r} \cdot \vec{S}_i)(\vec{r} \cdot \vec{S}_j)]\}$$

et opérer la même rotation  $R(\vec{r})$  sur les sites activés puis les marquer

- répéter l'étape précédente avec ces sites activés en ne considérant que leur(s) liaison(s) non activée(s) jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de nouvelles liaisons

Ce processus doit être répété un nombre de fois dépendant de la nature et des paramètres du système. Pour nous assurer de la complète thermalisation, il est nécessaire de calculer une fonction d'autocorrélation  $\chi$  :

$$\chi(t) = \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t')m(t'+t) - \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t') \times \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t'+t), \quad (2.5)$$

dans laquelle  $t_{max}$  est le nombre total de boucles de l'algorithme Wolff et  $m$  est l'aimantation du système.

Le graphe 2.3 montre l'évolution de  $\chi$  en fonction du nombre d'itération Wolff sur un réseau

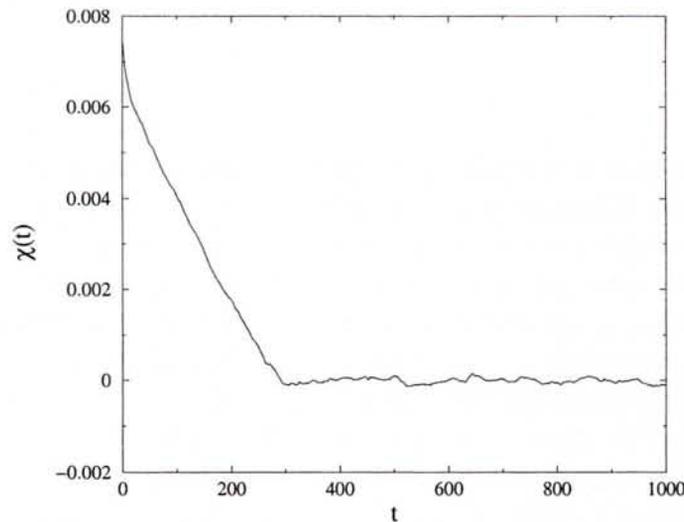


FIG. 2.3 – Fonction d'autocorrélation au cours du processus de thermalisation à température critique d'un réseau carré de taille  $L^2 = 512^2$  initialement ordonné. Il apparaît que  $\tau \approx 300$  boucles Wolff.

carré de taille  $L^2 = 512^2$  thermalisé à  $T = T_{KT}$ . Il est possible de repérer un temps de décorrélation  $\tau$  correspondant au nombre de boucles Wolff nécessaire pour décorréler un échantillon. Dans la pratique, nous utilisons un nombre d'itérations Wolff proche de  $20\tau$ . Le temps de décorrélation doit être évalué pour chaque nouvelle température initiale considérée.

## 2.2 Calcul des quantités thermodynamiques

### 2.2.1 Grandeurs moyennes et fluctuations

Les simulations Monte Carlo à l'équilibre constituent un processus de Markov générant une suite d'états sélectionnés au hasard vérifiant une distribution de Boltzmann. Ainsi, le calcul de grandeurs thermodynamiques (aimantation, chaleur spécifique, susceptibilité, etc...) nécessite de moyennner leurs valeurs afin d'éliminer leur fluctuations. Pour des systèmes à l'équilibre on peut moyennner ces grandeurs sur un même échantillon à condition de *relever* leur valeurs entre des états décorrés. Cette méthode ne peut évidemment pas être utilisée pour l'étude d'un système dynamique. Les fluctuations affectées aux quantités thermodynamiques sont éliminées en moyennnant les résultats sur plusieurs échantillons décorrés. Supposons que l'on réalise la trempe d'un système parfaitement ordonné initialement à une température  $T_f$  finie. Malgré l'unicité de l'état initial, les différentes réalisations de l'algorithme sur le choix des sites et la valeur dont l'angle est changé définissent autant de chaînes markoviennes aux histoires différentes. A chaque échantillon correspond une propre réalisation des fluctuations thermiques. Si on travaille sur une trempe effectuée depuis une température  $T_i > 0$ , on peut générer plusieurs états initiaux différents engendrant ainsi leur propre chaîne de Markov. Dans ce dernier cas, la moyenne est opérée sur les états initiaux et sur les réalisations du bruit thermique.

### 2.2.2 Fonctions d'autocorrélation

Le calcul des fonctions de corrélation à deux temps tient une place de choix dans l'étude de transitions de phase dynamiques. Grâce à des arguments d'échelle et à l'approximation des ondes de spin, nous disposons de la forme de la loi d'échelle régissant le comportement dynamique des fonctions de corrélation dans le modèle XY. Le second intérêt de ces fonctions est qu'elles permettent d'étudier l'écart de la dynamique par rapport à la situation d'équilibre grâce au théorème de fluctuation-dissipation (1.21). Dans notre étude, nous nous focalisons sur les fonctions d'autocorrélation à deux temps :

$$C(t, t_w) = \langle \sigma(t) \sigma(t_w) \rangle, \quad (2.6)$$

où les crochets  $\langle \cdot \rangle$  représentent une moyenne sur les réalisations du bruit thermique.

Pour le modèle XY, la fonction d'autocorrélation est exprimée en fonction des paramètres angulaires des spins :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \cos[\theta_i(t) - \theta_i(t_w)] \rangle, \quad (2.7)$$

où  $N$  est le nombre de sites du réseau. L'invariance par translation spatiale du système nous permet de moyennner les corrélations sur l'ensemble des sites. Le résultat final est obtenu en moyennnant les fonctions d'autocorrélation sur un grand nombre d'échantillons afin d'atténuer les fluctuations dues au bruit thermique.

### 2.2.3 Susceptibilité magnétique

A priori, la fonction de réponse  $R(t, t_w)$  ne peut pas être calculée par simulation à partir de sa définition

$$R(t, t_w) = \left. \frac{\delta \langle \phi(t) \rangle}{\delta h(t_w)} \right|_{h(t_w) \rightarrow 0} \quad (2.8)$$

dans la mesure où elle fait intervenir le rapport de deux quantités infinitésimales. Néanmoins il est possible de calculer une fonction de réponse intégrée entre deux temps  $t_1$  et  $t_2$  entre lesquels un faible champ magnétique  $\mathbf{h}$  est appliqué. Cette fonction s'apparente à une susceptibilité magnétique et vaut :

$$\chi(t, t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} R(t, u) du \quad \text{avec} \quad 0 \leq t_1 < t_2 \leq t. \quad (2.9)$$

En fonction des valeurs de  $t_1$  et  $t_2$ , deux scénarios sont envisagés.

Si  $t_1 = 0$  et  $t_2 = t_w$ , la susceptibilité  $\chi$  est alors proportionnelle à une aimantation thermorémanente  $M_{TRM}$  (pour Thermo-Remanent Magnetisation) :

$$\frac{1}{h} M_{TRM}(t, t_w) = \int_0^{t_w} R(t, u) du. \quad (2.10)$$

Le cas  $t_1 = t_w$  et  $t_2 = t$  correspond au scénario ZFC (pour Zero Field Cooled) [24] où on mesure l'aimantation induite par le champ  $\mathbf{h}$  :

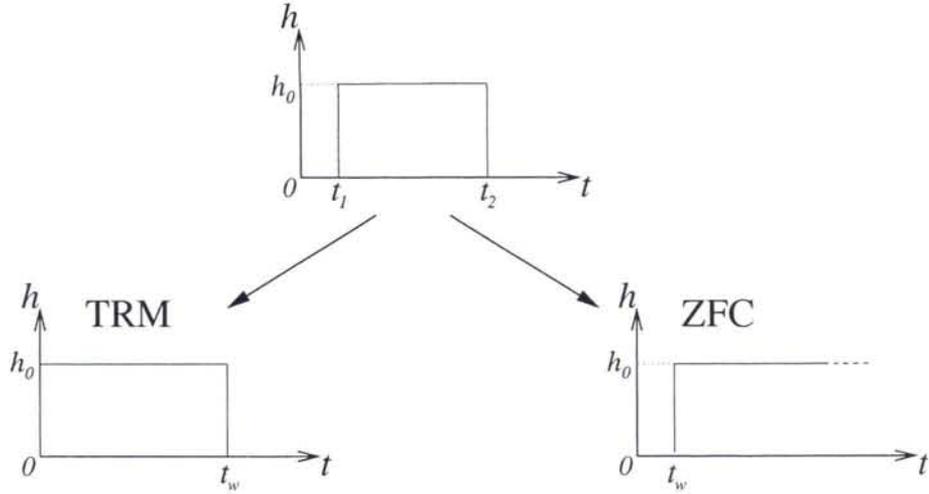
$$\chi(t, t_w) = \int_{t_w}^t R(t, u) du. \quad (2.11)$$

Afin d'éviter les effets non linéaires l'amplitude de  $\mathbf{h}$  doit rester faible. De plus, la présence d'un champ extérieur brise la symétrie du système et risque de favoriser une direction d'aimantation. Pour supprimer cette anisotropie, la direction du champ magnétique local est distribuée aléatoirement pour chaque échantillon.

Les approches TRM et ZFC ont chacune leur inconvénient. L'aimantation thermorémanente est obtenue par intégration de  $R(t, u)$  pour  $u$  compris entre 0 et  $t_w$ , or pour  $u \ll t_w$  le système n'est pas encore entré dans le régime d'échelle. De ce fait, la borne inférieure de l'intégrale (2.10) peut modifier la valeur de l'exposant  $a$ , défini dans (1.32) et (1.45), lorsque celui-ci est extrait de l'analyse de l'aimantation TRM. Ce problème n'est évidemment pas rencontré au cours d'une simulation ZFC lorsque le temps d'attente est suffisamment long. Cependant, la borne supérieure de l'intégrale peut poser des problèmes de convergence en fonction de la forme de  $R(t, u)$ . Dans la pratique, nous préférons avant tout éviter les contributions pré-asymptotiques [63] en calculant la susceptibilité dans le scénario ZFC.

Afin d'obtenir une expression permettant de calculer numériquement  $\chi(t, t_w)$ , examinons l'influence de  $\mathbf{h}$  sur la valeur moyenne de l'aimantation dans la limite continue :

$$\langle \vec{\phi}(\vec{x}, t) \rangle_{\mathbf{h}} = \langle \vec{\phi}(\vec{x}, t) \rangle_0 + \int d\vec{x}' \chi(\vec{x} - \vec{x}', t, t_w) \mathbf{h}(\vec{x}') \quad (2.12)$$

FIG. 2.4 – Profil de  $h(t)$  lors des approches TRM et ZFC.

où  $\mathbf{h}(\vec{x})$  vérifie  $\overline{\mathbf{h}(\vec{x})} = 0$  et  $\overline{\mathbf{h}(\vec{x})\mathbf{h}(\vec{x}')} = h_0^2\delta(\vec{x} - \vec{x}')$ ,  $\overline{\cdot}$  désignant une moyenne sur les réalisations du champ. On en déduit alors :

$$\chi(\vec{0}, t, t_w) \equiv \chi(t, t_w) = \frac{1}{h_0^2} \overline{\langle \vec{\phi}(\vec{x}, t) \rangle_h \mathbf{h}(\vec{x})}. \quad (2.13)$$

En discrétisant cette relation, on obtient pour le modèle XY :

$$\chi(t, t_w) = \frac{1}{Nh_0^2} \sum_{i=1}^N \overline{\langle \cos \theta_i(t) h_i^x(t) + \sin \theta_i(t) h_i^y(t) \rangle}, \quad (2.14)$$

où  $h_i^{x,y}$  sont les composantes du champ magnétique et  $\langle \cdot \rangle$  représente la moyenne sur les échantillons. Nous choisissons une distribution de champ bimodale :

$$h_i^{x,y} = \begin{cases} \pm h_0 & \text{si } t \geq t_w \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (2.15)$$

réactualisée pour chaque échantillon. Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 1.2.3, la violation du FDT peut être abordée en étudiant le comportement de la susceptibilité ZFC en fonction de l'autocorrélation  $C(t, t_w)$  calculée en l'absence de champ extérieur. Étant donné que le calcul de  $\chi(t, t_w)$  nécessite l'application d'un champ magnétique, il faut donc calculer séparément  $C(t, t_w)$  sur un système identique sans champ extérieur. En choisissant un champ magnétique aléatoire suffisamment faible ( $h_0 = 0.04$ ), nous avons vérifié qu'il n'influe pas significativement sur le comportement des fonctions d'autocorrélation. De ce fait, la représentation paramétrique de  $\chi(C)$  ne nécessite qu'une seule simulation où  $\chi(t, t_w)$  et  $C(t, t_w)$  sont calculés simultanément.

### 2.2.4 Fonction de réponse

L'étude numérique de la réponse d'un système à un champ magnétique consiste généralement à analyser le comportement de la susceptibilité. La réponse linéaire étant définie par le rapport de deux quantités infinitésimales, il est impossible de la calculer numériquement à partir de (2.8). Cependant, Chatelain et Ricci-Tersenghi [35, 36] ont montré qu'il est possible de calculer la réponse magnétique  $R(t, t_w)$  dans une dynamique de type Glauber.

L'équation maîtresse en temps discret de la dynamique de bain thermique est donnée par :

$$P(\{\theta'\}, t+1) = \sum_{\{\theta\}} p_G(\{\theta\} \rightarrow \{\theta'\}) P(\{\theta\}, t), \quad (2.16)$$

où  $p_G(\{\theta\} \rightarrow \{\theta'\})$  est donné par (2.2),  $P(\{\theta\}, t)$  étant la probabilité que le système soit dans la configuration  $\{\theta\}$  à l'instant  $t$ . L'expression de l'aimantation moyenne dans la direction  $x$  au site  $i$  s'écrit alors :

$$\langle \cos \theta_i(t) \rangle = \sum_{\{\theta\}} \cos(\theta_i) P(\{\theta\}, t) = \sum_{\{\theta\}, \{\theta'\}} \cos(\theta_i) P(\{\theta\}, t | \{\theta'\}, t_w+1) P(\{\theta'\}, t_w+1) \quad (2.17)$$

qui, grâce à l'équation maîtresse (2.16) donne

$$\langle \cos \theta_i(t) \rangle = \sum_{\{\theta\}, \{\theta'\}} \cos(\theta_i) P(\{\theta\}, t | \{\theta'\}, t_w+1) \sum_{\{\theta''\}} p_G^h(\{\theta''\} \rightarrow \{\theta'\}) P(\{\theta''\}, t_w), \quad (2.18)$$

où  $p_G^h$  est le taux de la transition  $\{\theta''\} \rightarrow \{\theta'\}$  en présence d'un champ extérieur  $\mathbf{h} = (h^x, h^y)$  appliqué entre  $t_w$  et  $t_w + 1$  :

$$p_G^h(\{\theta''\} \rightarrow \{\theta'\}) = \frac{\exp[-\beta \mathcal{H}\{\theta', \mathbf{h}\}]}{\exp[-\beta \mathcal{H}\{\theta'', \mathbf{h}\}] + \exp[-\beta \mathcal{H}\{\theta', \mathbf{h}\}]} \quad (2.19)$$

La composante suivant  $x$  de la fonction de réponse s'obtient en dérivant (2.18) par rapport au champ local  $h_i^x$  :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \langle \cos \theta_i(t) \rangle}{\partial h_i^x} \right|_{h_i^x \rightarrow 0} &= \sum_{\substack{\{\theta\}, \{\theta'\} \\ \{\theta''\}}} \cos \theta_i P(\{\theta\}, t | \{\theta'\}, t_w+1) \left. \frac{\partial p_G^h(\{\theta''\} \rightarrow \{\theta'\})}{\partial h_i^x} \right|_{h_i^x \rightarrow 0} P(\{\theta''\}, t_w) \\ &= \sum_{\{\theta\}, \{\theta'\}} \left\{ \cos \theta_i P(\{\theta\}, t | \{\theta'\}, t_w+1) \right. \\ &\quad \left. \times \sum_{\{\theta''\}} p_G^h(\{\theta''\} \rightarrow \{\theta'\}) P(\{\theta''\}, t_w) [\beta \cos \theta'_i - \beta \cos \theta_i^W] \right\} \quad (2.20) \end{aligned}$$

avec :

$$\cos \theta_i^W = p_G^h(\{\theta''\} \rightarrow \{\theta'\}) \cos \theta'_i + (1 - p_G^h(\{\theta''\} \rightarrow \{\theta'\})) \cos \theta''_i \quad (2.21)$$

définissant une des composantes du champ de Weiss local. En remarquant que la deuxième ligne de (2.20) vaut  $\beta[\cos \theta_i(t_w+1) - \cos \theta_i^W(t_w+1)]$ , nous obtenons :

$$\frac{\delta \langle \cos \theta_i(t) \rangle}{\delta h_i^x(t_w)} = \left. \frac{\partial \langle \cos \theta_i(t) \rangle}{\partial h_i^x} \right|_{h_i^x \rightarrow 0} = \beta \langle \cos \theta_i(t) [\cos \theta_i(t_w+1) - \cos \theta_i^W(t_w+1)] \rangle. \quad (2.22)$$

Le calcul de la composante suivant  $y$  de la réponse suit exactement le même principe et mène au résultat final :

$$R(t, t_w) = \frac{\beta}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \langle \cos \theta_i(t) [\cos \theta_i(t_w+1) - \cos \theta_i^W(t_w+1)] \rangle + \langle \sin \theta_i(t) [\sin \theta_i(t_w+1) - \sin \theta_i^W(t_w+1)] \rangle \right\} . \quad (2.23)$$

Cette démarche peut se généraliser à des fonctions de réponse spatiales :

$$R_{ij}(t, t_w) = \left( \frac{\delta \langle \cos \theta_i(t) \rangle}{\delta h_j^x(t_w)} + \frac{\delta \langle \sin \theta_i(t) \rangle}{\delta h_j^y(t_w)} \right) \Big|_{\mathbf{h}_j(t_w)} \quad (2.24)$$

$$= \beta \langle \cos \theta_i(t) [\cos \theta_j(t_w+1) - \cos \theta_j^W(t_w+1)] \rangle + \beta \langle \sin \theta_i(t) [\sin \theta_j(t_w+1) - \sin \theta_j^W(t_w+1)] \rangle . \quad (2.25)$$

Le principal intérêt de ce calcul est qu'il n'inclut aucune contribution non linéaire dans la réponse.

### 2.2.5 Rapport de fluctuation-dissipation

Le taux de fluctuation-dissipation  $X(t, t_w)$  défini dans (1.21) permet d'apprécier l'écart de la dynamique par rapport à la situation d'équilibre. A partir du FDT valable à l'équilibre, on voit que cet écart peut être estimé quantitativement par  $X(t, t_w)$ ,  $X = 1$  correspondant à une situation d'équilibre. Dans la plupart des cas, le taux de fluctuation-dissipation tend vers une constante  $X_\infty$  appelée rapport de fluctuation-dissipation (FDR) défini par :

$$X_\infty \equiv \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w) . \quad (2.26)$$

Dans les systèmes magnétiques purs, cette quantité tend généralement vers une valeur non triviale à  $T_c$  alors qu'elle s'annule pour des trempes sous le point critique. Dans la pratique, nous disposons de deux méthodes permettant d'extraire le FDR à partir des simulations.

La première méthode concerne les systèmes présentant, dans la limite asymptotique, un taux de fluctuation-dissipation uniquement fonction de  $C(t, t_w)$ . Dans ce cas<sup>1</sup>, l'intégration du FDT donne dans le cadre d'un scénario ZFC :

$$\int_{t_w}^t TR(t, u) du = \int_{C(t_w, t_w)}^{C(t, t_w)} X(C') dC' \quad (2.27)$$

$$T\chi(t, t_w) = 1 - X_\infty C(t, t_w) , \quad (2.28)$$

si  $C(t_w, t_w) = 1$ . Dans la limite des longs temps d'observation, l'opposé de la pente de la droite extrapolée sur  $\chi(C)$  donne une estimation de  $X_\infty$ .

<sup>1</sup>Cette situation est très fréquemment rencontrée dans les verres de spin et les systèmes frustrés.

Dans le cas général, le FDR se détermine directement à partir de la limite asymptotique de  $X(t, t_w)$  lui-même défini par :

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{\partial_{t_w} C(t, t_w)} \simeq \frac{TR(t, t_w)}{C(t, t_w+1) - C(t, t_w)} \quad (2.29)$$

ou

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{C(t, t_w+1) - C(t, t_w)} \quad (2.30)$$

en temps discret. L'inconvénient du calcul réside dans la dérivation numérique de  $C(t, t_w)$  qui, en raison de sa faible amplitude, répercute d'importantes fluctuations sur  $X(t, t_w)$ . L'échantillonnage pour de tels calculs est d'autant plus important qu'à la limite asymptotique, l'amplitude de la réponse devient du même ordre de grandeur que les fluctuations de  $\Delta_{t_w} C(t, t_w)$ . En fonction de la température de trempe et du modèle, il arrive que  $X(t \gg 1, t_w)$  reste inexploitable en dépit d'un très grand échantillonnage.

### 2.2.6 Estimation des erreurs

Les calculs de valeur moyenne d'observable à partir des simulations Monte Carlo comportent une erreur statistique due aux fluctuations générées par l'algorithme. L'effet des fluctuations est considérablement atténué lorsqu'on opère une moyenne des résultats sur différents échantillons décorrélés et/ou sur différentes réalisations du bruit thermique (la validité de cette hypothèse dépend de la "qualité" du générateur de nombres aléatoires). Néanmoins il subsiste une incertitude sur le résultat final qu'il est possible d'évaluer en calculant la déviation standard  $\sigma$  de la moyenne de l'observable [61] :

$$\sigma_A(t) = \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (A_i(t) - \langle A(t) \rangle)^2}{N-1}} = \sqrt{\frac{1}{N-1} (\langle A^2(t) \rangle - \langle A(t) \rangle^2)}, \quad (2.31)$$

où  $A_i(t)$  est la valeur à l'instant  $t$  de l'observable  $A$  pour le  $i^e$  échantillon et  $N$  est le nombre d'échantillons total.

Nous utiliserons notamment ces calculs d'erreur lors de l'analyse des fonctions de réponse  $R(t, t_w)$ . Comme ces fonctions tendent rapidement vers zéro il existe une valeur minimale de  $t$  notée  $t_{err}(N)$  pour laquelle  $R(t, t_w) < \sigma_R(t)$ . Par conséquent, l'ensemble des valeurs de  $R(t, t_w)$  pour  $t \geq t_{err}(N)$  n'a plus aucune validité puisque le signal est entièrement écranté par le bruit statistique.

## Chapitre 3

# Le modèle XY bidimensionnel

### 3.1 Propriétés à l'équilibre

#### 3.1.1 Présentation générale

L'intérêt du modèle XY ou  $O(2)$  en physique du solide se justifie tant par ses applications pratiques que par son comportement critique non trivial. Ses nombreuses applications concernent notamment l'étude de films magnétiques ou supraconducteurs [65, 66] et les solides de basse dimensionnalité [67]. Le modèle XY constitue également un support servant à la description du gaz de coulomb [68], de la transition  $\lambda$  de  $^4\text{He}$  [64, 69] ou des transitions rugueuse et smectique [70]. La présence de défauts topologiques dans le modèle explique la richesse de ses applications. Les équations régissant le comportement et l'influence de ces défauts peuvent être transcrites à l'étude de dislocations, de charges ponctuelles [71] ou de vortex dans les supraconducteurs.

Le modèle XY est constitué de spins à deux composantes en interaction sur un réseau. Son Hamiltonien sous champ s'écrit :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i \quad (3.1)$$

où la première somme décrit l'interaction entre premiers voisins par le biais de la constante d'échange  $J$  positive pour un couplage ferromagnétique et négative pour un couplage antiferromagnétique. Le deuxième terme représente l'interaction entre les spins et le champ magnétique qui tend à aligner les moments suivant sa direction. Les spins étant tous normés à l'unité, il est commode de réécrire le Hamiltonien en fonction des variables angulaires :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - \sum_i [h_x \cos(\theta_i) + h_y \sin(\theta_i)] \quad (3.2)$$

En l'absence de champ la fonction de partition est donnée par :

$$Z = \int_0^{2\pi} \prod_l d\theta_l \exp \left( \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \right) \quad (3.3)$$

La particularité de ce modèle réside dans l'absence d'aimantation spontanée pour toute température non nulle. Il a été montré plus généralement par Mermin et Wagner [72] que tout système à symétrie continue ne présente pas d'ordre à longue distance à température finie dès lors que sa dimension euclidienne  $D$  est inférieure ou égale à deux. Dans le cas du modèle XY, les fluctuations de grandes longueurs d'onde sont responsables de l'absence d'ordre à grande distance [73]. Supposons qu'à très basse température il existe une aimantation spontanée pour laquelle tous les spins sont alignés parallèlement à la direction  $x$  par exemple. Les fluctuations de l'aimantation doivent tendre vers zéro quand  $T \rightarrow 0$ , aussi nous ne nous intéresserons qu'aux fluctuations transversales de l'aimantation. Le Hamiltonien des fluctuations transversales s'écrit sous la forme :

$$H_{fluct} = \frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^y - S_j^y)^2 \quad (3.4)$$

$S_i^y$  étant la composante transversale de l'aimantation du spin  $i$ . Le passage à la limite continue donne :

$$H_{fluct} \rightarrow \frac{1}{2} J \int d^2x (\nabla \phi_y)^2 \quad (3.5)$$

Ce Hamiltonien admet pour fonction de corrélation  $T/(Jk^2)$  dans l'espace de Fourier et la fluctuation  $\langle \phi_y^2 \rangle$  s'écrit :

$$\langle \phi_y^2 \rangle = \frac{T}{J} \int_{\pi/L}^{\pi/\Lambda} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2 k^2} \simeq \frac{T}{2\pi J} \ln \frac{L}{\Lambda}, \quad (3.6)$$

où  $\Lambda$  est de l'ordre du paramètre du réseau et  $L$  sa taille. Ainsi les fluctuations de l'aimantation divergent avec la taille du système rendant instable la phase aimantée.

### 3.1.2 La transition de Kosterlitz-Thouless

Malgré l'absence d'aimantation spontanée à température finie, le modèle XY présente une transition de phase particulière causée par la présence de vortex [73].

Kosterlitz et Thouless [71] ont montré que ces défauts topologiques se présentent sous la forme de paires de vortex-antivortex pour  $T < T_{KT}$  (voir figure 3.3) alors que les vortex deviennent libres à haute température. La température séparant ces deux phases topologiques peut se déterminer très qualitativement par des considérations énergétiques. En effet, l'énergie créée par le vortex décrit par la figure 3.1 vaut

$$E_v \simeq \frac{J}{2} \int d^2r (\nabla \theta)^2 = \frac{J}{2} \int d^2r \frac{1}{r^2} = \pi J \ln \frac{L}{\Lambda}. \quad (3.7)$$

L'entropie associée à la création de ce vortex est  $S = k_B \log(L/\Lambda)^2$  où  $(L/\Lambda)^2$  est le nombre maximal de sites pouvant accueillir un vortex. Ainsi l'énergie libre de création d'un vortex vaut :

$$F = E_v - TS = (\pi J - 2k_B T) \log(L/\Lambda). \quad (3.8)$$

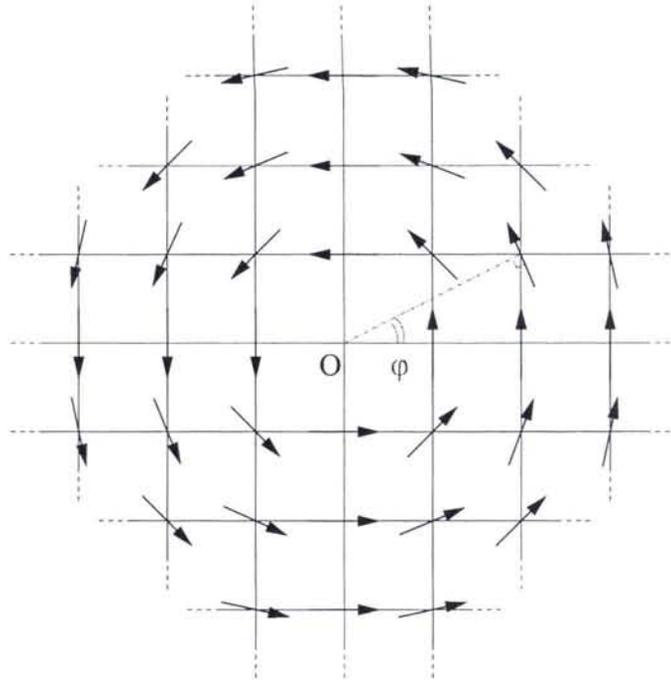


FIG. 3.1 – Configuration des spins d'un vortex dans un réseau XY.

A basse température le coût énergétique dû à la création d'un vortex diverge avec  $L$ . De ce fait, les vortex s'associent par paires pour éviter cette divergence sachant que l'énergie d'une paire vortex-antivortex vaut  $E_{\text{paire}} \approx 2\pi J \log(R/\Lambda)$  où  $R$  est la distance séparant le centre des vortex.

A l'inverse, la formation de vortex isolés est favorisée à haute température, soit pour  $T > T_{KT} = \pi J/2k_B$ . La figure 3.2 montre la configuration d'un système de taille  $L^2 = 10^2$  initialement désordonné et mis en contact à  $t = 0$  avec un bain thermique de température  $T_f > T_{KT}$ . La configuration a été affichée à l'instant  $t = 500$  et montre la présence de vortex isolés (repérés par un contour en pointillés) dans cette phase paramagnétique.

La différence d'aspect topologique des phases basse et haute températures se manifeste dans le comportement des fonctions de corrélations spatiales. A basse température, le calcul de la fonction de corrélation conduit à :

$$G(\mathbf{r}) = \langle e^{i[\theta(\mathbf{r}) - \theta(0)]} \rangle = e^{-\frac{1}{2} \langle (\theta(\mathbf{r}) - \theta(0))^2 \rangle}, \quad (3.9)$$

la deuxième égalité provenant du fait que le Hamiltonien est gaussien. Nous sommes ramenés à calculer la moyenne  $\langle (\theta(\mathbf{r}) - \theta(0))^2 \rangle$  connaissant la transformée de Fourier :

$$\langle |\theta_k|^2 \rangle = \frac{2k_B T}{Jk^2} \quad (3.10)$$

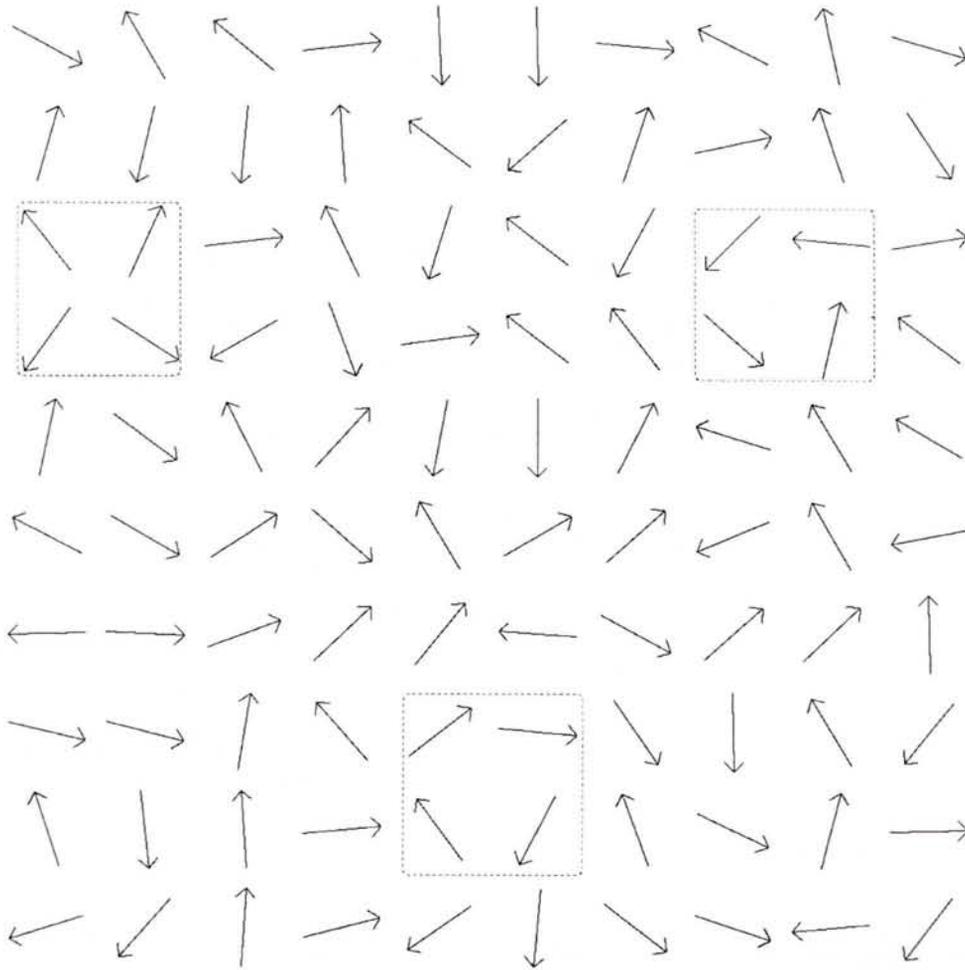


FIG. 3.2 – Vortex isolés dans la phase paramagnétique d'un réseau XY de taille  $L^2 = 10^2$ .

obtenue d'après (3.3). L'évaluation des corrélations spatiales de phase donne :

$$\langle (\theta(\mathbf{r}) - \theta(0))^2 \rangle = \frac{2k_B T}{J} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{k^2} \approx \frac{k_B T}{\pi J} \ln \frac{r}{a}, \text{ pour } r \gg a. \quad (3.11)$$

Ainsi la décroissance des corrélations dans la phase basse température est algébrique :

$$G(r) = r^{-\eta}, \quad \eta = \frac{k_B T}{2\pi J}. \quad (3.12)$$

La phase basse température, caractérisée par une ligne de points fixes, présente une divergence de la longueur de corrélation  $\xi$  et de la susceptibilité magnétique.

Le comportement des corrélations spatiales pour  $T > T_{KT}$  peut être déterminé par un développement haute température :

$$\langle e^{i(\theta(r) - \theta(0))} \rangle \simeq \left( \frac{J}{T} \right)^{\tau/a} = e^{-\frac{\tau}{a} \ln(T/J)}. \quad (3.13)$$

La phase haute température présente donc un comportement paramagnétique caractérisé par une longueur de corrélation

$$\xi = \frac{a}{\ln(T/J)}. \quad (3.14)$$

L'approximation des ondes de spin néglige les effets des vortex, elle n'est donc rigoureusement valable qu'à très basse température. Par exemple les calculs numériques par simulation Monte Carlo de l'exposant  $\eta(T)$  [74] montrent bien une dépendance linéaire en température pour  $T \rightarrow 0$  (voir figure 3.5). En revanche, les effets dus aux défauts topologiques interviennent lorsqu'on se rapproche de la température de Kosterlitz. Les exposants critiques déterminés numériquement sont plus élevés que leur valeur prédite par l'approximation des ondes de spin. La valeur numérique de la température de Kosterlitz-Thouless a été déterminée grâce à des simulations Monte Carlo [75, 76, 77] pour lesquelles :  $T_{KT} \simeq 0.893$  avec  $J = 1$ .

### 3.1.3 Comportement dynamique

Lors d'une trempe vers la phase critique ( $T \leq T_{KT}$ ), l'évolution de la longueur de corrélation  $\xi$  est fonction de la topologie de l'état initial.

Si l'état initial est en équilibre à une température  $T \leq T_{KT}$ , le système ne présente pas de vortex libre et la thermalisation des ondes de spin conduit à une dynamique standard du type [6] :

$$\xi(t) \sim t^{1/z} \quad \text{avec} \quad z = 2. \quad (3.15)$$

Lorsque l'état initial présente des vortex libres, le processus d'annihilation des paires de vortex-antivortex ralentit la dynamique [33]. Ce résultat, se traduisant par des corrections logarithmiques, peut se démontrer très qualitativement [80, 29]. Le paramètre d'ordre  $\phi$ , réévalué à une échelle mésoscopique, obéit à une équation de Langevin (modèle A [55]) :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta \phi}. \quad (3.16)$$

À présent, évaluons la dissipation d'énergie causée par un vortex isolé se déplaçant à une vitesse  $v$  dans la direction  $x$ . Le champ engendré par ce vortex vérifie  $\vec{\phi}(x, y, t) = \vec{\phi}_v(x - vt, y)$  et l'énergie dissipée par son déplacement vaut :

$$\frac{dE}{dt} = \int d^2r \frac{\delta E}{\delta \vec{\phi}} \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} = - \int d^2r \left( \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} \right)^2 = -v^2 \int d^2r \left( \frac{\partial \vec{\phi}_v}{\partial x} \right)^2 = -\gamma_v v^2, \quad (3.17)$$

où  $\gamma_v$  est un coefficient de friction. Si nous étendons ce raisonnement à une configuration de vortex à l'équilibre dans un système isotrope, le coefficient de friction (extrapolé à  $v = 0$ )  $\gamma$  vaut  $E_v$  d'après (3.7). Cette relation devient pour une paire de vortex-antivortex séparés de la distance  $R$  :  $\gamma(R) = \pi \ln(R/a)$ . Dans la phase haute température, nous faisons l'hypothèse que la distance typique de séparation des vortex est  $\xi(t)$ , donnant ainsi un coefficient de

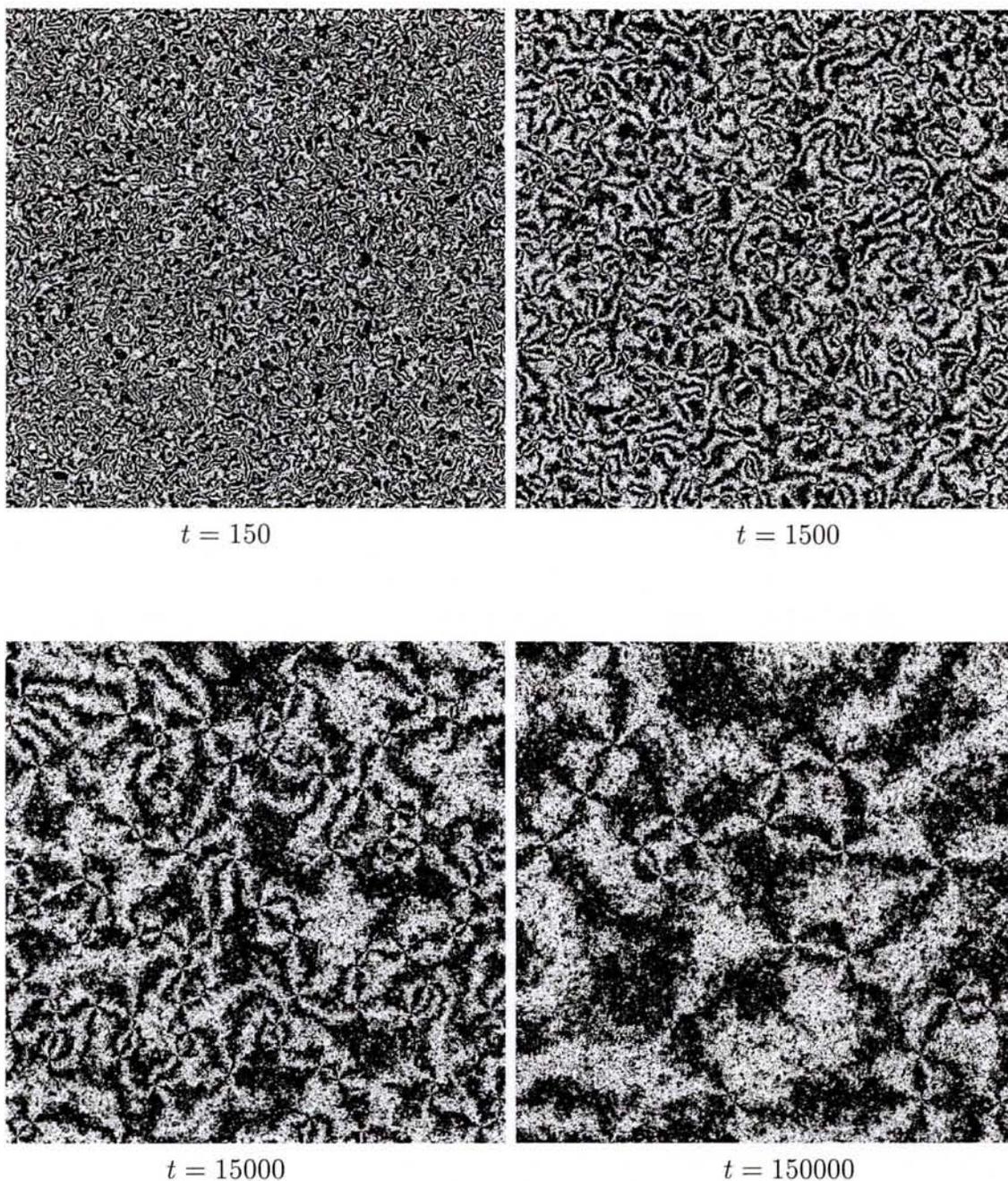


FIG. 3.3 – Configuration des spins à  $T = 0.1$  sur un réseau de dimensions  $512 \times 512$ . L'orientation des spins est représentée par une teinte de gris proportionnelle à  $\sin^2 2\theta$ . Les vortex se situent au centre "d'étoile" à quatre branches.

friction  $\gamma \sim \ln(\xi/a)$ . De même la force typique d'attraction ou de répulsion entre vortex est  $F = -dE_{\text{pair}}/dR \sim 1/\xi$ , d'où la vitesse typique d'un vortex :  $d\xi/dt \sim F/\gamma \sim 1/\xi \ln(\xi/a)$ . Par intégration on obtient l'équation régissant l'évolution de la longueur de corrélation à partir d'un état initial hautement désordonné :

$$\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/2}. \quad (3.18)$$

Ce résultat, d'abord obtenu par Pargellis et al. [78] sur des films de cristaux liquides, a été confirmé par des simulations Monte Carlo [79, 34, 80, 30].

En conclusion, le modèle XY à deux dimensions présente une dynamique particulière dans la mesure où l'évolution de  $\xi$  ne dépend que de la "température initiale" du système. Si l'état initial est préparé en étant thermalisé à une température  $T_i \leq T_{KT}$ , les vortex s'associent par paires et  $\xi(t) \sim t^{1/2}$ . En revanche, si la configuration initiale présente des vortex libres ( $T_i > T_{KT}$ ), la dynamique est ralentie et vérifie  $\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/2}$ .

## 3.2 Résultats sur les trempes dans la phase critique

### 3.2.1 Trempes depuis un état ordonné

Nous nous intéressons tout d'abord au comportement hors équilibre d'un réseau XY parfaitement ordonné mis en contact à  $t = 0$  avec un bain thermique de température  $T_f \leq T_{KT}$ . Nous rappelons que dans cette situation, la croissance des amas critiques vérifie  $\xi(t) \sim t^{1/2}$ . Les fonctions d'autocorrélation et d'autoréponse ont été calculées Rutenberg et Bray [29] ainsi que Cugliandolo et al. [21] en utilisant l'approximation des ondes de spin (voir annexes A et B) :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{(t - t_w)^{\eta(T_f)/2}} \left[ \frac{(1+x)^2}{4x} \right]^{\eta(T_f)/4} \quad (3.19)$$

$$R(t, t_w) = \frac{\eta(T_f)}{2T_f(t - t_w)^{1+\eta(T_f)/2}} \left[ \frac{(1+x)^2}{4x} \right]^{\eta(T_f)/4}, \quad (3.20)$$

où  $x = t/t_w$  et  $\eta(T_f)$  est la valeur de l'exposant critique<sup>1</sup> des corrélations spatiales spin-spin. Ces expressions, valables pour  $t \gg t_w \gg 1$  font clairement apparaître deux contributions décrivant deux processus distincts de la dynamique. Les termes ne dépendant que de  $t - t_w$  représentent un processus stationnaire de relaxation des spins à l'intérieur de domaines corrélés. Ce phénomène réversible et invariant par translation dans le temps domine le comportement de  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$  pour de faibles écarts de  $\tau = t - t_w$ . A partir d'arguments d'échelle, il est possible de prédire le comportement stationnaire des fonctions d'autocorrélation lorsque  $\tau \ll t_w$ . A l'instant  $t_w$ , le système est localement critique puisque  $T_f \leq T_{KT}$ . A l'intérieur des domaines corrélés, ses corrélations spatiales varient en loi de puissance :

$$\langle \vec{S}_i(t_w) \vec{S}_{i+r}(t_w) \rangle \sim r^{-\eta(T_f)}, \quad \text{pour } r \leq \xi(t_w). \quad (3.21)$$

<sup>1</sup>Dans la suite nous adopterons indifféremment la notation  $\eta_{f,i}$  pour désigner respectivement  $\eta(T_f)$  et  $\eta(T_i)$ .

Or l'évolution de la longueur de corrélation  $\xi$  satisfait  $\xi(t) \sim t^{1/z}$ , on en déduit que l'état d'un spin à l'instant  $t - t_w$  se propage avec une célérité :

$$v = \left. \frac{d\xi}{dt} \right|_{t-t_w} \approx (t - t_w)^{1/z-1} = \tau^{1/z-1}. \quad (3.22)$$

Par conséquent, considérer la corrélation à l'instant  $t_w$  de deux spins distants de  $r$  revient

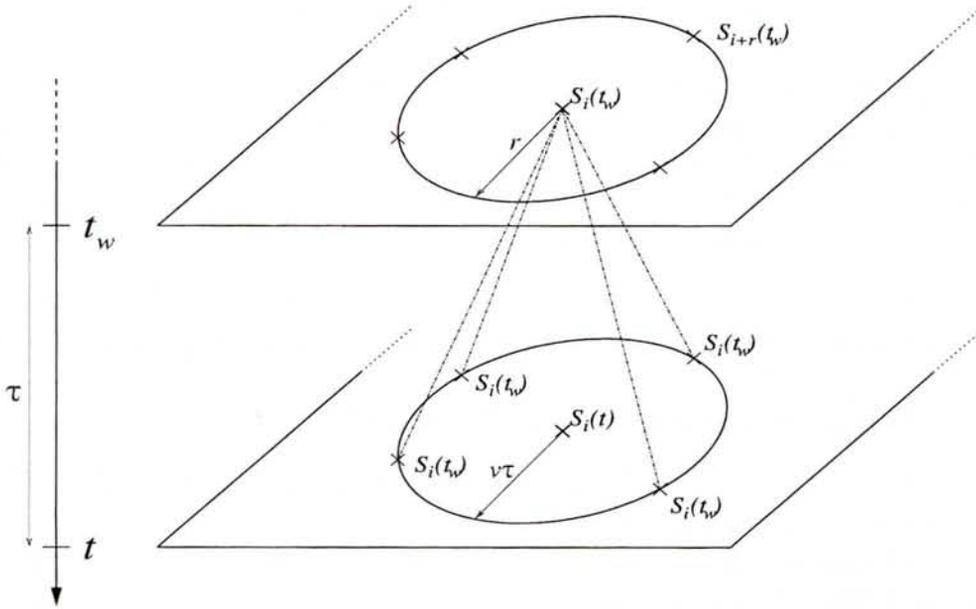


FIG. 3.4 -

à considérer la corrélation d'un seul même spin entre deux instants séparés de  $\tau = r/v$  (voir figure 3.4) :

$$\langle \vec{S}_i(t_w) \vec{S}_{i+r}(t_w) \rangle \sim \langle \vec{S}_i(t_w) \vec{S}_i(t_w + \tau) \rangle \sim (v\tau)^{-\eta(T_f)}, \quad \text{pour } v\tau \leq t_w^{1/z}. \quad (3.23)$$

Au final nous retrouvons la loi régissant le comportement des fonctions d'autocorrélation dans le régime stationnaire :

$$C(t, t_w) = \langle \vec{S}_i(t_w) \vec{S}_i(t_w + \tau) \rangle \sim (t - t_w)^{-\eta(T_f)/z}, \quad (3.24)$$

pour  $t - t_w \ll t_w$  et  $z = 2$ . La deuxième contribution est fonction du rapport  $t/t_w$ , cette partie n'est plus invariante par translation dans le temps, elle traduit le vieillissement du système. La fonction de vieillissement gouverne le comportement de  $C(t, t_w)$  dans le régime  $t - t_w \geq t_w$  et dans la limite  $t \gg t_w \gg 1$  :  $C(t, t_w) \sim (t/t_w)^{-\eta(T_f)/4}$ .

Berthier et al. [30] ont vérifié que les fonctions d'autocorrélation calculées par simulation Monte Carlo à  $T_f = 0.3$  coïncidaient avec la forme (3.19). Nous nous proposons ici de vérifier les conjectures sur  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$  dans la gamme  $0 < T_f \leq T_{KT}$ .

### Fonctions de corrélation

Nous avons simulé quatre trempes sur des systèmes de taille  $L^2 = 100^2$  en utilisant des conditions de bords périodiques afin de limiter les effets de surface [81]. Les températures de trempes considérées sont  $T_f = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  et  $T_{KT}$ . Les quantités ont été calculées sur une moyenne de 5000 échantillons.

Une première analyse de nos résultats semble montrer que la forme (3.19) reste valable en

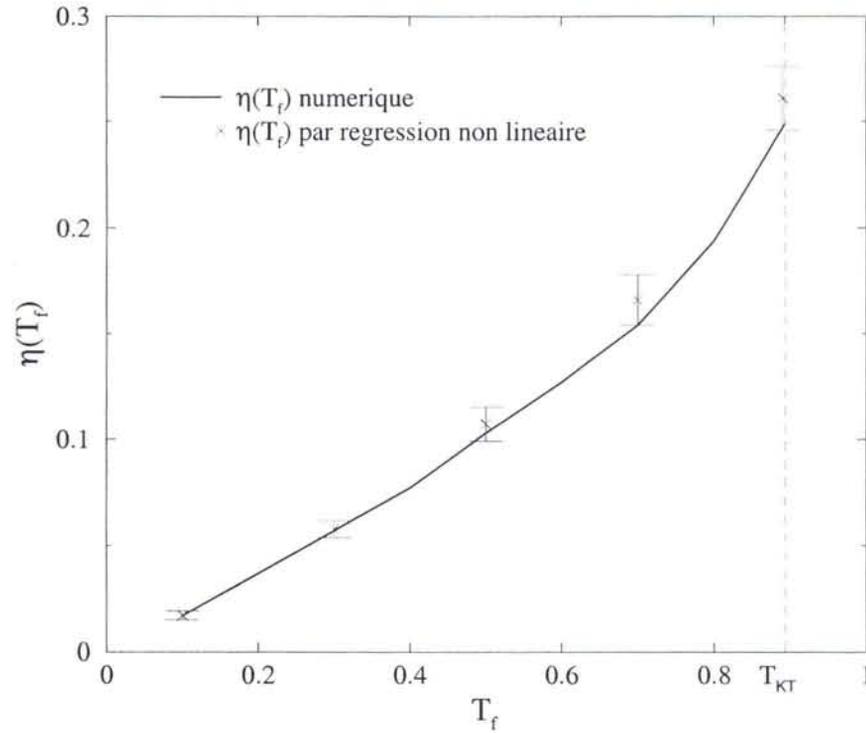


FIG. 3.5 – Exposants critiques des corrélations extraits de nos simulations par régression non-linéaire. Ces valeurs correspondent aux données de la référence [74].

dehors de la *plage ondes de spin* à condition de remplacer  $\eta^{os}(T_f) = T_f/2\pi$  par sa valeur déduite de la figure 3.5. Afin de tester la validité du calcul ondes de spin, nous avons effectué une régression non linéaire de nos données avec la forme (3.19) pour vérifier la dépendance en température de  $\eta(T_f) = \eta_f$ . Sur la figure 3.5 sont représentées les valeurs des exposants  $\eta_f$  extraits par régression ainsi que leur incertitude. Les barres d'erreur représentent les incertitudes graphiques ainsi que les incertitudes provenant de la régression. La courbe donne les valeurs de  $\eta(T_f)$  obtenues numériquement dans la référence [74]. Nous n'avons pas reporté sur le graphe (3.5) leurs incertitudes car elles restent négligeables devant les incertitudes liées à la régression. La concordance entre les valeurs extraites de nos données et les valeurs connues justifie a priori la validité de la forme d'échelle (3.19) sur l'ensemble des températures de trempes considérées.

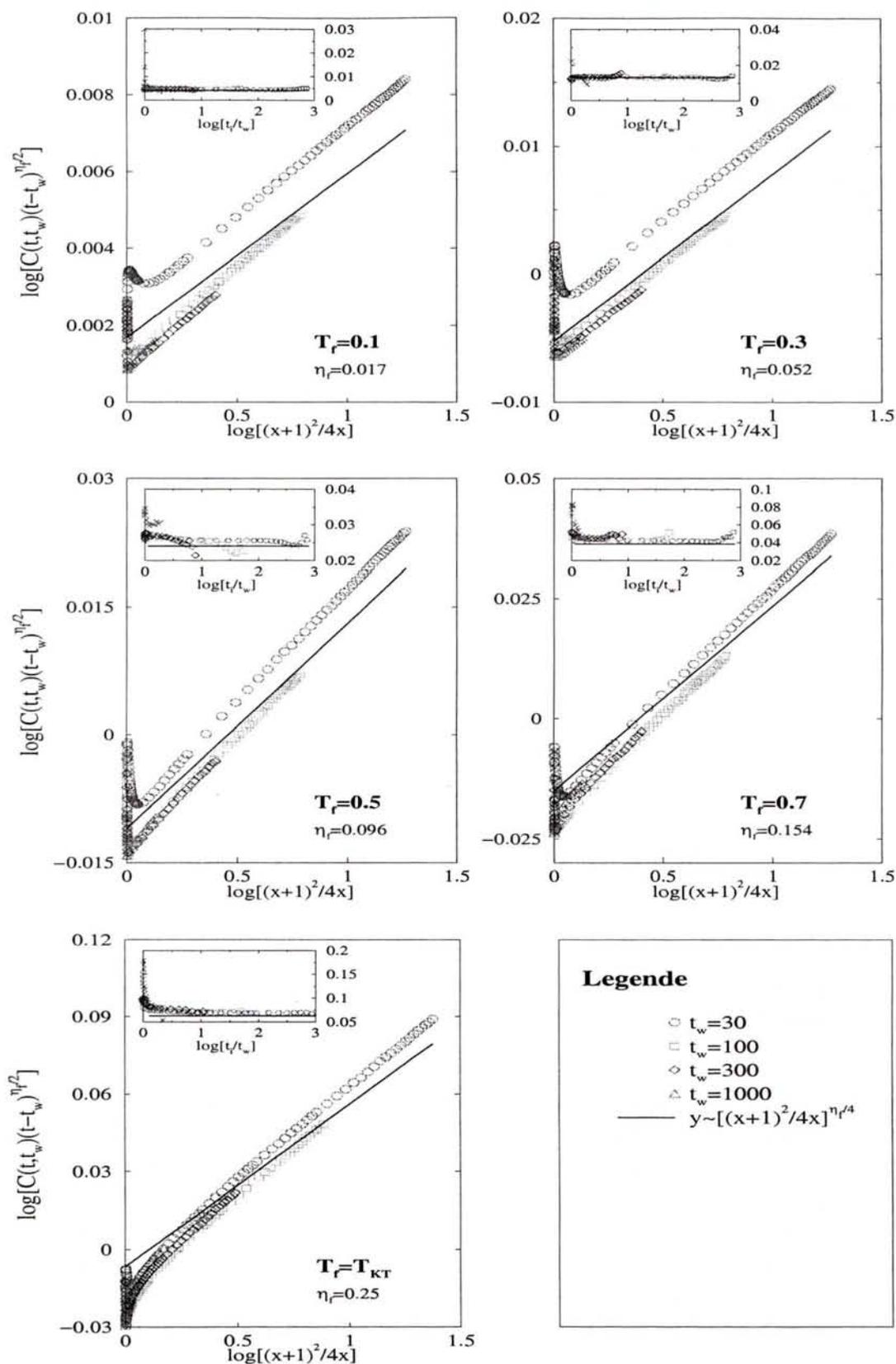


FIG. 3.6 – Comportement asymptotique de  $C(t, t_w)$  pour cinq températures de trempe dans le régime d'échelle  $t > t_w \gg 1$ . Les droites en trait épais représentent la dépendance algébrique attendue.

A présent, nous pouvons étudier plus en détail le comportement d'échelle des fonctions d'autocorrélation pour chaque température  $T_f$ . La figure (3.6) montre la superposition des fonctions d'autocorrélation rescalées  $C(t, t_w)(t - t_w)^{\eta_f/2}$  en représentation  $\log - \log$  où les valeurs numériques de  $\eta_f$  ont été extraites de [74]. Le résultat analytique (3.19) semble être en accord avec nos simulations quant au comportement asymptotique des fonctions d'autocorrélation même si la zone d'étude reste inférieure à deux décades en raison de la transformation d'échelle  $t \rightarrow (t/t_w + 1)^2/(4t/t_w)$ . La superposition des fonctions de corrélation privées de leur partie stationnaire reste très satisfaisante sauf pour de faibles temps d'attente à très basse température. Ceci s'explique par une instauration plus lente du régime d'échelle pour de basses températures de trempe.

Sur la figure 3.6, les droites en trait épais représente le comportement algébrique attendu donné par l'exposant  $\eta_f/4$ . Les inserts se réfèrent à des calculs de régression linéaire réalisés sur la représentation  $\log - \log$  en vue de comparer les exposants des corrélations avec la valeur attendue (en trait épais). Pour chaque temps d'attente<sup>2</sup>, nous avons extrait la dépendance de la valeur de l'exposant avec la largeur de l'intervalle considéré. Les intervalles d'étude ont une largeur  $\Delta_i \equiv t_{max} - t_i$  où  $t_{max}$  est le temps maximal de la simulation et  $t_i$  balaie l'ensemble du régime algébrique. L'accord entre les exposants extraits par régression linéaire et la valeur théorique  $\eta_f/4$  est remarquable pour les températures les plus basses. Au fur et à mesure qu'on élève la température de trempe, il apparait une légère déviation des exposants probablement due aux effets des vortex. Néanmoins, la forme d'échelle prédite par l'approximation des ondes de spin reste valable quelque soit la température de trempe. Ce résultat est plutôt surprenant compte-tenu des approximations du calcul ondes de spin qui néglige les effets des vortex. Or, la figure 3.3 montre clairement leur présence à très basse température. Ces observations impliquent que l'influence des paires de vortex-antivortex ne modifie quasiment pas la dynamique du système. Les seules corrections constatées interviennent dans la valeur de l'exposant de la fonction associée au vieillissement.

## Fonctions de Réponse

L'étude numérique du comportement d'échelle des fonctions de réponse est très délicate dans la mesure où elles tendent rapidement vers zéro et deviennent alors totalement écrantées par le bruit statistique. Or le régime d'échelle a lieu pour  $t \gg t_w$ , c'est-à-dire là où l'amplitude de ces fonctions est faible. Comme on peut s'y attendre, les résultats des fonctions de réponse décrivent essentiellement le régime stationnaire. Le graphe 3.7 montre une dépendance quasi-exclusive de la réponse en fonction de la différence de temps  $t - t_w$ . Afin de vérifier si les résultats issus des simulations coïncident avec l'expression (3.20), nous avons directement comparé nos données avec la forme (3.20). La figure 3.8 montre un très bon accord entre les simulations et les résultats analytiques d'autant plus qu'aucun paramètre ajustable n'a été ajouté lors du tracé des expressions analytiques.

---

<sup>2</sup>Les symboles des inserts et des graphes se réfèrent aux mêmes temps d'attente.

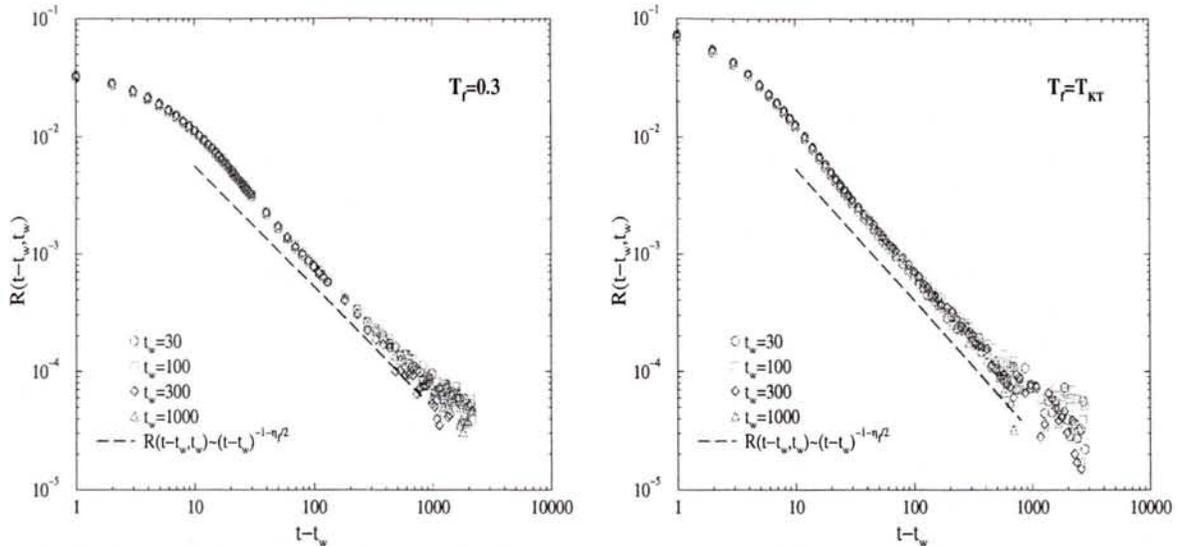


FIG. 3.7 – Fonctions de réponse représentées dans la variable  $t - t_w$  lors de trempes opérées à  $T_f = 0.3$  et  $T_f = T_{KT}$  sur des systèmes de taille  $L^2 = 100^2$  avec 10000 réalisations. La superposition des courbes montre que la réponse est quasiment invariante par translation dans le temps.

### Rapport de fluctuation-dissipation

Il est possible de prédire qualitativement le comportement de  $X(t, t_w)$  grâce à une interprétation du FDT en terme de température effective [82, 83, 25]. Après le régime stationnaire, certains modes n'ayant pas encore thermalisé, le système paraît équilibré à une température effective  $T_{eff}$  comprise entre  $T_i$  et  $T_f$ . Le FDT s'écrit alors :

$$R(t, t_w) = \frac{1}{T_{eff}} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w} = \frac{X(t, t_w)}{T_f} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (3.25)$$

avec  $X(t, t_w) \geq 1$  pour des temps d'observation postérieurs au régime de quasi-équilibre où  $X \simeq 1$ . A partir des formes analytiques de  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$ , nous pouvons en déduire le comportement du taux de fluctuation-dissipation grâce à sa définition (1.21) :

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{\partial_{t_w} C(t, t_w)} = \left(1 - \frac{1}{2} \frac{(x-1)^2}{x+1}\right)^{-1}, \quad x = \frac{t}{t_w}. \quad (3.26)$$

Les variations de cette fonction sont en accord avec l'interprétation en terme de température effective. Pour  $x \simeq 1$ , l'expression (3.26) confirme que  $X(t, t_w) \simeq 1$ . Puis lorsque  $x$  augmente, le dénominateur  $\partial_{t_w} C(t, t_w)$  décroît pour s'annuler pour  $t/t_w = 2 + \sqrt{5}$ , dans ce cas nous retrouvons bien  $X(t, t_w) \geq 1$ . Enfin, dans le régime de vieillissement ( $x \gg 1$ ), la limite asymptotique de (3.26) donne  $X_\infty = 0$ .

Le graphe de gauche de la figure 3.9 représente le taux de fluctuation-dissipation calculé à  $T_f = 0.3$ . Ces résultats sont en accord avec la forme (3.26) puisqu'ils confirment l'existence

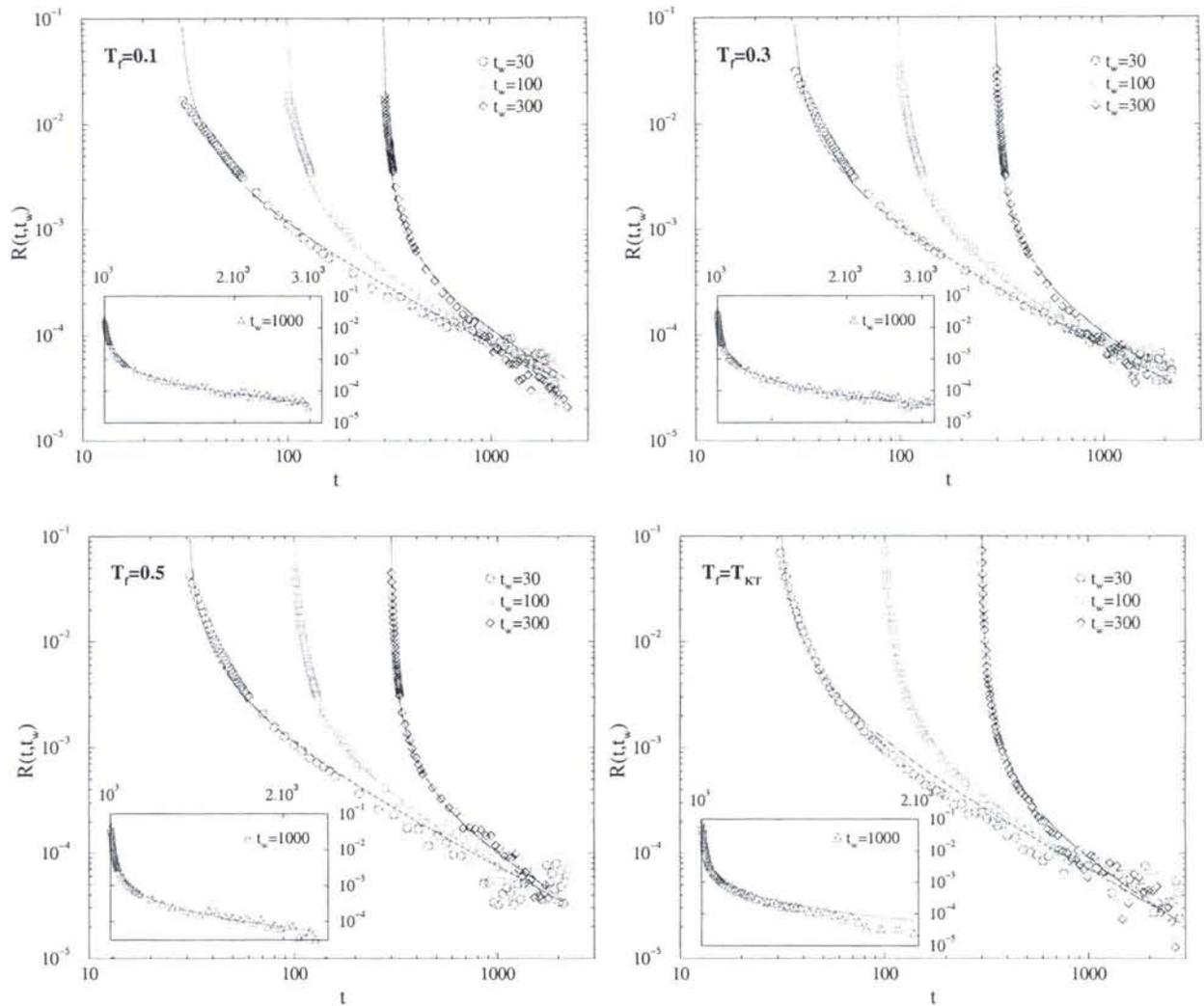


FIG. 3.8 – Fonctions d’auto-réponse obtenues par simulations Monte Carlo de trempes à  $T_f \leq T_{KT}$ . Les courbes en trait plein représentent les prédictions analytiques (3.20).

d’une divergence de  $X(t, t_w)$  pour  $t/t_w \simeq 2 + \sqrt{5}$ . D’autre part, dans la limite asymptotique, ils montrent que le rapport de fluctuation-dissipation s’annule.

Le graphe de droite de la figure 3.9 représente la susceptibilité ZFC calculée à  $T_f = 0.3$ . D’une part, on remarque que  $\chi$  ne dépend pas rigoureusement de  $C(t, t_w)$ . Néanmoins ces calculs confirment que pour de faibles différence de temps,  $X^x(t, t_w) \equiv -T_f d\chi/dC \geq 1$ . Les longs temps d’observation ne nous permettent ni d’observer la divergence de  $X(t, t_w)$  ni d’extraire  $X_\infty$  en raison du tassement des valeurs de  $C(t, t_w)$ .

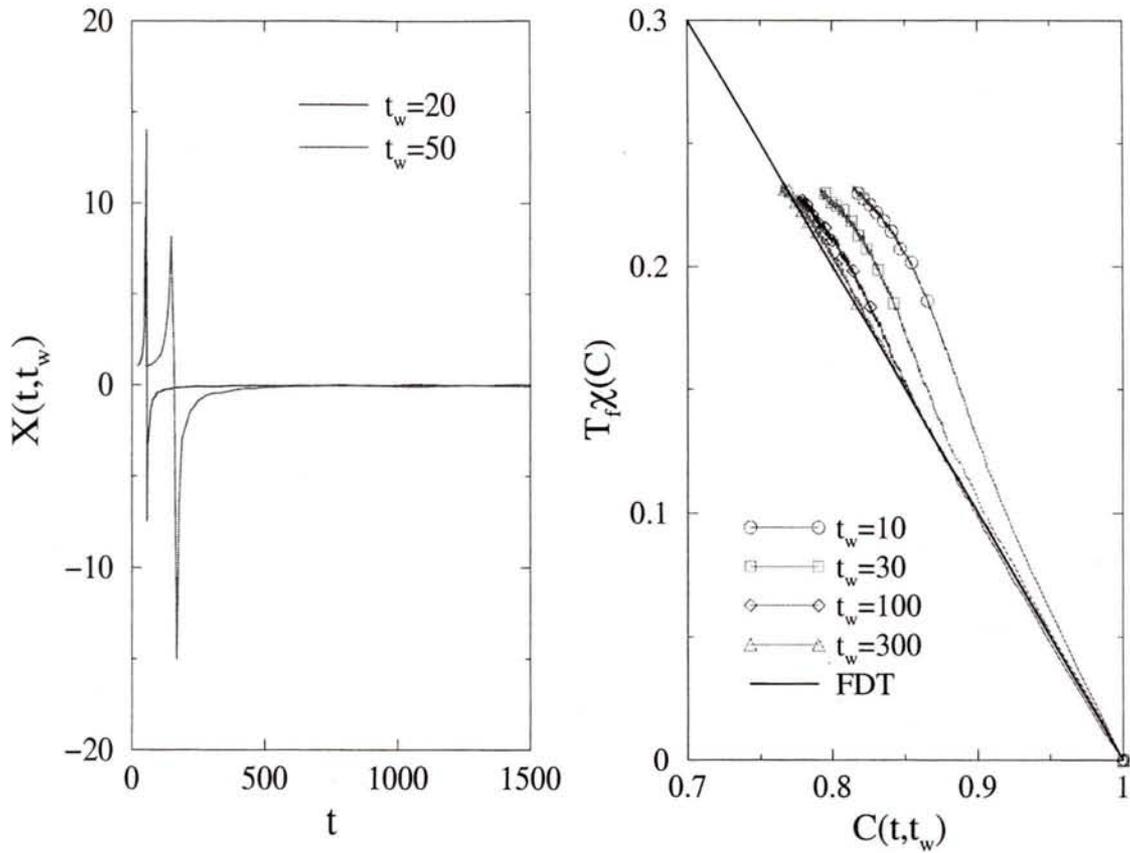


FIG. 3.9 – A gauche : rapport de fluctuation-dissipation calculé à  $T_f = 0.3$  sur un système de taille  $L^2 = 50^2$ . A droite : graphe paramétrique représentant la susceptibilité magnétique en fonction de  $C(t, t_w)$  dans un scénario ZFC pour  $T_f = 0.3$  dans un système de taille  $L^2 = 100^2$ .

### 3.2.2 Trempes depuis un état critique

Il est possible de généraliser les relations<sup>3</sup> (3.19) et (3.20) à des systèmes initialement thermalisés à température finie  $T_i \leq T_{KT}$  [21, 29] :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{(t - t_w)^{\eta(T_f)/2}} \left[ \frac{(1+x)^2}{4x} \right]^{\frac{\eta(T_f) - \eta(T_i)}{4}}, \quad (3.27)$$

$$R(t, t_w) = \frac{\eta(T_f)}{2T_f(t - t_w)^{1+\eta(T_f)/2}} \left[ \frac{(1+x)^2}{4x} \right]^{\frac{\eta(T_f) - \eta(T_i)}{4}}. \quad (3.28)$$

où  $\eta(T_i)$  est l'exposant critique des corrélations spatiales du système initialement thermalisé à la température  $T_i$ . Les fonctions régissant le régime de quasi-équilibre dans (3.27,3.28) restent inchangées puisqu'elles décrivent le processus de thermalisation du système avec le

<sup>3</sup>Nous rappelons que la croissance des domaines corrélés est toujours du type  $\xi(t) \sim t^{1/2}$ .

bain thermique et ne dépendent donc pas de la configuration initiale. On peut remarquer que la relation entre (3.27) et (3.28) prend la forme<sup>4</sup> :

$$R(t, t_w) = \frac{\eta(T_f)}{2T_f} \frac{C(t, t_w)}{t - t_w}. \quad (3.29)$$

Cette équation s'apparente au FDT affecté aux fonctions

$$C_{eq}(t, t_w) = A(t - t_w)^{-\eta(T_f)/2}$$

et

$$R_{eq}(t, t_w) = A \frac{\eta(T_f)}{2} (t - t_w)^{-1 - \eta(T_f)/2}$$

à la différence près que l'amplitude  $A$  dépend de  $t/t_w$  puisqu'elle décrit le vieillissement du système.

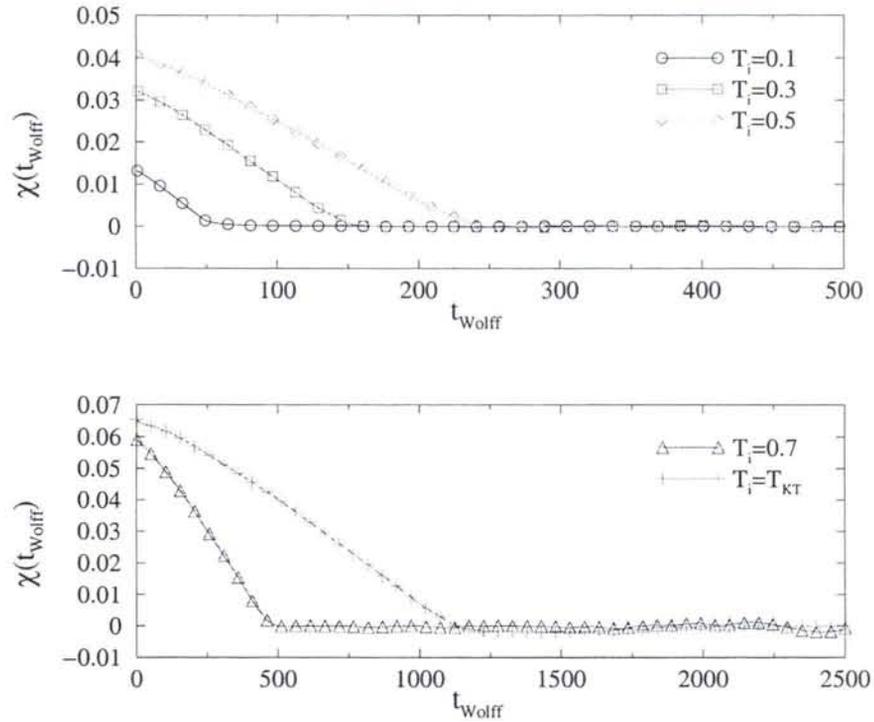


FIG. 3.10 – Evaluation du temps de décorrélation lors de la thermalisation d'un système  $L^2 = 100^2$  à différentes températures critiques  $T_i$ .

L'état initial est préparé en utilisant l'algorithme de Wolff [62]. Pour s'assurer de la complète thermalisation de chaque échantillon, nous devons évaluer le temps de décorrélation

<sup>4</sup>Il en est de même entre (3.19) et (3.20).

pour chaque type de préparation. Nous avons simulé la thermalisation de systèmes initialement désordonnés, vers les cinq températures critiques considérées dans cette partie. La figure 3.10 représente la fonction d'autocorrélation définie par (2.5) en fonction du nombre d'itérations Wolff  $t_{Wolff}$ . Il apparaît clairement que le temps de décorrélation augmente significativement avec la température de préparation de l'échantillon.

### Fonctions de corrélation

Dans le cas de trempes entre deux états critiques, on s'attend à ce que les fonctions d'autocorrélation prennent la forme (3.27) si les températures  $T_i$  et  $T_f$  sont suffisamment basses. Nous avons simulé deux trempes vers  $T_f = 0.3$  et  $0.5$  partant d'un état initial thermalisé à  $T_i = 0.1$ . La figure 3.11 montre les fonctions d'autocorrélation réévaluées en fonction de la variable d'échelle  $(x+1)^2/4x$ . La superposition des courbes relatives aux différents temps

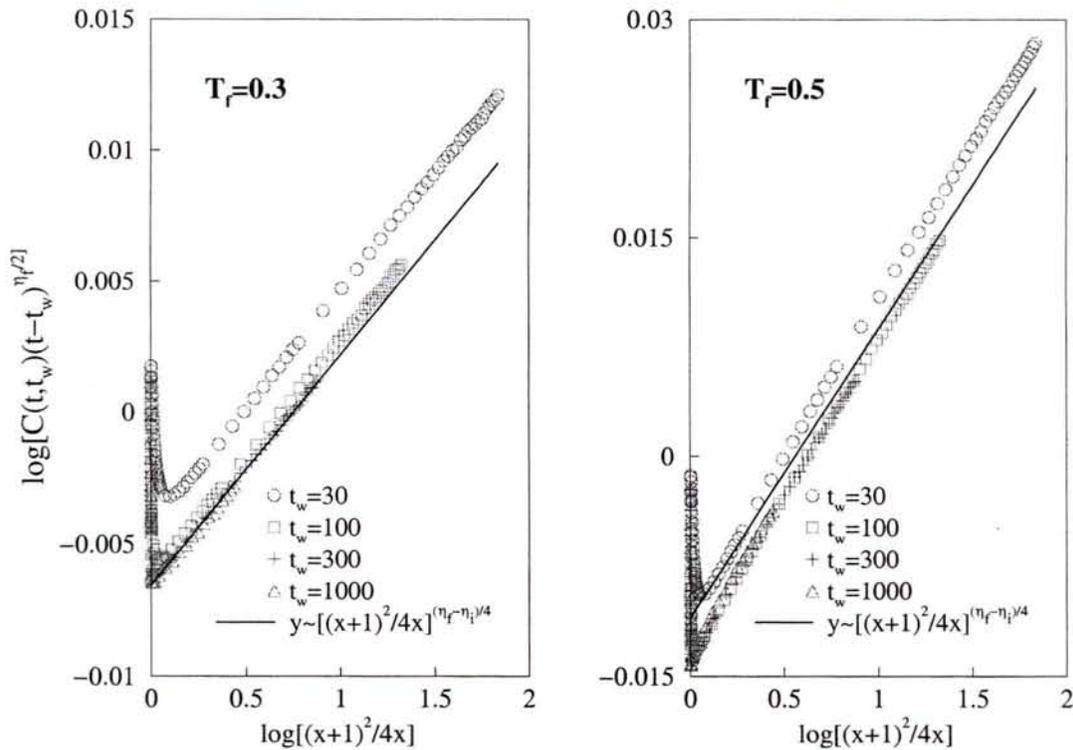


FIG. 3.11 – Régime asymptotique des fonctions d'autocorrélation lors de trempes à  $T_f = 0.3$  (10000 échantillons) et  $T_f = 0.5$  (20000 échantillons) depuis un état initial préparé à  $T_i = 0.1$ .

d'attente est remarquable tout comme la concordance du comportement algébrique avec les exposants critiques  $\eta_f$  et  $\eta_i$ . La figure 3.12 donne l'évolution de l'exposant de la fonction d'échelle  $[(x+1)^2/4x]^{(\eta_f - \eta_i)/4}$  obtenue par un calcul de régression linéaire des quantités représentées sur le graphe 3.11. Nous avons représenté en parallèle les valeurs du coefficient de régression linéaire  $r$  affecté à chaque régression calculée à  $t_i$ . Les valeurs d'exposant les plus

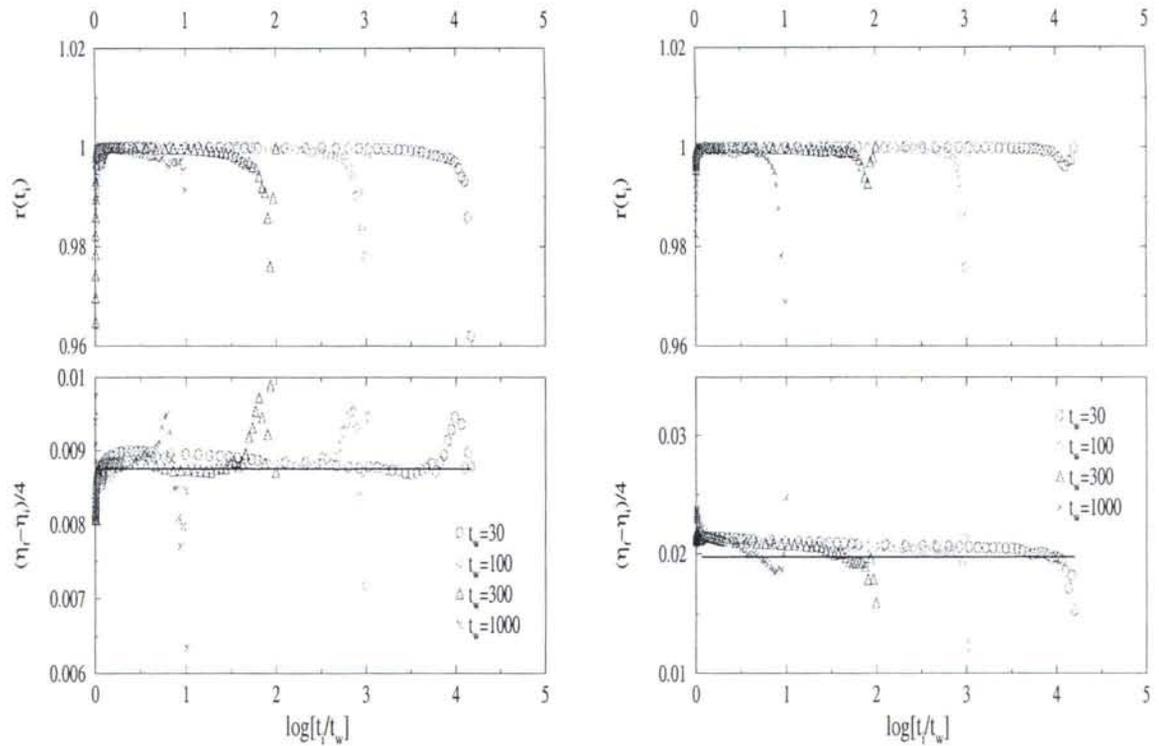


FIG. 3.12 – Etude par régression linéaire des exposants des fonctions relatives au vieillissement des corrélations lors de trempes à  $T_f = 0.3$  (à gauche) et  $T_f = 0.5$  (à droite) depuis  $T_i = 0.1$ . Les droites représentent la valeur de  $(\eta_f - \eta_i)/4$  extraite de [74].

fiables coïncident bien avec les valeurs numériques de  $(\eta_f - \eta_i)/4$  tirées de [74], justifiant pleinement la forme d'échelle (3.27). Ici encore, les défauts topologiques n'apportent aucune correction visible aux calculs issus de la théorie ondes de spin.

Nous avons également simulé des trempes dans le cas où  $T_i > T_f$ . La figure 3.13 montre les fonctions d'autocorrélation calculées pour  $T_i = T_{KT}$  et  $T_f = 0.1$ . A mesure que la température de trempe s'abaisse, le régime d'échelle s'établit plus lentement, expliquant le léger écart des faibles temps d'attente par rapport à la superposition des autres courbes. Les prédictions de l'approximation ondes de spin donnent des résultats moins probants lorsque la température critique initiale est relativement élevée. L'insert de la figure 3.13 représente les calculs des exposants de chaque courbe toujours avec le même procédé de régression linéaire. Même si les valeurs des exposants se rapprochent de la valeur numérique attendue lorsqu'on augmente  $t_i$  et  $t_w$ , il subsiste un écart probablement dû aux effets des paires vortex-antivortex. Néanmoins, la théorie ondes de spin donne des résultats étonnamment bons lorsque la température de préparation est relativement élevée. Ici encore, la contribution des défauts topologiques ne semblent intervenir qu'au niveau de la valeur de l'exposant de la fonction de vieillissement.

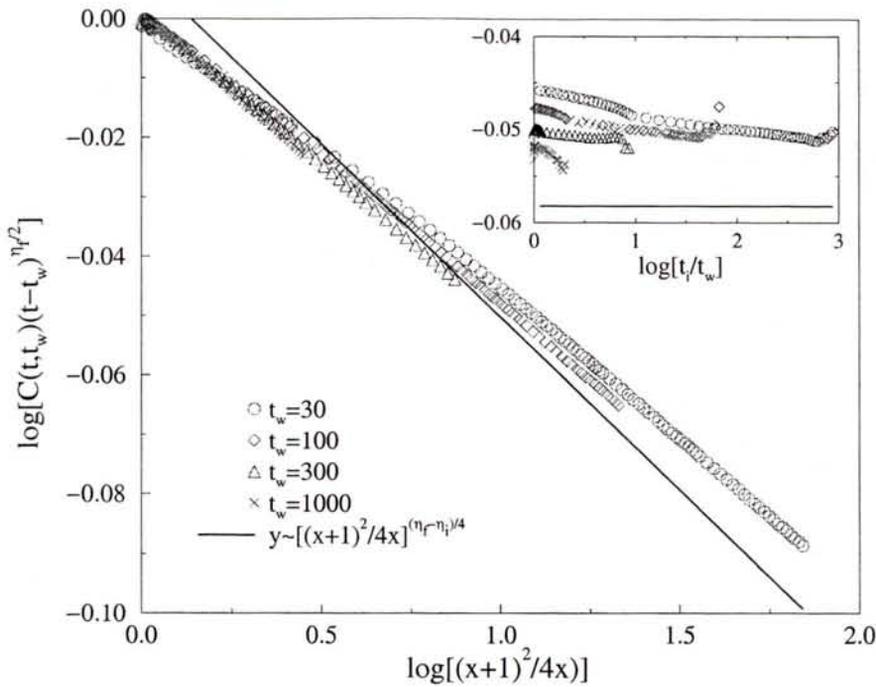


FIG. 3.13 – Fonctions d'autocorrélation affectées à une trempe de  $T_i = T_{KT}$  vers  $T_f = 0.1$ . Nous avons utilisé 5000 réalisations.

### Fonctions de réponse

L'analyse des fonctions d'autoréponse montre de nouveau que le signal concerne essentiellement le régime stationnaire, soit :  $R(t, t_w) \approx (t - t_w)^{-1-\eta_f/2}$ . De ce fait, l'influence de la température de préparation n'apparaît plus dans nos résultats. La figure 3.14 montre les fonctions d'autoréponse pour des trempes à  $T_f = 0.3$  depuis plusieurs températures de préparation. Pour les trois temps d'attente considérés ( $t_w = 30, 100$  et  $300$ ), la superposition des courbes prouve que la réponse décrit essentiellement le régime stationnaire. Ce constat persiste quelque soit les températures  $T_i$  et  $T_f$  choisies dans la phase critique.

### Rapport de fluctuation-dissipation.

Nous avons calculé la susceptibilité magnétique lors de trempes à basse température partant de configurations initiales thermalisées à  $T_i = T_{KT}$ . La figure 3.15 montre l'évolution de la susceptibilité ZFC en fonction de la température de trempe. Le régime stationnaire ( $C(t, t_w) \approx 1$ ) est représenté par une variation linéaire de  $\chi$  avec  $C(t, t_w)$  suivant l'équation :  $\chi(C) = 1 - C$ , prouvant la validité du FDT. Lorsque  $t - t_w \gtrsim t_w$  intervient un régime de cross-over précédant le régime asymptotique. L'évolution de  $X^\chi$  s'interprète en terme de température effective  $T_{eff}$  [25, 83] qui ici est supérieure à  $T_f$  puisque  $T_f < T_i$ , ceci implique donc  $X^\chi \leq 1$ . Malheureusement, le régime asymptotique permettant d'extraire  $X_\infty^\chi$  n'est atteint

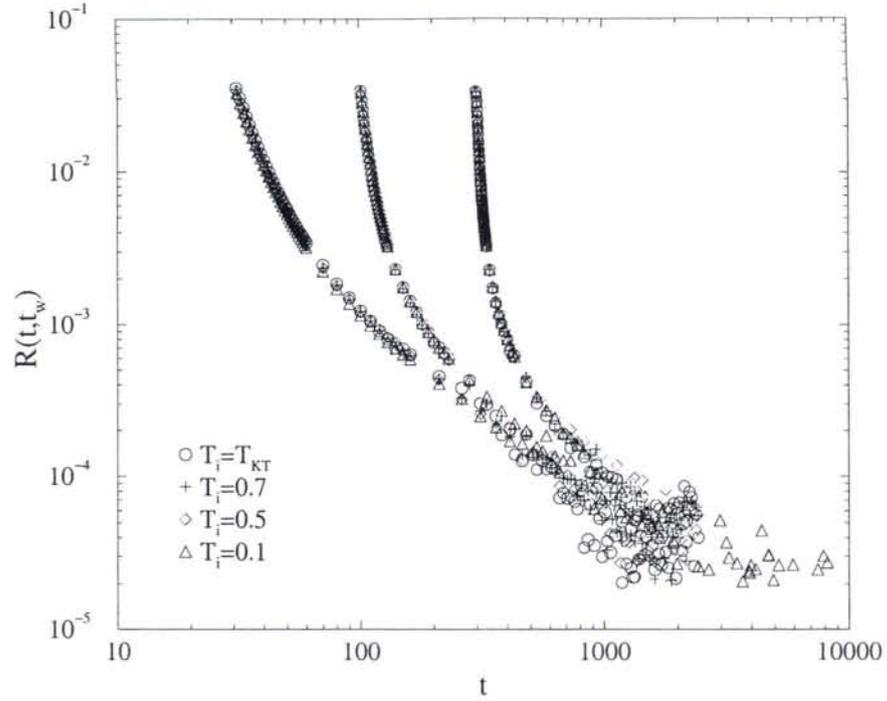


FIG. 3.14 – Fonctions d’auto-réponse affectées à des trempes à  $T_f = 0.3$  depuis différentes températures de préparation  $T_i$ .

que pour  $T_f = 0.1$ . Lorsque l’écart entre les températures de trempe et de préparation est faible, le graphe paramétrique est rapidement freiné par la lente décroissance des fonctions de corrélation. Sur la figure 3.15, nous avons réalisé près de 35000 balayages Monte Carlo sur des systèmes de taille  $100 \times 100$ , malgré tout il est impossible d’en extraire une valeur de  $X_\infty^X$ . Nous avons vérifié que ce régime pré-asymptotique persistait pour toute trempe critique vérifiant  $T_i > T_f$  en utilisant un temps d’observation maximal de 35000.

Le calcul explicite de  $X(t, t_w)$  à partir des prédictions théoriques (3.27) et (3.28) conduit à :

$$X(t, t_w) = \left( 1 - \frac{\eta_f - \eta_i}{2\eta_f} \frac{(x-1)^2}{x+1} \right)^{-1}, \quad x = \frac{t}{t_w}, \quad (3.30)$$

ce qui implique  $X_\infty = 0$ .

### 3.2.3 Trempes à partir d’un état désordonné

L’approximation des ondes de spin permet de calculer analytiquement les fonctions de corrélation et de réponse dans le cas où l’état initial est suffisamment ordonné. En revanche, lorsque l’état initial est désordonné il n’existe aucune approche analytique donnant accès à  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$ . Lorsque la configuration initiale des spins est désordonnée, nous avons vu précédemment que la croissance des domaines critiques obéit à  $\xi(t) \sim \sqrt{t/\ln t}$ . A partir

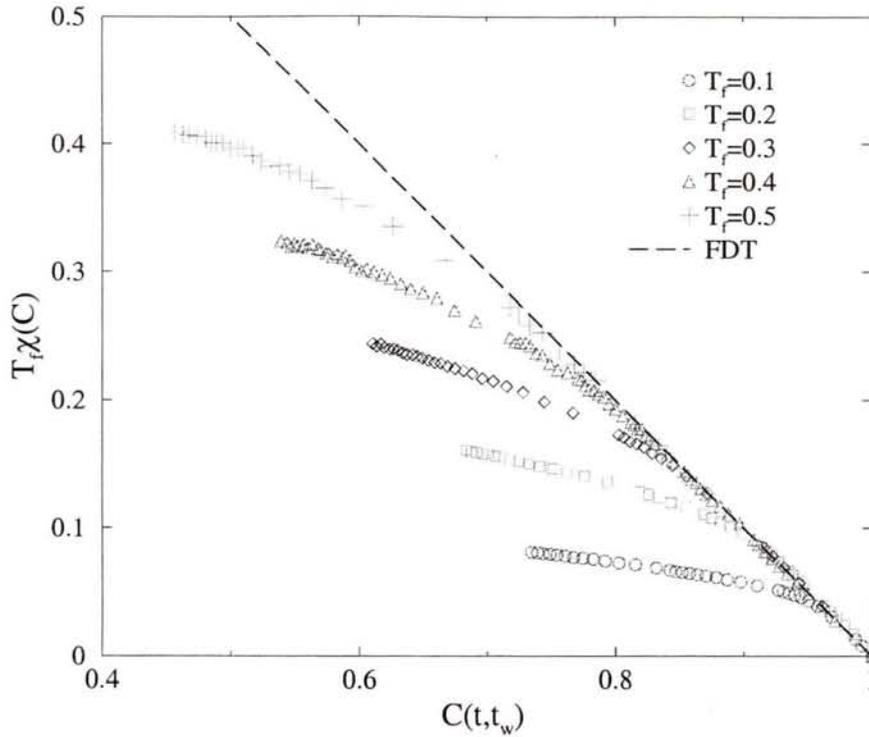


FIG. 3.15 – Graphe paramétrique de la susceptibilité ZFC lors de trempes à très basses températures partant d'un état initial thermalisé à  $T_{KT}$ . Les grandeurs ont été calculées pour  $t_w = 200$  en utilisant 4000 échantillons.

de simulations Monte Carlo, Berthier et al. [30] ont étudié le comportement d'échelle des fonctions d'autocorrélation pour une température de trempe  $T_f = 0.3$ . Grâce à des arguments d'échelle, ils ont établi la forme de la fonction d'échelle de  $C(t, t_w)$  :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{(t - t_w)^{\eta(T_f)/2}} \Phi_C \left( \frac{\xi(t)}{\xi(t_w)} \right), \quad (3.31)$$

où  $\xi$  est la longueur de corrélation vérifiant  $\xi(t) \sim (t/\ln t)^{1/2}$ . Grâce à l'hypothèse d'échelle et aux formes d'échelle précédemment utilisées, nous nous attendons à ce que la fonction d'autoréponse se comporte comme :

$$R(t, t_w) = \frac{\eta(T_f)}{2T_f(t - t_w)^{1+\eta(T_f)/2}} \Phi_R \left( \frac{\xi(t)}{\xi(t_w)} \right). \quad (3.32)$$

Dans cette partie, nous procédons à une étude systématique en température de  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$  afin de vérifier les conjectures (3.31,3.32). Nous essaierons également de déterminer le comportement des fonctions  $\Phi_C$  et  $\Phi_R$  liées au vieillissement.

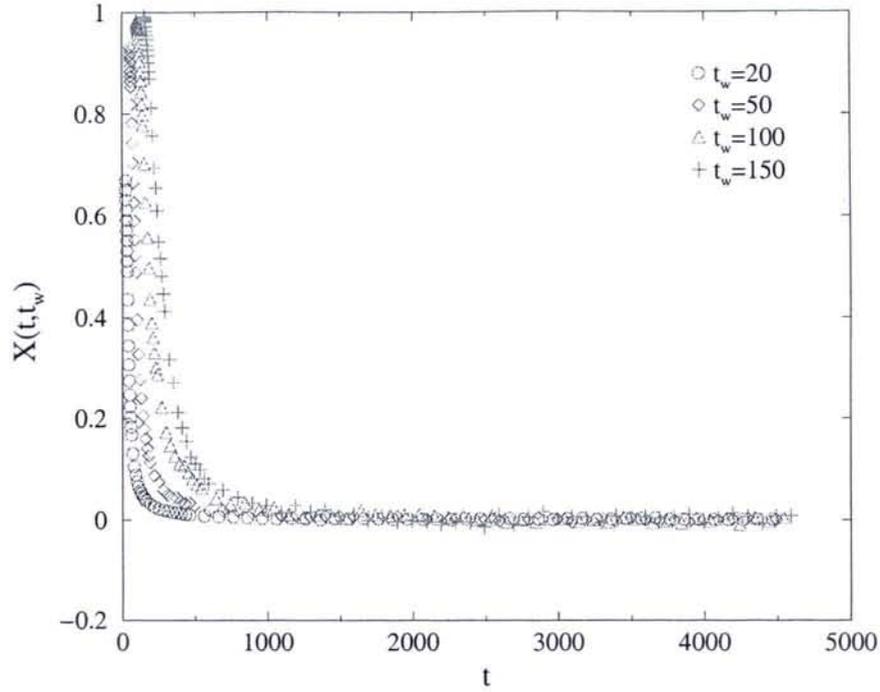


FIG. 3.16 – Rapports de fluctuation-dissipation évalués lors d’une trempe à  $T_f = 0.1$  d’un système de taille  $50 \times 50$  initialement thermalisé à  $T_{KT}$  (10000 échantillons ont été utilisés).

### Fonctions de corrélation

Nous avons calculé les fonctions d’autocorrélation  $C(t, t_w)$  lors de trempes à  $T_f = 0.3, 0.5, 0.7$  et  $T_{KT}$ . La figure 3.2.3 représente la superposition des fonctions de corrélation rescalées  $C(t, t_w)(t - t_w)^{\eta(T_f)/2}$  associées à trois temps d’attente. Ces données sont représentées en fonction de la variable d’échelle  $\xi(t)/\xi(t_w) \equiv [(t \ln t_w)/(t_w \ln t)]^{1/2}$ . La superposition des fonctions de corrélation est remarquable justifiant ainsi la loi d’échelle (3.31). Pour  $\xi(t)/\xi(t_w) > 1$ , la fonction de vieillissement  $\Phi_C$  adopte un comportement algébrique indépendant de la température de trempe. Tout semble donc indiquer que la loi d’échelle est décrite par :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{(t - t_w)^{\eta(T_f)/2}} \left[ \frac{\xi(t)}{\xi(t_w)} \right]^\kappa. \quad (3.33)$$

où Berthier et al. [30] ont estimé  $\kappa/2$  à  $-0.54$ . Néanmoins nous devons rester prudents face à cette conclusion car la correction logarithmique due aux vortex libres restreint la fenêtre d’étude à moins d’une décade. La valeur de  $\kappa$ , très proche de  $-1$ , fait apparaître  $\Phi_C(x)$  comme le premier terme du développement de Taylor d’une fonction analytique  $g$  de la variable d’échelle  $x^{-1} = \xi(t_w)/\xi(t)$ . Dans ce cas :

$$g(x^{-1}) \simeq g(0) + \alpha x^{-1}, \quad x^{-1} \ll 1 \quad (3.34)$$

où numériquement  $g(0) \leq 0.01$ . Ainsi si  $g(0) = 0$ , le comportement des corrélations pour  $t \gg t_w$  devient :  $C(t, t_w) \sim t^{-1/2 - \eta_f/2}$ , aux corrections logarithmiques près. Dans le cas

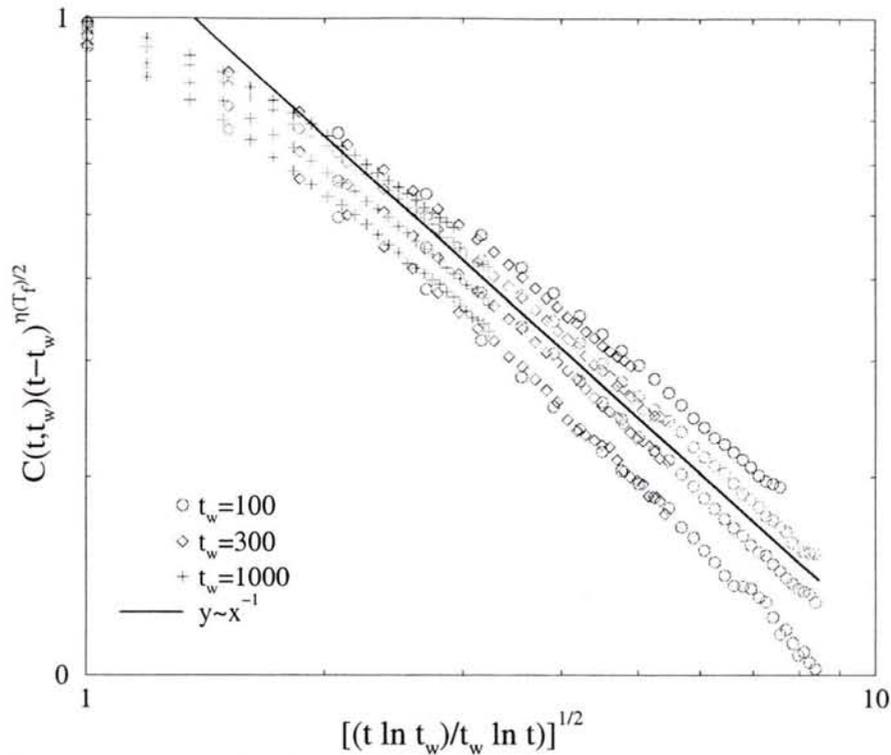


FIG. 3.17 – Représentation des fonctions d'autocorrélation réévaluées lors de trempes à  $T_f \leq T_{KT}$  depuis un état désordonné. Les valeurs moyennes ont été obtenues à partir de 50 systèmes de taille  $L^2 = 512^2$ . Les températures de trempes sont respectivement de haut en bas :  $T_f = 0.3$ ,  $T_f = 0.5$ ,  $T_f = 0.7$  et  $T_f = T_{KT}$ .

contraire ( $g(0) \neq 0$ ), la limite asymptotique de  $C(t, t_w)$  est gouvernée par la fonction de quasi-équilibre, soit :  $C(t, t_w) \sim t^{-\eta_f/2}$ .

### Fonctions de réponse

Les conditions initiales provoquent d'importantes fluctuations sur les fonctions d'auto-réponse en dépit d'un très grand échantillonnage. Ces fluctuations s'avèrent d'autant plus grandes que la température du bain est élevée. Comme pour les trempes considérées précédemment, le régime asymptotique de  $R(t, t_w)$  est rapidement écranté par le bruit statistique.

La figure 3.18 représente les fonctions de réponse calculées lors de trempes à  $T_f = 0.1$  et  $T_f = 0.3$  pour  $t_w = 100$  et 300. Comme pour les fonctions d'autocorrélation, nous avons multiplié  $R(t, t_w)$  par sa partie stationnaire. De ce fait, si la conjecture (3.32) est exacte, les courbes affectées aux deux temps d'attente doivent se superposer puisqu'elles représentent la fonction  $\Phi_R[\xi(t)/\xi(t_w)]$ . Malgré les fluctuations persistantes, il s'avère que nos résultats sont en accord avec la loi d'échelle (3.32). Cette loi d'échelle est en accord avec la forme prédite par l'invariance conforme [38, 39, 42] où :  $R(t, t_w) \approx (t - t_w)^{-A} (t/t_w)^{-B}$ . Par ailleurs, il semble que  $\Phi_R$  ait un comportement linéaire avec  $\xi(t)/\xi(t_w)$ . Toutefois la variable d'échelle

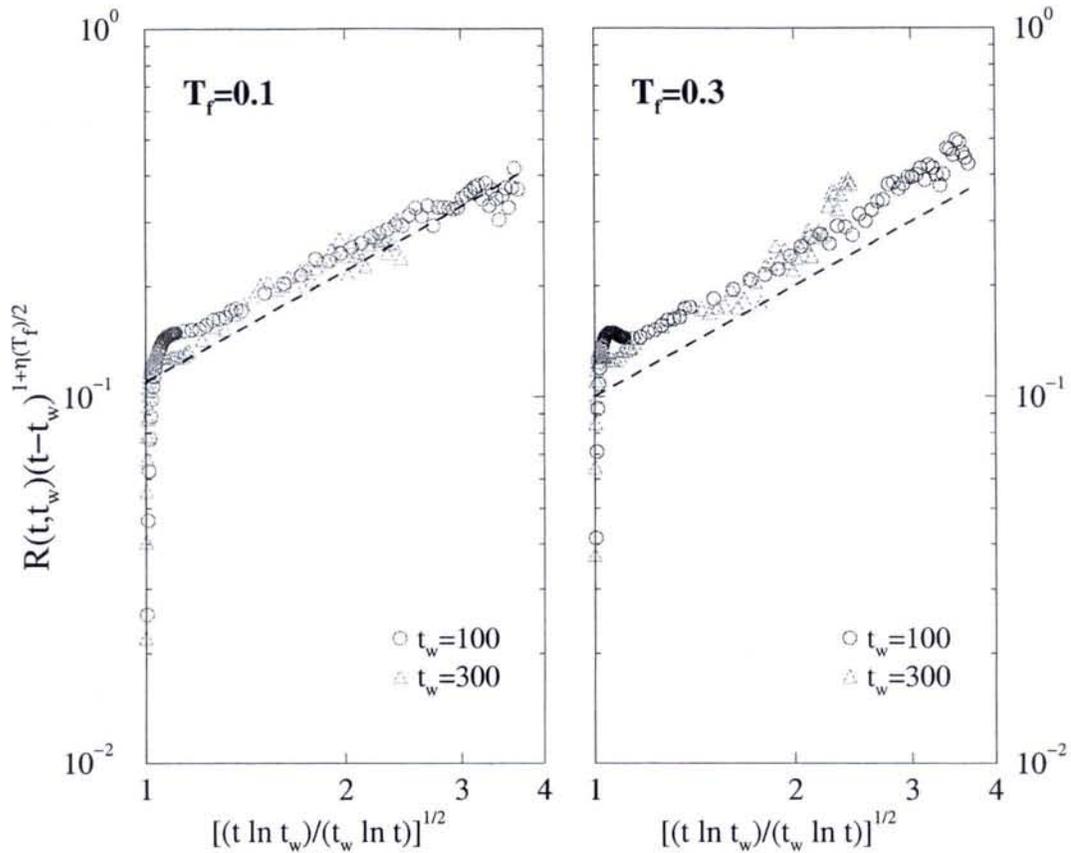


FIG. 3.18 – Comportement asymptotique des fonctions d'autoréponse lors de trempes à  $T_f = 0.1$  (à gauche) et  $T_f = 0.3$  (à droite) sur un système de taille  $L^2 = 100^2$ .

utilisée restreint considérablement notre fenêtre d'étude déjà diminuée par les fluctuations thermiques, par conséquent il convient de rester prudent sur ces conclusions.

### Rapport de fluctuation-dissipation

Nous avons procédé à des calculs de susceptibilités ZFC afin d'étudier la dépendance de  $X_\infty^X \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} -T_f d\chi/dC$  en fonction de la température de trempe. La figure 3.19 montre une représentation paramétrique de la susceptibilité ZFC en fonction de  $C(t, t_w)$  lors d'une trempe à  $T_f = 0.3$  pour différents temps d'attente. Pour les faibles valeurs de  $t - t_w$ , nous retrouvons la signature du FDT ( $X = 1$ ). Pour des temps plus longs, le régime transitoire fait rapidement place au régime asymptotique pour lequel la susceptibilité adopte un comportement linéaire avec la fonction d'autocorrélation :  $T_f \chi(t, t_w) \propto -X_\infty^X C(t, t_w)$ . Le système étant trempé depuis un état de très haute température vers sa phase critique, on s'attend à ce que  $X_\infty^X < 1$ . Le comportement de  $\chi$  est qualitativement le même pour  $T_f = 0.1, 0.5, 0.7$  et  $T_{KT}$ . Pour toutes ces températures, il s'avère que le comportement asymptotique de la susceptibilité ne dépend pas de la température de trempe comme le prouve le graphe de

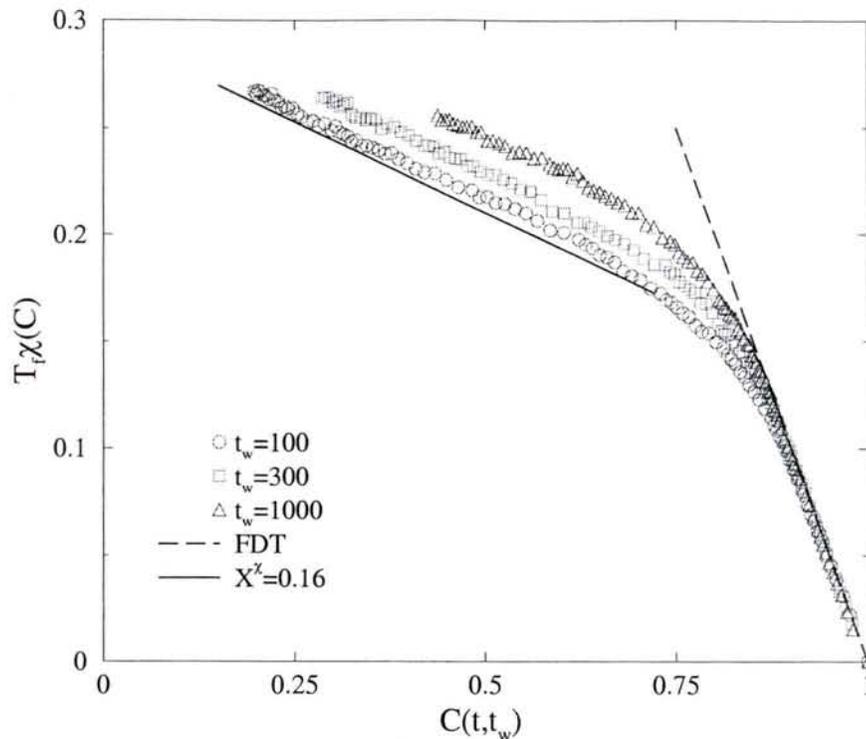


FIG. 3.19 – Représentation paramétrique de la susceptibilité ZFC en fonction de  $C(t, t_w)$  dans un système de dimensions  $L^2 = 100^2$  trempé à  $T_f = 0.3$ . Les quantités ont été calculées sur une moyenne de 1000 échantillons. La ligne en pointillés représente la situation d'équilibre.

gauche de la figure 3.20. De ce fait, le rapport de fluctuation-dissipation  $X_\infty^\chi$  doit se comporter de manière linéaire avec  $T_f$ . Le graphe de droite de la figure 3.20 montre la dépendance en température de  $X_\infty^\chi$  extrait graphiquement à partir des représentations paramétriques de  $\chi(C)$ . Nous trouvons effectivement une évolution linéaire en température de  $X_\infty^\chi$ , avec :

$$X_\infty^\chi(T_f) = \frac{T_f}{2T_{KT}}. \quad (3.35)$$

A partir des formes 3.31 et 3.32 et en utilisant  $\Phi_C(x) \simeq x^{-1}$  et  $\Phi_R(x) \simeq x$ , nous nous attendons à ce que :

$$X(t, t_w) = \frac{T_f R(t, t_w)}{\partial_{t_w} C(t, t_w)} \approx \frac{2T_f A_R \ln t_w}{A_C \ln t}, \quad t \gg t_w \gg 1. \quad (3.36)$$

Contrairement aux résultats issus des calculs de susceptibilité ZFC, nous nous attendons à ce que le FDR s'annule en suivant une décroissance logarithmique. Afin de vérifier ces prédictions, nous avons calculé numériquement le rapport de fluctuation-dissipation  $X(t, t_w)$  via (2.30). Nous avons représenté sur la figure 3.21 l'évolution de  $X(t, 20)$  (visualisé par des cercles pleins) représenté dans la variable d'échelle  $t \ln t_w / t_w \ln t$ , lors d'une trempe à

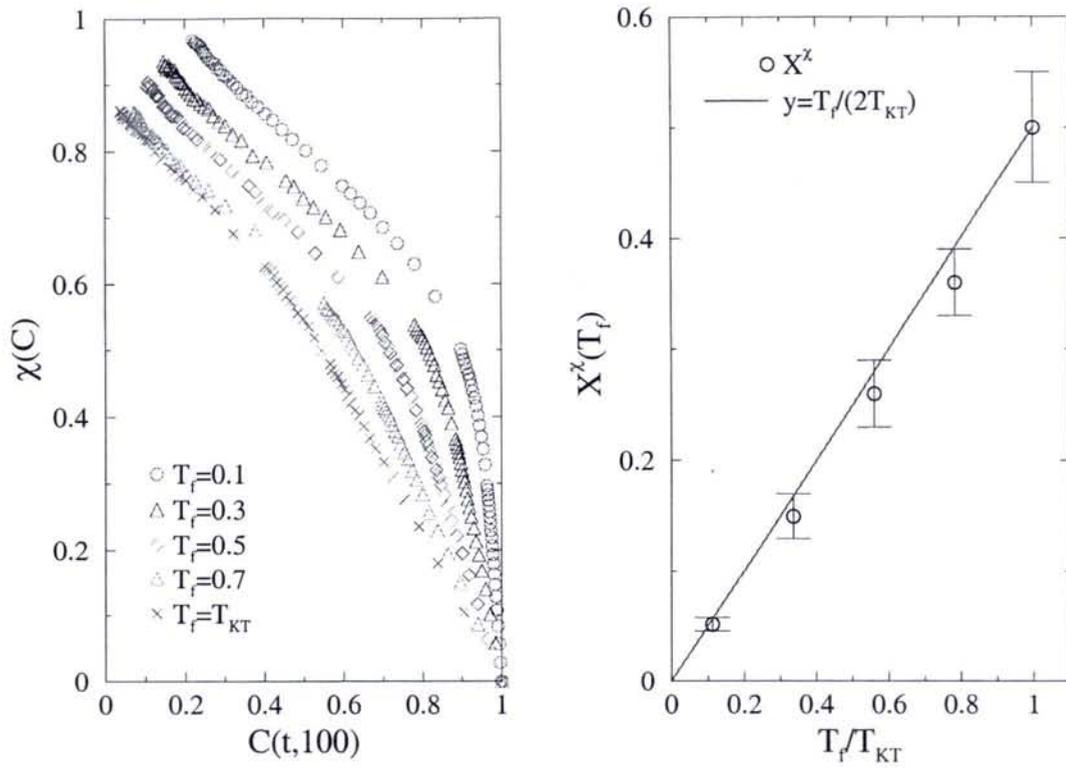


FIG. 3.20 – A gauche : représentation paramétrique de la susceptibilité magnétique  $\chi$  en fonction de  $C(t, t_w)$  pour différentes températures de trempe avec  $t_w = 100$ . A droite : évolution de  $X_\infty^\chi$  en fonction de la température réduite. La droite montre un comportement linéaire en  $T_f/(2T_{KT})$ .

$T_f = 0.7$ . Il semble que  $X(t, t_w)$  décroisse avec le temps d'observation. Notons au passage que le taux de fluctuation-dissipation n'est pas fonction de  $C(t, t_w)$  comme le prouve l'insert de la figure 3.21. Nous avons également représenté sur cette figure le taux de fluctuation-dissipation rescalé  $X(t, t_w) (\ln t / \ln t_w)$ . Ces fonctions rescalées semblent tendre vers une constante, justifiant une décroissance logarithmique de la forme :  $X(t, t_w) \sim \ln t_w / \ln t$ . La figure 3.22, représentant le taux de fluctuation-dissipation rescalé obtenu à  $T_f = 0.3$ , appuie notre hypothèse d'échelle. En effet, si la fonction  $X(t, t_w)$ , représentée dans l'insert de la figure 3.22, semble décroître, la forme rescalée  $X(t, t_w) \ln(t) / \ln(t_w)$  tend également vers une constante.

Les résultats différents obtenus à partir des approches ZFC et des calculs numériques de  $X(t, t_w)$  s'expliquent par la contribution des corrections logarithmiques. Si on néglige les facteurs logarithmiques dans les formes d'échelle de  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$ , le calcul de  $X(t, t_w)$ , dans la limite asymptotique, conduit à :

$$X'(t, t_w) = \frac{T_f R'(t, t_w)}{\partial_{t_w} C'(t, t_w)} \approx \frac{2T_f A'_R}{A'_C} \neq 0, \quad (3.37)$$

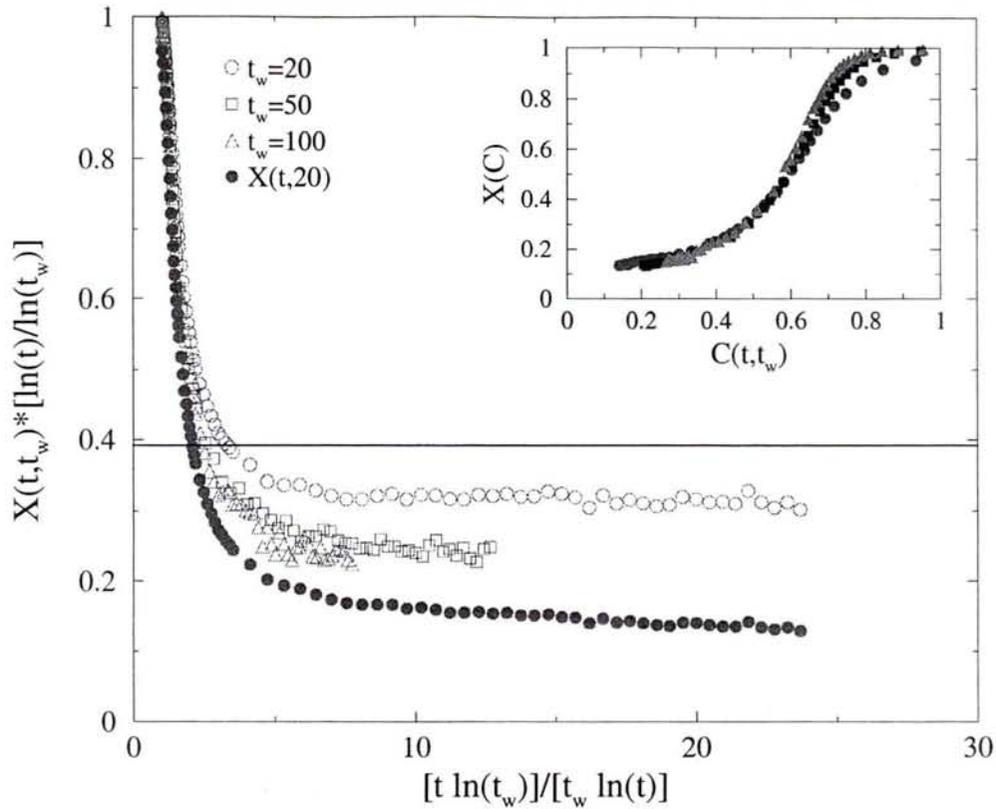


FIG. 3.21 – Taux de fluctuation-dissipation rescalés lors d'une trempe depuis un état désordonné à  $T_f = 0.7$  sur un système de taille  $L^2 = 50^2$ . La ligne continue représente la valeur de  $X_\infty^X = T_f/2T_{KT}$ . Les symboles de l'insert et du graphe principal sont affectés aux mêmes temps d'attente.

avec

$$C'(t, t_w) = A'_C (t - t_w)^{-\eta_f/2} \left( \frac{t}{t_w} \right)^{-1/2} \quad (3.38)$$

et

$$R'(t, t_w) = A'_R (t - t_w)^{-1-\eta_f/2} \left( \frac{t}{t_w} \right)^{1/2}. \quad (3.39)$$

Les facteurs logarithmiques apportent une contribution quasi-constante dans l'évaluation de la réponse intégrée  $\chi(t, t_w) = \int_{t_w}^t R(t, u) du$ , conduisant à  $X_\infty^X \neq 0$ . Les corrections d'échelle sont en revanche visibles dans les calculs de  $X(t, t_w)$  comme le prouvent les figures 3.21 et 3.22. Ces corrections provoquent l'annulation du FDR.

Pour résumer, la détermination du FDR utilisant des calculs de susceptibilités magnétiques donne des valeurs finies de  $X_\infty^X$  proportionnelles à la température de trempe. Ces valeurs sont non nulles car les contributions logarithmiques restent très faibles dans le calcul de la susceptibilité ZFC. Cependant, les calculs numériques des taux de fluctuation dissipa-

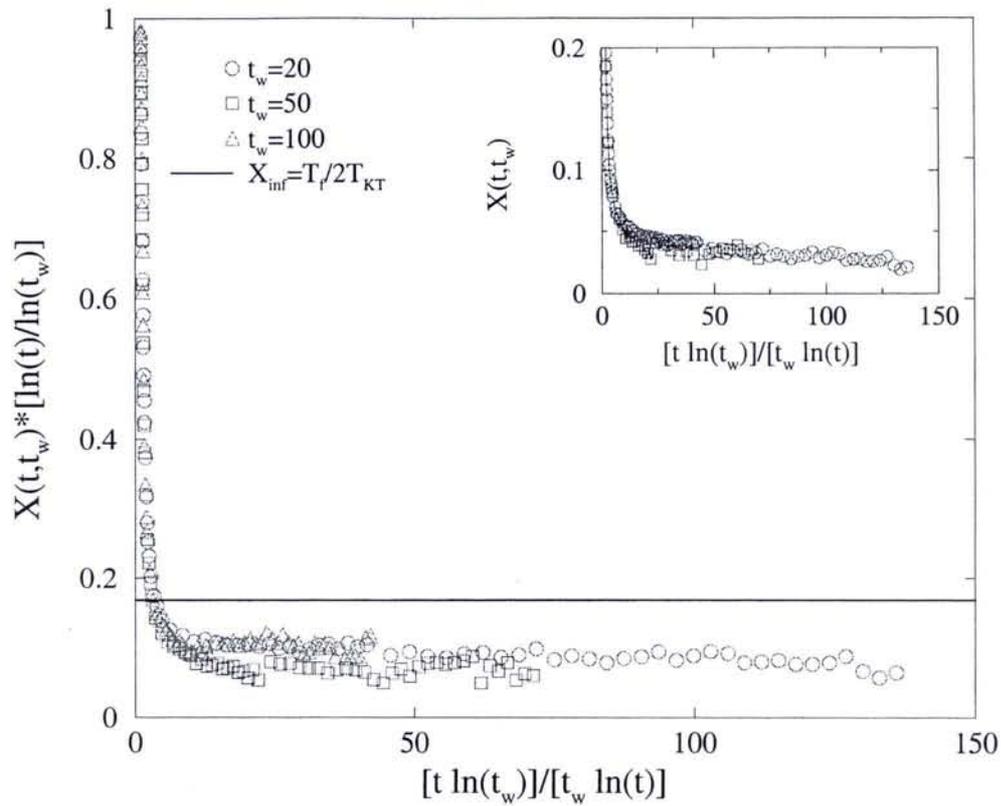


FIG. 3.22 – Taux de fluctuation-dissipation rescalés lors d’une trempe depuis un état désordonné à  $T_f = 0.3$  sur un système de taille  $L^2 = 50^2$  (avec  $10^4$  réalisations). La ligne continue représente la valeur de  $X_\infty^\chi = T_f/2T_{KT}$ .

tion font apparaître ces corrections impliquant une décroissance logarithmique de  $X(t, t_w)$  qui s’annule dans la limite asymptotique.

### 3.3 Discussion

Nous avons analysé le comportement d’échelle des fonctions de corrélation et de réponse dans le modèle XY 2D trempé dans sa phase critique en considérant différentes conditions initiales.

Lorsque les configurations initiales sont ordonnées ( $T_i = 0$ ) ou critiques ( $0 < T_i < T_{KT}$ ), les simulations Monte Carlo ont confirmé les prédictions basées sur les calculs ondes de spin [29, 30, 21]. En dépit des hypothèses de l’approximation des ondes de spin, celle-ci donne des résultats remarquables dans toute la phase critique où il apparaît que :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{(t - t_w)^{\eta_f/2}} \left[ \frac{(t + t_w)^2}{4tt_w} \right]^{\eta(T_f, T_i)/4},$$

avec  $\eta(T_f, T_i) = \eta_f - \eta_i$  et  $\eta(T_f, 0) = \eta_f$ . Cette constatation peut paraître surprenante dans la mesure où la figure 3.3 montre clairement la présence de défauts topologiques à très basse température. Les seules corrections d'échelle notables ont été observées lorsque la température de trempe ( $T_f$ ) ou de préparation ( $T_i$ ) est relativement élevée dans la phase critique. Dans ce cas, nous avons observé une légère déviation de l'exposant  $\eta(T_f, T_i)$  extraits des corrélations par rapport aux prédictions analytiques. Une détermination précise de l'exposant  $\eta(T_f, T_i)$  à partir de nos données est délicate, néanmoins dans le cas où  $T_i < T_f$  et  $T_f < T_i$  les calculs ondes de spin tendent à sous-estimer  $\eta(T_f, T_i)$  (voir figures 3.6, 3.12 et 3.13). En raison des fluctuations thermiques relativement importantes dans les fonctions de réponse pour des temps longs, nous avons simplement pu constater que la forme analytique (toujours obtenue dans l'approximation ondes de spin)

$$R(t, t_w) = \frac{\eta_f}{2T_f(t - t_w)^{1+\eta_f/2}} \left[ \frac{(t + t_w)^2}{4tt_w} \right]^{\eta(T_f, T_i)/4}$$

décrit remarquablement nos calculs numériques.

Les formes asymptotiques des corrélations et de la réponse faisant apparaître les exposants  $\lambda_C$  [9, 11] et  $\lambda_R$  [38] donnent :

$$C(t, t_w) = t_w^{-b} (t/t_w)^{-\lambda_C/z}, \quad \lambda_C = \frac{1}{2}(\eta_f + \eta_i) \quad (3.40)$$

$$R(t, t_w) = t_w^{-1-a} (t/t_w)^{-\lambda_R/z}, \quad \lambda_R = 2 + \frac{1}{2}(\eta_f + \eta_i), \quad (3.41)$$

avec  $a = b = \eta_f/2$  et  $\eta_i = 0$  lorsque l'état initial est parfaitement ordonné. L'égalité entre les exposants  $a$  et  $b$  est le résultat attendu lorsqu'il s'agit de trempes critiques [18, 30]. La relation liant les exposants des corrélations et de la réponse donne ici :  $\lambda_C = \lambda_R - 2$ , étendant au modèle XY les prédictions de Picone et Henkel [16] dans le modèle sphérique. En effet, leur calcul suggère la relation :  $\lambda_C = \lambda_R + \alpha$  où  $\alpha$  est défini par les corrélations spin-spin initiales dans l'espace de Fourier :  $\tilde{C}_k(t=0) \sim |k|^\alpha$ .

L'étude du taux de fluctuation-dissipation  $X(t, t_w)$  a été abordée de manière qualitative par le biais de calculs de susceptibilités ZFC. Lorsque l'état initial est parfaitement ordonné, les simulations ont montré que  $X(t, t_w) > 1$  pour des différences de temps  $t - t_w$  "intermédiaires". Ce résultat s'interprète qualitativement en terme de température effective  $T_{eff}$  dans la mesure où  $T_{eff} < T_f$ . En revanche, dans la limite asymptotique, les formes de  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$  prédisent l'annulation du FDR. Cette limite n'a pas pu être atteinte en raison de contraintes numériques. De la même manière, la limite asymptotique de  $X(t, t_w)$  n'a pu être observée dans le cas où  $T_f < T_i < T_{KT}$ .

L'étude de trempes critiques à partir d'états complètement désordonnés a permis de valider et de généraliser à toute température  $T_f \leq T_{KT}$  la conjecture de Berthier et al. [30] sur la forme d'échelle des fonctions d'autocorrélation. De plus, grâce à des arguments d'échelle nous avons établi une expression générale gouvernant le comportement des fonctions de réponse. A des corrections logarithmiques près, les formes asymptotiques obtenues sont :

$$C(t, t_w) = A_C (t - t_w)^{-\eta_f/2} \Phi_C(\xi(t)/\xi(t_w))$$

avec  $\Phi_C(x) \sim x^{-1}$  et :

$$R(t, t_w) = A_R(t - t_w)^{-1-\eta_f/2} \Phi_R(\xi(t)/\xi(t_w))$$

où il semble que  $\Phi_R(x) \propto x$  (nous rappelons qu'ici  $\xi(t) \sim \sqrt{t/\ln t}$ ). D'une part nous retrouvons l'égalité entre les exposants dynamiques  $b$  et  $a = \eta_f/2$  en accord avec les conjectures actuelles sur les trempes critiques depuis un état désordonné [18]. D'autre part, les formes  $\Phi_C(x)$  et  $\Phi_R(x)$  nous permettent de vérifier la relation  $\lambda_C = \lambda_R = \lambda$  (puisque  $\alpha = 0$ ) avec  $\lambda \simeq 1 + \eta_f$ . Cette valeur s'inscrit dans l'encadrement prédit par Fisher, Yeung et al. [9, 10] obtenu par des arguments d'échelle :  $d/2 \leq \lambda \leq d$ .

L'étude du taux de fluctuation-dissipation  $X(t, t_w)$  s'est basée sur trois approches. Les simulations ZFC ont montré que la susceptibilité magnétique n'est pas une fonction de  $C(t, t_w)$ . Néanmoins, les graphes paramétriques révèlent que  $X^x$  tend vers une constante non nulle indépendante du temps d'attente. L'analyse des simulations relatives à différentes températures de trempe montre que :  $X_\infty^x = T_f/2T_{KT}$ . Le comportement linéaire en température de  $X_\infty^x$  implique que la réponse intégrée du système ne dépend pas de la température de trempe. Pour toute trempe dans la phase critique depuis un état désordonné, la violation du FDT s'écrit alors :

$$R(t, t_w) = \frac{1}{2T_{KT}} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}. \quad (3.42)$$

L'expression de  $X(t, t_w)$  a également été obtenue à partir des formes d'échelle de  $C(t, t_w)$  et  $R(t, t_w)$ . Ces calculs aboutissent à :  $X(t, t_w) \sim (\ln t_w / \ln t)$  ce qui implique  $X_\infty = 0$  dans la limite  $t \gg t_w \gg 1$ , en désaccord avec les résultats issus de l'approche ZFC. Les corrections d'échelle logarithmiques sont à la source de ce désaccord dans la mesure où elles ne perturbent quasiment pas la réponse intégrée. Les calculs numériques des taux de fluctuation-dissipation utilisant (4.12) confirment la décroissance logarithmique de  $X(t, t_w)$  et valident sa forme d'échelle déduite à partir de  $\Phi_C$  et  $\Phi_R$ .



# Chapitre 4

## Le modèle XY tridimensionnel

### 4.1 Généralités à l'équilibre

Contrairement au modèle à deux dimensions, le modèle XY tridimensionnel présente une transition de phase *ordinaire*. En effet, dans le cas de systèmes possédant un paramètre d'ordre à symétrie continue, la théorie de Mermin et Wagner [72] interdit l'existence d'une phase ordonnée si  $D \leq 2$ . Lorsque  $D > 2$ , ces systèmes peuvent présenter un ordre à longue distance en dessous d'une température critique finie. De ce fait, le modèle XY 3D présente une transition de phase séparant une phase paramagnétique d'une phase aimantée. L'influence des défauts topologiques n'est pas aussi marquée que dans le cas bidimensionnel car la dimension supplémentaire rend instable les vortex ponctuels. Malgré tout, les défauts topologiques persistent sous la forme de lignes de vortex (voir figure 4.1) comme il en existe dans les matériaux supraconducteurs de type II [84]. Il a été montré numériquement que la

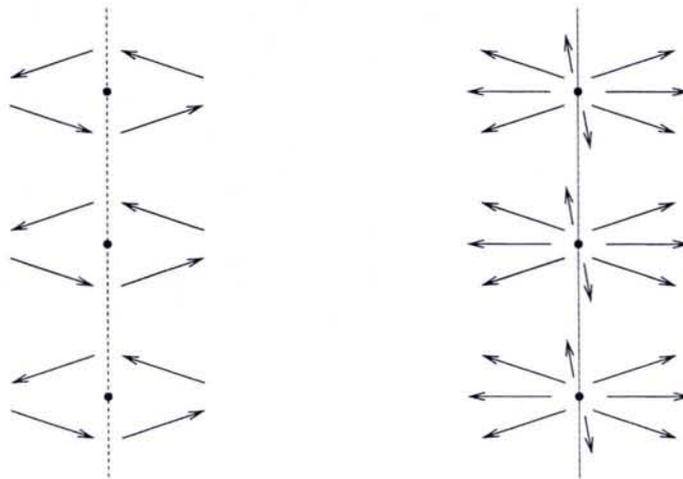


FIG. 4.1 – Structure de lignes de vortex dans un réseau tridimensionnel.

transition de phase du modèle XY 3D se traduit par une discontinuité de la densité de lignes

de vortex au point critique [85].

Le Hamiltonien du système décrit des interactions entre spins planaires premiers voisins dans les trois directions spatiales :

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) . \quad (4.1)$$

Comme précédemment, l'orientation de chaque spin peut être repérée par une variable angulaire  $\theta$ . Des développements hautes températures [86] ont estimé le couplage critique à  $K_c = 0.4539 \pm 0.0013$ . Pour nos simulations, nous utilisons la valeur  $K_c = 0.4542$  obtenue par la méthode des cumulants de Binder [87, 88]. Les exposants critiques ont été estimés par des techniques de renormalisation et des développements en  $\epsilon$  [89, 90]. Les valeurs des exposants  $\beta$  et  $\nu$  que nous utiliserons sont extraites d'analyses numériques (voir références [91, 92]) :

$$\beta \simeq 0.349 , \quad \nu \simeq 0.672 . \quad (4.2)$$

## 4.2 Dynamique hors équilibre

### 4.2.1 Dynamique dans la phase ferromagnétique

La figure 4.2 montre la croissance de domaines ordonnés dans le modèle XY à trois dimensions trempé sous son point critique à  $T_f = 0.9$  ( $T_c \simeq 2.202$ ) depuis un état initial désordonné. Les trois configurations représentent l'état du système dans un plan parallèle au plan de rotation des spins. La nuance de gris est proportionnelle à  $1 - \cos(\theta_i - \theta_{max})$  où  $\theta_{max}$  représente la direction de l'aimantation totale dans le plan considéré.

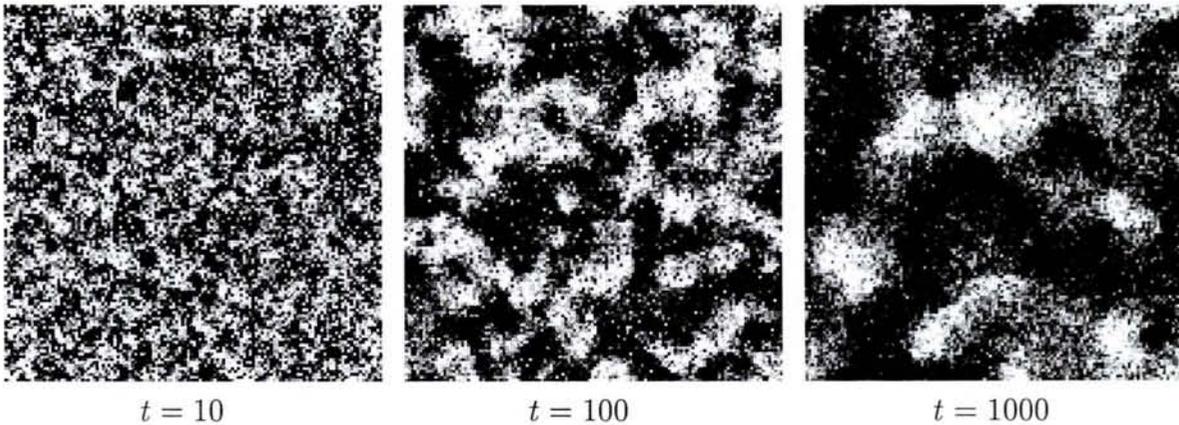


FIG. 4.2 – Croissance de domaines ordonnés dans le modèle XY 3D ( $L^3 = 128^3$ ) trempé à  $t = 0$  à  $T = 0.9 < T_c$  depuis un état initial totalement désordonné.

Lorsqu'un système initialement désordonné est trempé sous sa température critique, la dynamique aux temps courts est décrite par une rapide décroissance des corrélations de

$C(t_w, t_w) = 1$  vers la valeur plateau  $M_{eq}^2(T_f)$ . L'instauration du régime d'échelle ( $t - t_w > t_w$ ), correspondant au vieillissement, impose aux corrélations un comportement de la forme [14, 18] :

$$C(t, t_w) \simeq M_{eq}^2(T_f) f_C \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad (4.3)$$

où  $f_C(x) \simeq A_C x^{-\lambda_C/z}$  pour  $x = t/t_w \gg 1$ . Nous avons également vu que la forme d'échelle de la fonction de réponse conjecturée à partir d'arguments d'échelle conduit à [14, 18] :

$$R(t, t_w) \simeq t_w^{-1-a} f_R \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad f_R(x \gg 1) \approx A_R x^{-\lambda_R/z} \quad (4.4)$$

avec  $a > 0$ . Le taux de fluctuation-dissipation déduit de ces deux formes d'échelle est donné par :

$$X(t, t_w) \simeq T_f \frac{t_w^{-a}}{M_{eq}^2(T)} \frac{A_R}{A_{C'}}, \quad (4.5)$$

où  $A_R$  et  $A_{C'}$  sont des amplitudes positives. Ainsi, dans la limite asymptotique, le FDR doit s'annuler.

### 4.2.2 Dynamique critique

Comme dans le cas de trempes ferromagnétiques, la dynamique critique du modèle XY 3D comporte un régime stationnaire suivi par un régime d'échelle. Le régime stationnaire voit la croissance de domaines corrélés de longueur typique  $\xi(t)$ . Cette loi de croissance ne comporte aucune correction logarithmique en raison de l'instabilité des vortex ponctuels, l'évolution de  $\xi$  suit donc une loi purement algébrique donnée par [6] :  $\xi(t) \sim t^{1/z_c}$ . L'exposant dynamique critique  $z_c$  a été estimé théoriquement [93] et numériquement<sup>1</sup> [95, 96] avec une valeur proche de deux.

Nous rappelons les formes d'échelle attendues des fonctions d'autocorrélation :

$$C(t, t_w) \simeq t_w^{-a_c} f_C \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad a_c = 2\beta/\nu z_c = (d - 2 + \eta)/z_c, \quad (4.6)$$

où  $f_C(x \gg 1) \approx A_C x^{-\lambda^c/z_c}$ . La forme d'échelle des fonctions de réponse déduites de (4.6) est donnée par :

$$R(t, t_w) \simeq t_w^{-1-a_c} f_R \left( \frac{t}{t_w} \right), \quad f_R(x \gg 1) \simeq A_R x^{-\lambda^c/z_c}. \quad (4.7)$$

Ici, conformément aux prédictions de la réf. [16], nous nous attendons à ce que  $\lambda_C = \lambda_R = \lambda^c$  car nos échantillons ne présentent aucune corrélation initiale à longue portée. Le calcul du taux de fluctuation-dissipation à partir des formes d'échelle (4.6) et (4.7) mène à :

$$X(t, t_w) \approx T_c \frac{f_R(t/t_w)}{f_{C'}(t, t_w)} = \mathcal{X}(t/t_w), \quad (4.8)$$

<sup>1</sup> Il semble que la valeur de  $z_c$  dépende des conditions de bord puisque Jensen et al. [94] ont trouvé  $z_c \approx 1.5$  pour des conditions de bord fluctuantes.

et dans la limite des temps longs :

$$X_\infty = \lim_{x \rightarrow \infty} \mathcal{X}(x) = T_c \frac{A_R}{A_{C'}} \neq 0. \quad (4.9)$$

### 4.3 Résultats numériques

Les simulations Monte Carlo ont été effectuées sur des systèmes cubiques de taille maximale  $L^3 = 50^3$ . Afin d'éviter les contributions dues aux effets de surface, nous utilisons des conditions de bords périodiques.

#### 4.3.1 Trempes dans la phase basse température

Dans cette partie, nous avons simulé des trempes dans la phase basse température à partir de configurations initiales complètement désordonnées. Jusqu'à présent, il n'existe aucune approche analytique permettant de prédire exactement le comportement de fonctions à deux temps dans le cas du modèle XY à trois dimensions. Cependant, nous nous attendons à ce que les fonctions d'autocorrélation et d'autoréponse se comportent conformément aux prédictions (4.3) et (4.4). Afin d'étudier l'influence de la température de trempe, nous avons considéré trois températures de bain :  $T_f = 0.3, 0.9$  et  $1.5$ . Nous utilisons dans nos simulations une dynamique de type Glauber afin d'avoir accès aux fonctions de réponse [35] sans pour autant altérer la dynamique (voir figure 2.2).

#### Fonctions d'autocorrélation

Nous avons représenté respectivement sur les figures 4.3 et 4.4 les fonctions d'autocorrélation réexprimées dans la variable d'échelle  $x = t/t_w$  pour les températures de trempe  $T_f = 0.9$  et  $T_f = 1.5$ . Les systèmes de taille  $L^3 = 50^3$  ont été préparés dans des états initiaux totalement désordonnés.

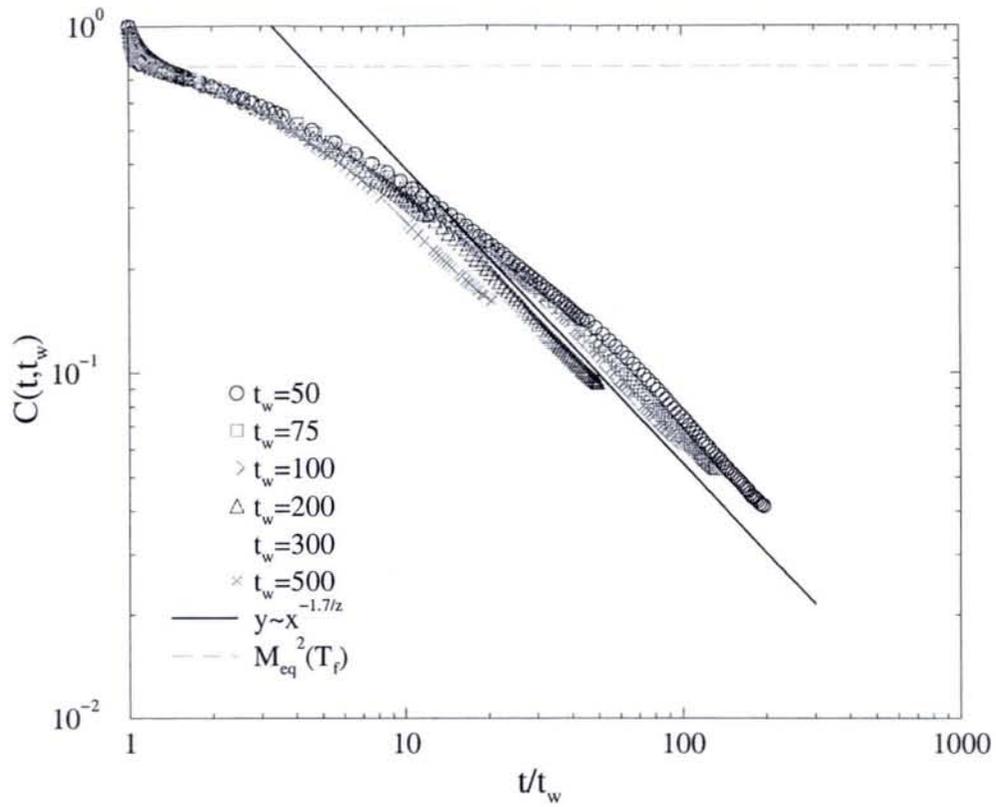


FIG. 4.3 – Fonctions d'autocorrélation représentées dans la variable d'échelle  $t/t_w$  lors d'une trempe à  $T_f = 0.9$  (avec  $10^3$  échantillons).

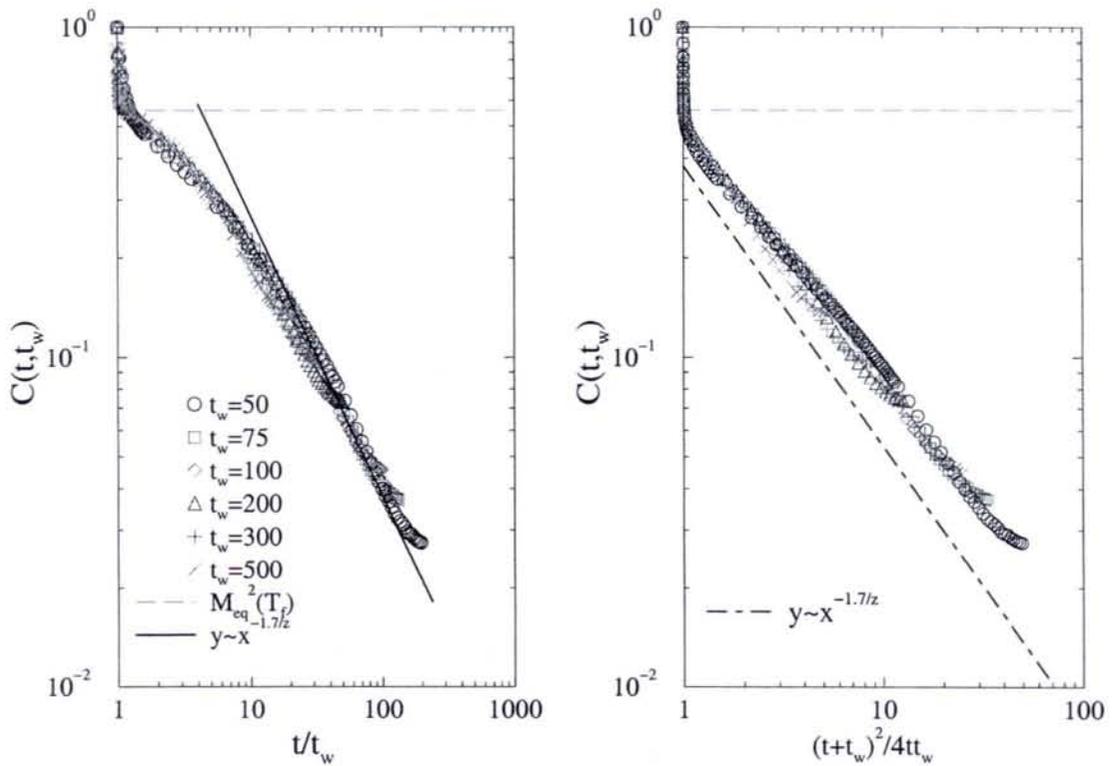


FIG. 4.4 – Fonctions d'autocorrélation à  $T_f = 1.5$  représentées dans les variables  $t/t_w$  et  $(t + t_w)^2/4t_w$ . Nous avons utilisé  $10^3$  échantillons.

Les figures 4.3 et 4.4 montrent que pour de faibles écarts de temps ( $x < 1$ ), les corrélations décroissent rapidement vers une valeur plateau. Les lignes en pointillés représentent la valeur de  $M_{eq}^2(T_f)$  calculée sur ces mêmes systèmes en utilisant l'algorithme de Wolff. Il apparaît clairement que ces droites coïncident avec les valeurs plateau atteintes par les corrélations dans le régime initial. Le régime préasymptotique est caractérisé par l'instauration de la forme d'échelle  $C(t, t_w) \approx M_{eq}^2(T) f_C(t/t_w)$  où  $f_C$  est non triviale. Les corrélations adoptent ensuite un profil algébrique pour  $t/t_w \gg 1$  avec un exposant  $\lambda_C \approx 1.7 \pm 0.1$  indépendant des températures de trempe. Nous pouvons remarquer la présence d'effets de taille finie pour  $T_f = 1.5$  alors qu'ils sont absents à  $T_f = 0.9$ . Ceci implique une loi de croissance :  $L(t) = \mathcal{A}(T_f) t^{1/z}$  où l'amplitude  $\mathcal{A}(T_f)$  augmente avec la température. Par ailleurs nous avons calculé les fonctions d'autocorrélation à  $T_f = 0.3$  en conservant la même base de temps. Ces données ne se superposent pas sous la transformation  $t \rightarrow t/t_w$  et ne montrent aucune dépendance algébrique avec  $t/t_w$ . En effet, le régime d'échelle s'instaure pour des temps d'autant plus longs que la température de trempe est basse.

Les simulations Monte Carlo donnent une valeur de  $\lambda_C$  assez proche de la valeur obtenue dans la théorie de champs libres. Le calcul des fonctions d'autocorrélation utilisant le formalisme MSR montre que lorsque l'action effective est exprimée en terme de champs libres, alors [31] :

$$C^0(t, t_w) = M_{eq}^2(T_f) \left[ \frac{(t + t_w)^2}{4tt_w} \right]^{-\lambda_C^0/z}, \quad t/t_w \gg 1 \quad (4.10)$$

avec  $\lambda_C^0 = d/2$ . Le graphe de droite de la figure 4.4 représente les fonctions d'autocorrélation exprimées dans la variable  $(t+t_w)^2/4tt_w$  ainsi que la forme algébrique  $y \sim [(t+t_w)^2/4tt_w]^{-\lambda_C/2}$  (en traits mixtes). La superposition des courbes issues des simulations est remarquable, notamment pour les temps d'attente les plus élevés. Le régime algébrique, plus net dans cette nouvelle représentation, est en accord avec la valeur  $\lambda_C = 1.7 \pm 0.1$ .

### Fonctions de réponse

Sur les figures 4.5 et 4.6 (graphe de gauche) sont représentées respectivement les fonctions d'autoréponse calculées à  $T_f = 0.9$  et  $T_f = 1.5$  dans des systèmes de taille  $L^3 = 50^3$  initialement désordonnés. Le bruit statistique nous a contraint à restreindre notre fenêtre d'observation, raccourcissant ainsi la zone affectée au régime asymptotique. Néanmoins, la superposition des fonctions d'échelle paraît optimale pour  $a = 1/2$ . Afin de vérifier cette valeur, nous avons calculé la réponse linéaire à  $x = t/t_w$  fixé lors d'une trempe à  $T_f = 1.5$  (graphe de droite sur la figure 4.6). D'après la forme (4.4),  $R(t = xt_w, t_w) \sim t_w^{-1-a} f_R(x)$ , nous pouvons en déduire une valeur de  $a$  en analysant la forme algébrique de  $R(xt_w, t)$ . Par régression algébrique, nous trouvons  $a \simeq 0.6$  (en pointillés sur le graphe) pour  $x = 8, 10$  et  $15$ . A cause du bruit statistique, nous n'avons pas pu déterminer l'exposant  $a$  pour de plus grandes valeurs de  $x$ . Toutefois, nous avons constaté que la valeur de  $a$  converge vers  $1/2$  à mesure que  $x$  augmente. D'autre part, les résultats obtenus dans les modèles d'Ising 2D et 3D [39, 35, 97, 19] et le modèle sphérique [98, 15, 20, 16], nous confortent dans notre estimation.

En choisissant  $a = 1/2$ , nous avons tracé sur les figures 4.5 et 4.6 le comportement asymptotique attendu pour  $f_R(x) = x^{-\lambda_R/z}$  en posant  $\lambda_R = \lambda_C \approx 1.7$ . Nos résultats semblent

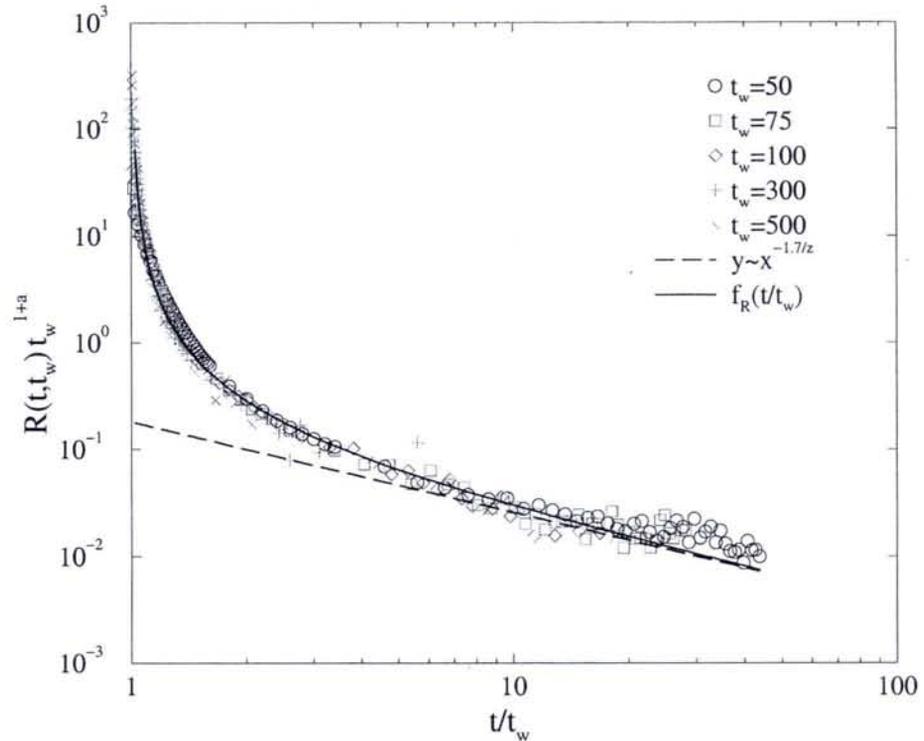


FIG. 4.5 – Fonctions d’auto-réponse à deux temps représentées dans leur variable d’échelle  $t/t_w$  lors d’une trempe à  $T_f = 0.9$ . Les tirets donnent le comportement algébrique attendu avec  $\lambda_R = \lambda_C = 1.7$ . La courbe en trait épais représente la forme (4.11) prédite par l’invariance d’échelle locale.

bien converger vers ce régime algébrique dont l’exposant vérifie à la fois la conjecture :  $\lambda_R = \lambda_C = \lambda$  et l’encadrement [9, 10] :  $d/2 \leq \lambda \leq d$ .

Les formes d’échelle (4.3) et (4.4) impliquent que ces deux quantités se transforment de manière covariante sous la transformation d’échelle globale :  $t \rightarrow bt$  où  $b$  est un facteur de dilatation constant. Il a été montré [38] que la fonction d’auto-réponse reste covariante sous une transformation d’échelle *locale* avec  $b = b(t)$ , en excluant les translations dans le temps. Sous cette condition, la réponse linéaire prend la forme  $R(t, t_w) \simeq t_w^{-1-a} f_R(t/t_w)$  avec :

$$f_R(x) = r_0 x^{1+a-\lambda_R/z} (x-1)^{-1-a}, \quad x \equiv \frac{t}{t_w} \gg 1 \quad (4.11)$$

où  $r_0$  est une constante de normalisation. Ces prédictions d’invariance d’échelle ont été confirmées numériquement dans le modèle d’Ising<sup>2</sup> 2D et 3D [40] ainsi que dans le modèle sphérique à trois dimensions [39, 41, 42]. Sur les figures 4.5 et 4.6 a été tracée la fonction

<sup>2</sup>avec une dynamique de Glauber

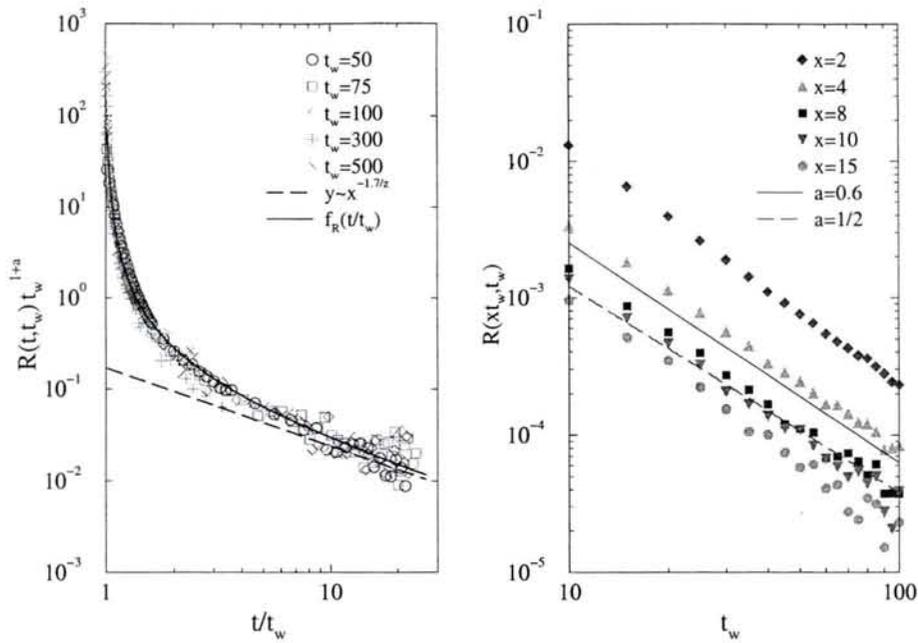


FIG. 4.6 – Fonctions d’auto-réponse affectées à un système trempé à  $T_f = 1.5$  depuis un état initial désordonné.

d’échelle (4.11) en posant  $\lambda_R = \lambda = 1.7$ ,  $a = 1/2$  et  $r_0 = 0.18$ . L’accord de nos données avec la forme (4.11) valide l’hypothèse d’invariance d’échelle locale qui, jusqu’à présent, n’avait pas été testée dans des modèles décrits par un paramètre d’ordre à symétrie continue.

### Rapport de fluctuation-dissipation

La figure 4.7 montre la représentation paramétrique de la susceptibilité ZFC  $\chi$  en fonction de  $C(t, t_w)$  calculée à  $T = 0.3$ . Pour de faibles écarts de temps  $t - t_w$ , nous retrouvons une dépendance de  $\chi(C)$  conforme au FDT représenté par la droite en traits pointillés sur la figure 4.7. Pour des temps plus longs la susceptibilité tend vers une constante, ce qui infère  $X_\infty = 0$ . Ce résultat est en accord avec la limite asymptotique de (4.5) et nous l’avons vérifié pour différentes températures de trempe. La susceptibilité n’est pourtant pas uniquement une fonction de  $C(t, t_w)$ . En effet, nous pouvons remarquer que la susceptibilité diminue très faiblement avec  $t_w$  durant le régime de vieillissement. Cette dépendance de  $\chi$  avec  $t_w$  s’explique en terme de densité de paroi de domaine. Nous avons vu que seuls les spins situés au niveau des parois de domaine contribuent à l’aimantation induite par le champ magnétique [24]. La croissance continue des domaines ordonnés induit une diminution de la densité de parois. Ainsi, durant ce processus, la réponse magnétique au champ extérieur diminue également.

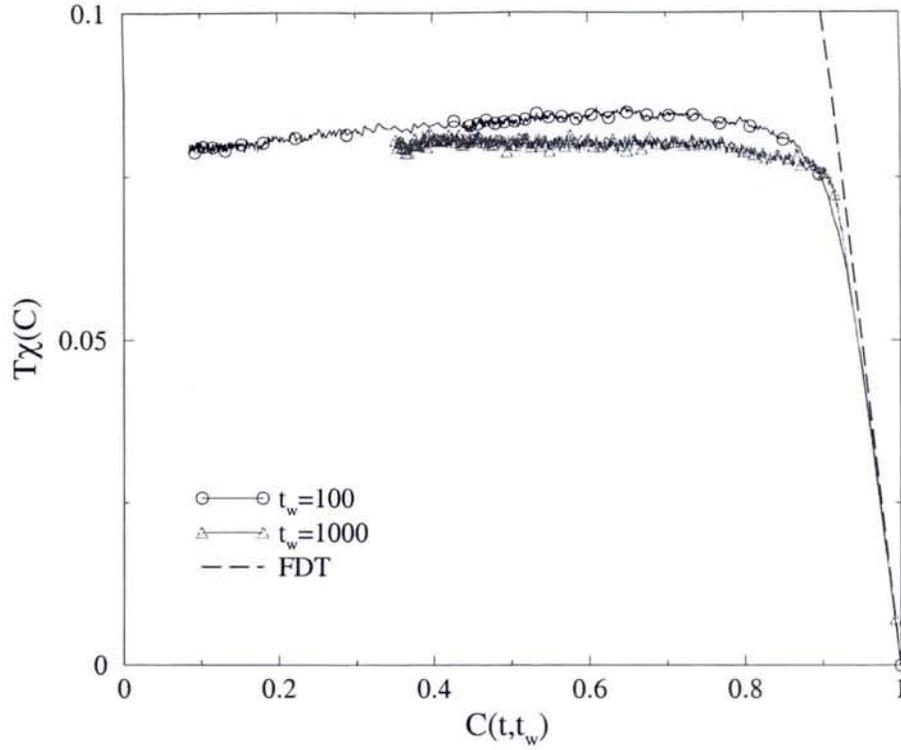


FIG. 4.7 – Susceptibilités ZFC calculées à  $T = 0.3$  sur un système de taille  $L^3 = 100^3$ .

Utilisant la définition de  $X(t, t_w)$  qui, en temps discret s'écrit :

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{C(t, t_w + 1) - C(t, t_w)}, \quad (4.12)$$

nous avons calculé numériquement le taux de fluctuation dissipation  $X(t, t_w)$ . Nous avons vu que la forme d'échelle de  $X(t, t_w)$  s'écrit, dans le cas de trempe en-dessous du point critique :  $X(t, t_w) \approx t_w^{-a} \mathcal{X}(t/t_w)$  où la fonction d'échelle  $\mathcal{X}$  est reliée à  $f_C$  et  $f_R$ . En utilisant les formes (4.10) et (4.11), le rapport de fluctuation-dissipation s'écrit :

$$X(t, t_w) \simeq A_X t_w^{-a} f_X \left( \frac{t}{t_w} \right) \quad (4.13)$$

avec

$$f_X(x) = x^{1+a-2\lambda/z} (x-1)^{-2-a} (x+1)^{2\lambda/z+1}. \quad (4.14)$$

La figure 4.8 montre les taux de fluctuation dissipation rescalés  $X(t, t_w)t_w^a$  calculés lors d'une trempe à  $T = 0.9$ . En posant  $a = 1/2$ , les formes rescalées convergent vers une unique courbe maîtresse dont l'équation est donnée par (4.14) avec  $\lambda = 1.7$  et  $z = 2$ .

Etant donné que nous disposons de résultats relatifs à la réponse linéaire  $R(t, t_w)$ , nous n'effectuons pas d'analyse quantitative sur la susceptibilité ZFC. Remarquons que lorsqu'on

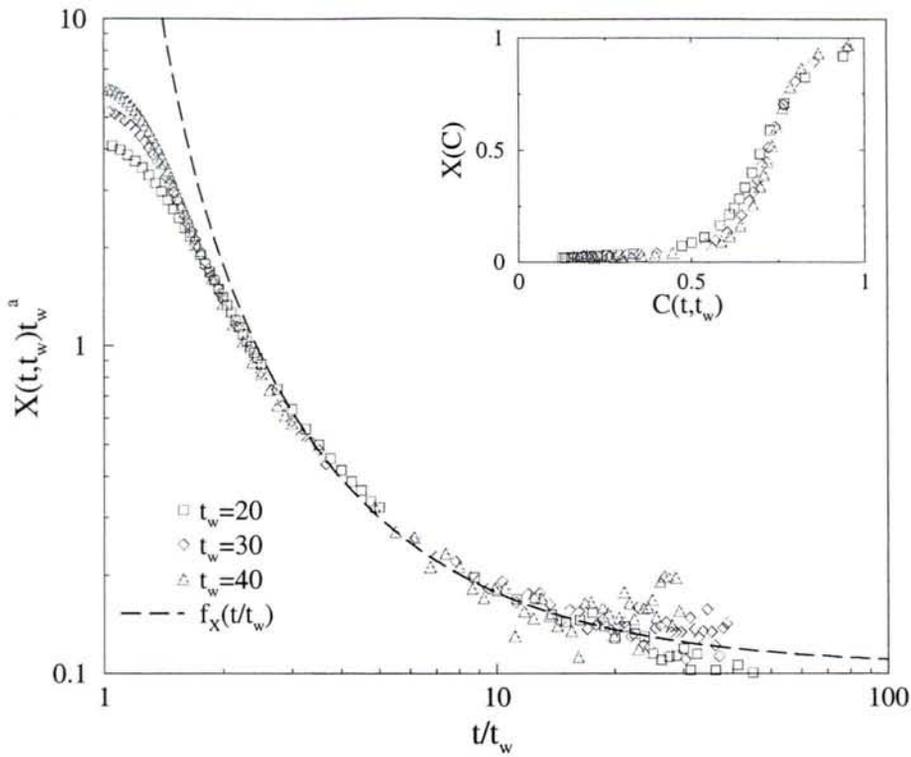


FIG. 4.8 – Taux de fluctuation dissipatif représentés dans la variable  $t/t_w$  lors d'une trempe à  $T = 0.9$  sur un système de taille  $L^3 = 30^3$  (avec 4500 échantillons). L'insert donne la dépendance de  $X(t, t_w)$  avec les fonctions d'autocorrélation (les symboles se réfèrent aux mêmes temps d'attente).

ne dispose pas de la réponse linéaire, Henkel et al. [41, 42] ont montré qu'il est possible d'extraire les exposants  $a$  et  $\lambda_R$  à partir de la susceptibilité thermorémanente  $\rho_{TRM}(t, t_w) = \int_0^{t_w} du R(t, u)$  calculée à  $T \leq T_c$  avec un état initial désordonné. En considérant le modèle d'Ising ( $d = 2$  et  $3$ ) et le modèle sphérique ( $d = 3$ ), ils établissent la forme d'échelle suivante :

$$\rho_{TRM}(t, t_w) = t_w f_M(t/t_w) + t_w^{-\lambda_R/z} g_M(t/t_w), \quad (4.15)$$

où les fonctions d'échelle  $f_M$  et  $g_M$  sont reliées à la réponse linéaire. Une telle approche n'est pas reproductible sur la susceptibilité ZFC  $\chi(t, t_w)$  puisque, toujours d'après Henkel et al. :

$$\chi(t, t_w) \sim \chi_0 + t_w^{-A} g(t/t_w) + O(t_w^{-a}), \quad (4.16)$$

avec  $g(x) \sim x^{-A}$  où l'exposant  $A$  n'est aucunement lié au vieillissement mais plutôt à la rugosité des interfaces entre domaines ordonnés<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Dans le cas de trempes critiques, il apparaît que  $A = 0$  [42].

### 4.3.2 Trempe critique

**Fonctions d'autocorrélation** La figure 4.9 représente les fonctions d'autocorrélation obtenues à  $T_c \approx 2.202$  [87] sur un réseau de dimensions  $L^3 = 50^3$ . Les données ont été multipliées par le préfacteur  $t_w^{2\beta/\nu z_c}$  afin d'isoler la fonction  $f_C$ . Les valeurs des exposants critiques  $\beta$  et  $\nu$  sont données par (4.2). La superposition des courbes relatives aux différents temps d'attente est remarquable, en accord avec (4.6). En analysant la limite  $t \gg t_w$ , la fonction  $f_C$  présente

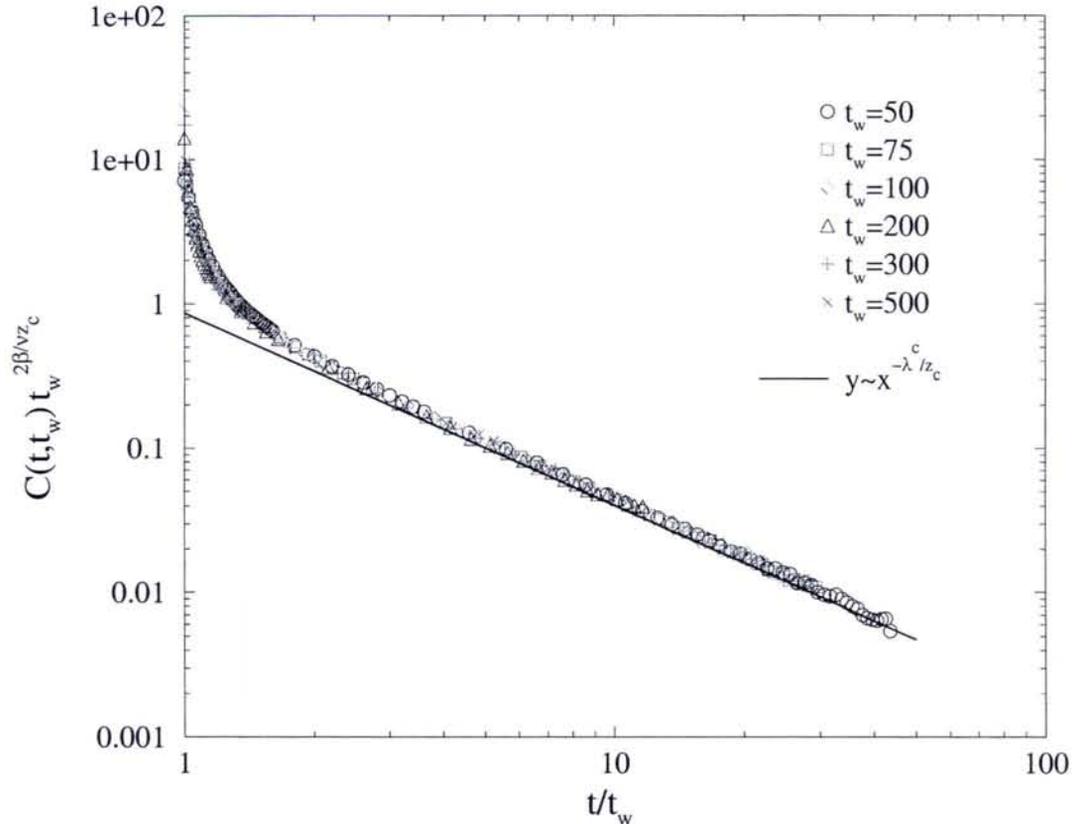


FIG. 4.9 – Fonctions d'autocorrélation calculées à  $T_c$  pour six temps d'attente. Les valeurs moyennes ont été obtenues à partir de 5000 échantillons.

une dépendance purement algébrique caractérisée par l'exposant  $\lambda^c/z_c$ . Nous avons évalué cet exposant grâce à une série de régressions linéaires au sens des moindres carrés sur les variables  $\log f_C$  et  $\log(t/t_w)$  affectées à six temps d'attente. L'insert de la figure 4.10 représente la variation de  $\lambda^c/z_c$  évalué par régression linéaire sur une série d'intervalles de largeur constante dont les centres respectifs explorent le régime asymptotique. Nous remarquons que la zone la plus fiable est située entre 700 et 1200. En effet, pour des temps relativement courts le régime algébrique n'est pas encore totalement établi alors que pour les temps les plus grands les fluctuations statistiques perturbent l'extraction de  $\lambda^c/z_c$ . De cette première analyse, nous en déduisons que  $\lambda^c/z_c$  est compris entre 1.25 et 1.45. Afin de préciser da-

vantage la valeur<sup>4</sup> de  $\lambda^c/z_c$  nous avons effectué des régressions linéaires sur des intervalles de différentes largeurs en utilisant le même procédé que dans les parties 3.2.1 et 3.2.2. La figure 4.10 représente les estimations de  $\lambda^c/z_c$  en fonction de la largeur des intervalles ainsi que les coefficients de corrélation  $r$  associés à chaque régression. Nous en déduisons que les calculs les plus fiables se réfèrent au "plateau" donnant  $\lambda^c/z_c = 1.34 \pm 0.05$ .

En vue d'étudier l'influence des effets de taille finie, nous avons également calculé les fonc-

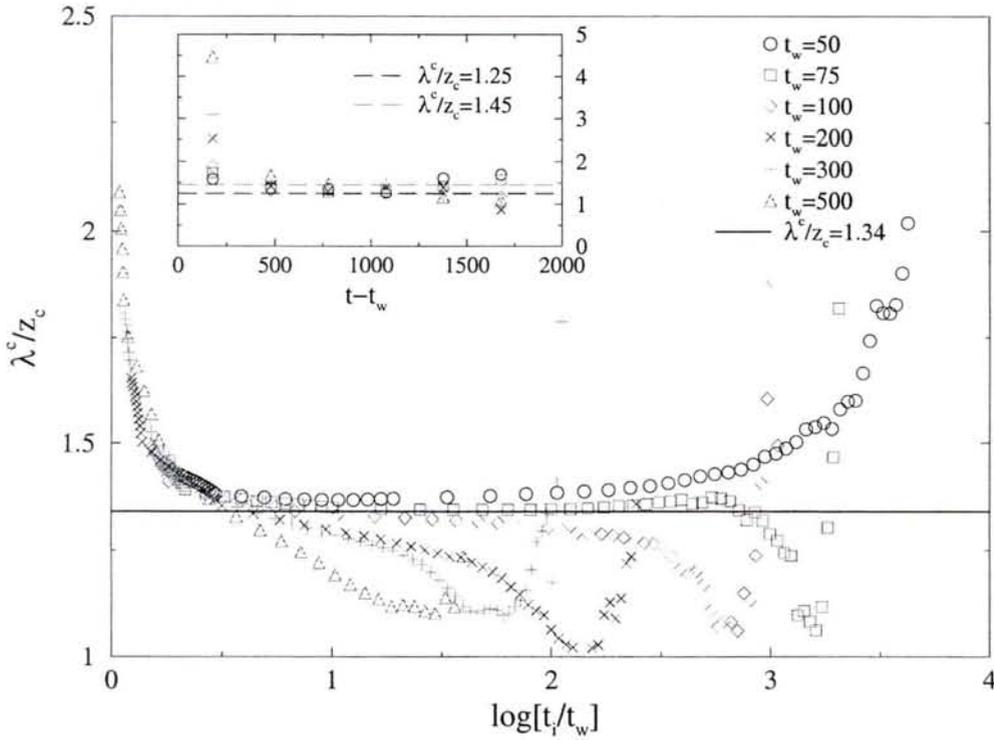


FIG. 4.10 – Variation de l'exposant  $\lambda^c/z_c$  évalué par régressions algébriques dans le régime asymptotique à partir des résultats de la figure 4.9. Les symboles du graphe principal et de l'insert se rapportent aux mêmes temps d'attente.

tions d'autocorrélation sur des systèmes de tailles  $L = 10, 20, 30$  et  $40$ . La figure 4.11 représente l'évolution de  $\lambda^c/z_c$  extrait par régression linéaire sur des systèmes de différentes tailles pour  $t_w = 80$ . Il apparaît clairement que les effets de taille finie influent sur la valeur de l'exposant  $\lambda^c$ . D'autre part pour les plus petites tailles, il est difficile de repérer un régime algébrique vu les variations de  $\lambda^c$ . La longueur typique des domaines ordonnés étant de l'ordre de la taille du système, le régime d'échelle n'est plus vérifié dans ces conditions. Lorsque la taille du système augmente, la figure 4.11 montre que le régime algébrique a bien lieu et son exposant associé  $\lambda^c/z_c$  converge alors vers une valeur proche de 1.34.

Nous poursuivons notre étude des effets de taille finie en analysant le comportement de la

<sup>4</sup>Etant donné que l'exposant dynamique  $z_c$  n'a pas été déterminé avec une grande précision, nous préférons présenter la valeur de  $\lambda^c/z_c$ .

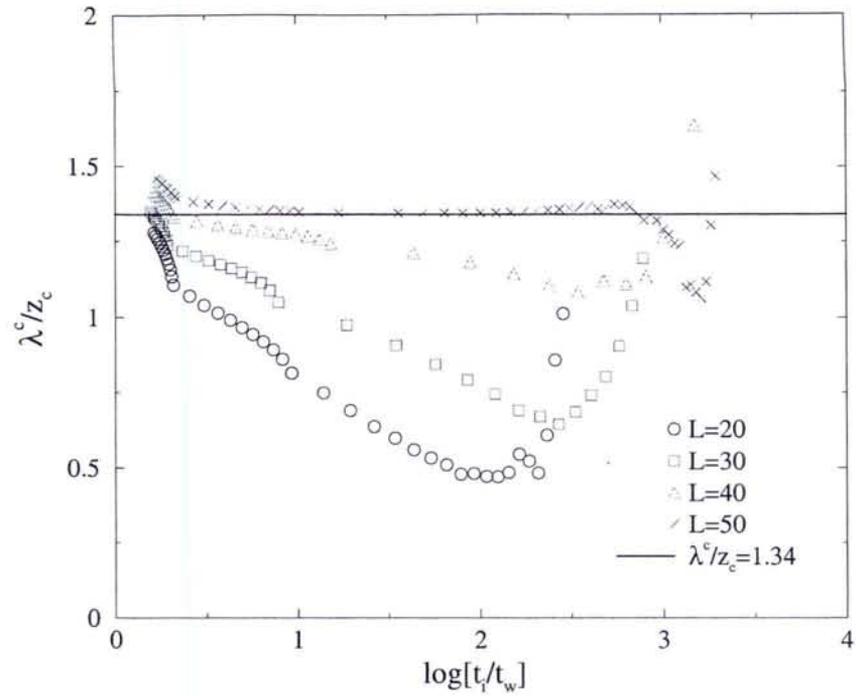


FIG. 4.11 – Evolution de l'exposant  $\lambda^c/z_c$ . avec la taille  $L$  du système à  $t_w = 80$ .

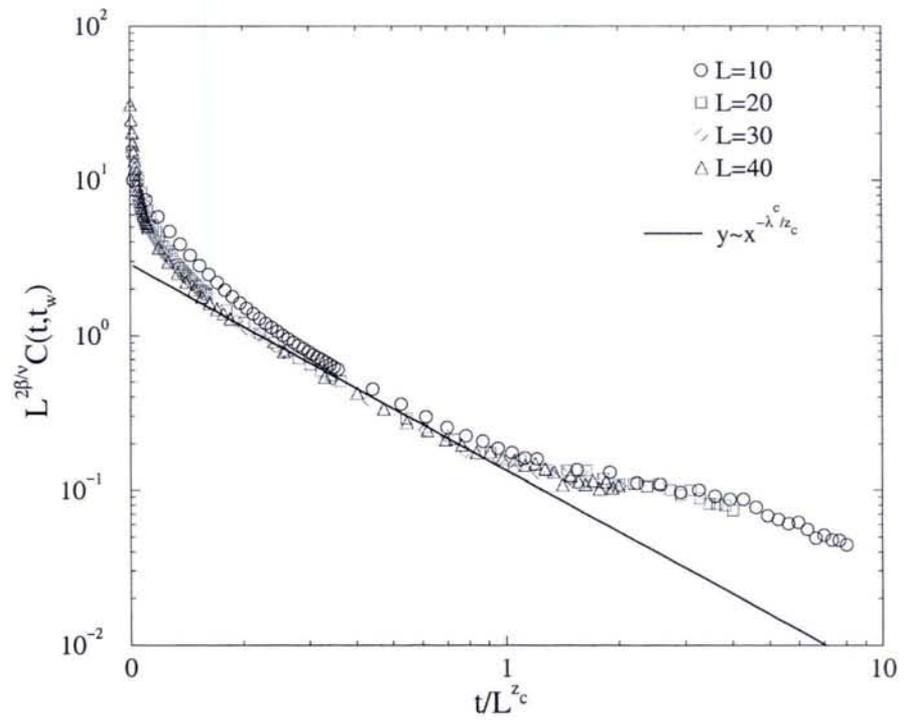


FIG. 4.12 – Fonctions d'autocorrélation exprimées dans la variable d'échelle  $t/L^{z_c}$  pour  $t_w = 0.2L^{z_c}$  avec  $L = 10, 20, 30$  et  $40$ . Les quantités ont été moyennées sur 1000 réalisations.

fonction d'échelle de  $C(t, t_w)$  avec  $L$ . En supposant que les fonctions de corrélation obéissent à la relation d'échelle dynamique :

$$C(t, t_w, L) = b^{-2\beta/\nu} C(b^{-z_c} t, b^{-z_c} t_w, b^{-1} L), \quad (4.17)$$

où  $b$  est un facteur de dilatation arbitraire et en posant  $b = L$ , cette relation devient :

$$C(t, t_w, L) = L^{-2\beta/\nu} \mathcal{F} \left( \frac{t}{L^{z_c}}, \frac{t_w}{L^{z_c}} \right), \quad (4.18)$$

où  $\mathcal{F}$  est une fonction d'échelle. A  $t_w/L^{z_c}$  fixé, nous nous attendons à ce que  $\mathcal{F}$  adopte un comportement algébrique dans la limite des longs temps avec un exposant proche de  $\lambda/z_c$ . La figure 4.12 représente la fonction d'échelle  $\mathcal{F}(t/L^{z_c}, t_w/L^{z_c} = 0.2)$  évaluée sur des systèmes de taille croissante. La superposition des courbes relatives aux différents systèmes confirme la relation (4.18). Dans le régime d'échelle,  $\mathcal{F}(t/L^{z_c}, 0.2) \sim (t/L^{z_c})^{-1.34}$ , confirmant la valeur  $\lambda^c/z_c \approx 1.34 \pm 0.05$ . On constate par ailleurs, que les effets de taille finie deviennent relativement importants au delà de  $t = 2L^{z_c}$ .

### Fonctions de réponse

La fonction de réponse  $R(t, t_w)$  rescalée est représentée sur la figure 4.13 faisant apparaître la fonction d'échelle  $f_R(t/t_w)$ . Malgré les fluctuations critiques, les réponses calculées pour différents temps d'attente se superposent sur une courbe maîtresse adoptant un comportement algébrique pour les longs temps d'observation. Nous avons également tracé (en tirets) la dépendance algébrique attendue, c'est-à-dire  $f_R(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-\lambda^c/z_c}$  avec  $\lambda^c/z_c = 1.34$ . Cette valeur semble confirmer les prédictions de la réf. [16] quant à l'égalité  $\lambda_C = \lambda_R$  lorsque l'état initial est désordonné. De plus, elle satisfait l'encadrement :  $d/2 \leq \lambda^c (\approx 2.68) \leq d$  prédit dans [9, 10] avec  $z_c \approx 2$ .

D'autre part, la fonction d'échelle de la réponse linéaire déduite des théories d'invariance conforme [38] est donnée par :  $f_R(x) = r_0^c x^{-1-a} (x-1)^{1+a-\lambda^c/z_c}$  avec  $a = 2\beta/\nu z_c$ . Cette fonction a été reproduite sur la figure 4.13 avec  $a = 0.5$  et  $\lambda^c/z_c = 1.34$ . La superposition des résultats analytiques et numériques est remarquable pour  $r_0 \simeq 0.17$ . Ceci confirme encore l'hypothèse d'invariance d'échelle locale de la réponse linéaire.

### Rapport de fluctuation-dissipation

L'expression (4.8) montre que le FDR prend une valeur non triviale dans le cas de trempes critiques. Grâce à un développement en  $\epsilon = d - 4$ , Calabrese et Gambassi [27] ont obtenu  $X_\infty = 0.416(8)$ .

La figure 4.14 représente les calculs de susceptibilités magnétiques dans le scénario ZFC, évaluées à  $t_w = 200$ . Les résultats ne montrent quasiment aucune déviation par rapport au théorème de fluctuation-dissipation. Nous avons recalculé  $\chi^{ZFC}(C)$  en modifiant des paramètres tels que  $t_w$  ou l'amplitude  $h_0$  du champ magnétique mais les résultats restent inchangés. Nous avons également évalué la susceptibilité ZFC par intégration de la fonction de réponse  $\chi_R(t, t_w) = \int_{t_w}^t R(t, u) du$  (représentée par des cercles sur la figure 4.14) mais ce

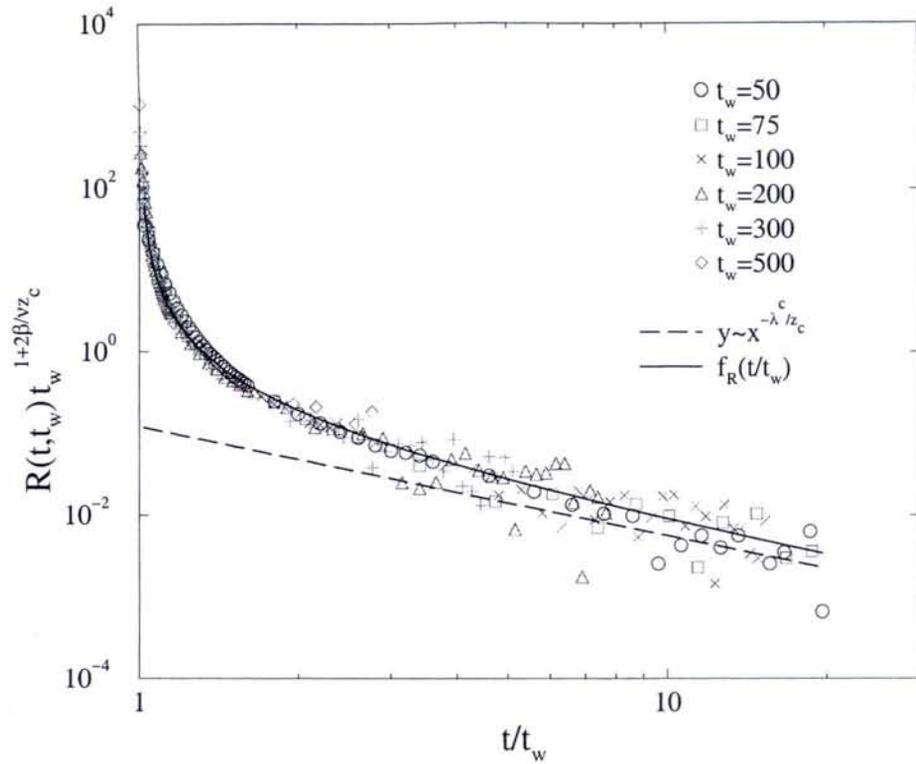


FIG. 4.13 – Fonctions d'échelle de la réponse lors d'une trempe critique d'un système de taille  $L^3 = 50^3$ . Les quantités ont été moyennées sur 5000 échantillons.

calcul confirme les résultats obtenus par la méthode standard. Néanmoins, dans la limite  $C(t, t_w) \rightarrow 0$ , il semble que la susceptibilité ne suive plus la forme imposée par le FDT (voir insert de la figure 4.14). Mais il est impossible d'en déduire une éventuelle valeur de  $X_\infty$  en raison des fluctuations de  $C(t, t_w)$  et  $\chi(t, t_w)$ .

Nous avons calculé numériquement, grâce à (4.12), le taux de fluctuation-dissipation sur des systèmes de taille  $L = 20$  et  $30$ . La figure 4.15 représente le taux de fluctuation dissipation calculé à  $T = T_c$  sur des systèmes cubiques de taille  $L = 20$  et  $L = 30$ . L'insert montre la dépendance de  $X$  avec la fonction d'autocorrélation où, de bas en haut, on a  $t_w = 10, 20$  et  $30$ . Nous voyons ici clairement que le taux de fluctuation-dissipation n'est pas une fonction de  $C(t, t_w)$ . D'après (4.8), le taux de fluctuation-dissipation est une fonction de  $t/t_w$  et comme le signal de  $X(t, t_w)$  est très bruité pour de longs temps, nous avons représenté cette quantité dans la variable  $t_w/t$ . En dépit des fluctuations statistiques, la superposition des courbes de la figure 4.15 confirme la forme d'échelle (4.8). De plus, il s'avère que l'ensemble de nos données converge vers une valeur proche de 0.4. En supposant un comportement algébrique du type :  $X(t, t_w) = X_\infty + \delta \frac{t_w}{t}$ , nous en déduisons  $X_\infty = 0.43 \pm 0.04$ . La ligne continue de la figure 4.15 représente la valeur de FDR obtenue par Calabrese et Gambassi [27], tout à fait compatible avec les résultats numériques.

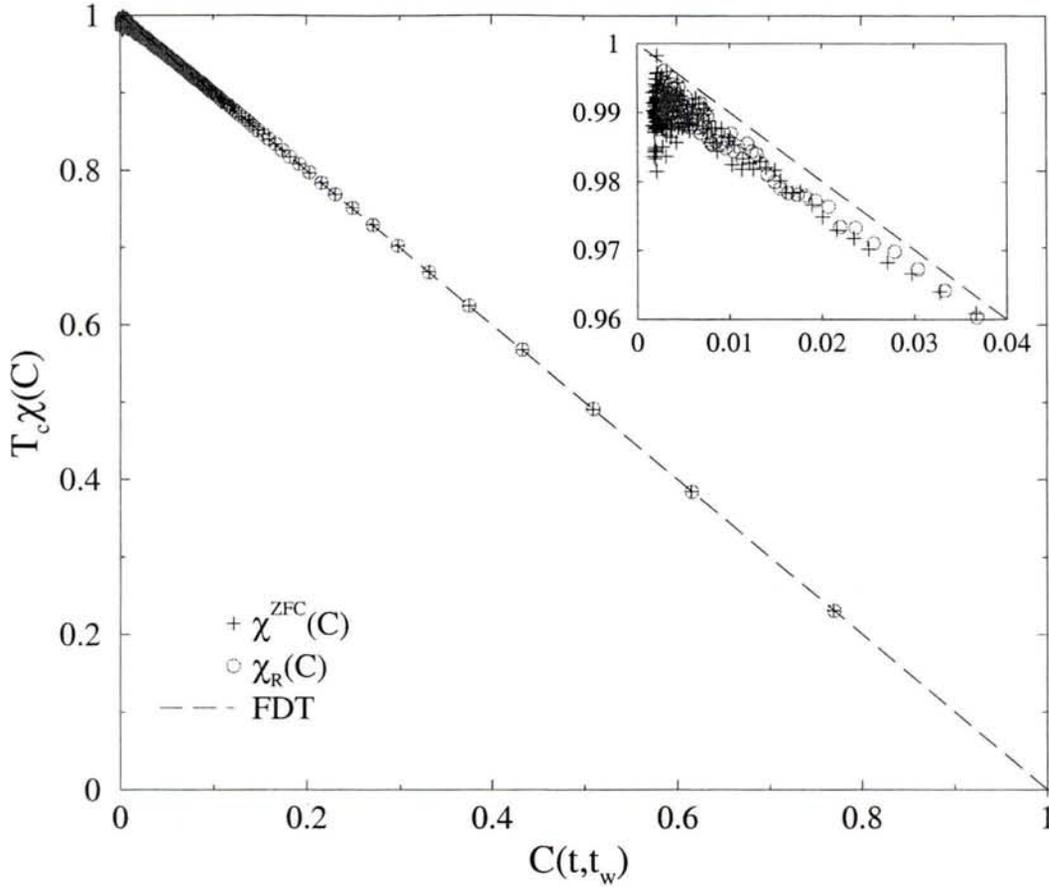


FIG. 4.14 – Susceptibilités magnétiques calculées à  $T_c$  pour  $t_w = 200$ . Les symboles "+" correspondent à la susceptibilité ZFC calculée de manière standard via (2.14) et les cercles se réfèrent au calcul de la réponse intégrée. L'insert représente un agrandissement de zone relative au régime asymptotique. Pour ces deux calculs, nous avons utilisé 500 échantillons.

## 4.4 Conclusion

Nous avons analysé la dynamique hors équilibre du modèle XY 3D par simulations Monte Carlo considérant des trempes depuis un état désordonné.

Les prédictions d'invariance d'échelle sur les fonctions d'autocorrélation et d'autoréponse sont en accord avec nos simulations concernant les trempes dans la phase basse température ( $T < T_c$ ) où :

$$C(t, t_w) \simeq M_{eq}^2(T) f_C(t/t_w) \quad , \quad R(t, t_w) \simeq t_w^{-1-a} f_R(t/t_w)$$

avec  $f_C(x) \simeq f_R(x) \sim x^{-\lambda/z}$  pour  $x \gg 1$ . Une analyse plus fine des données montre que les fonctions d'autocorrélation sont très bien approchées par la forme d'échelle déduite d'une

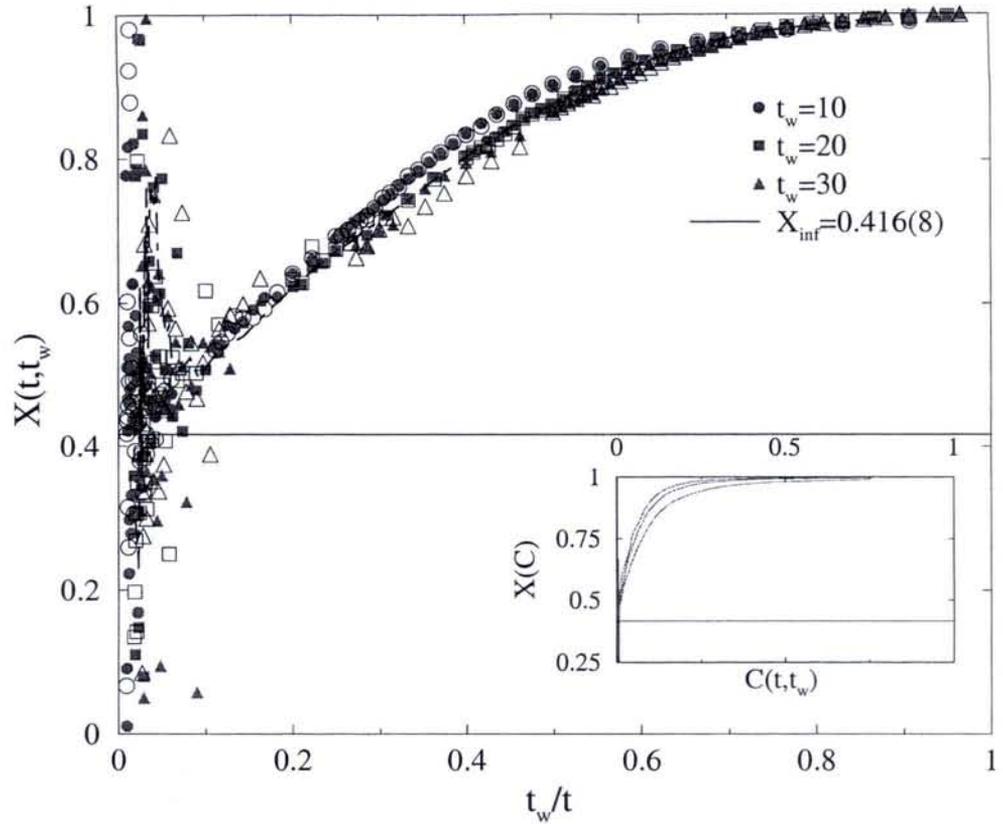


FIG. 4.15 – Taux de fluctuation-dissipation calculé à  $T = T_c$  représenté dans la variable  $t_w/t$ . Les symboles "remplis" se réfèrent au système de taille  $L^3 = 30^3$  (20000 réalisations) et les symboles "vides" à la taille  $L^3 = 20^3$  (26000 réalisations). Les traits mixtes représentent la valeur moyenne de  $X(t, 20)$  opérée sur 5 points consécutifs avec  $L = 30$ .

théorie de champs libres [31] donnant :

$$C(t, t_w) = M_{eq}^2(T) \left[ \frac{(t + t_w)^2}{4tt_w} \right]^{-\lambda_C^0/z}.$$

Dans ce contexte, ce résultat implique que la fonction d'autocorrélation définie par  $C(t, t_w) = \langle \phi(t)\phi(t_w) \rangle$ , est décrite par des champs  $\phi$  dits quasi-primaires (voir annexe C.). Les calculs numériques concernant la réponse linéaire présentent un très bon accord avec la forme analytique calculée à partir de l'hypothèse d'invariance d'échelle locale [38] :

$$R(t, t_w) = r_0 t_w^{-1-a} \left( \frac{t}{t_w} \right)^{1+a-\lambda_R/z} (t - t_w)^{-1-a}.$$

Notons que l'hypothèse IEL a été testée avec succès sur le modèle d'Ising 2D et 3D [39, 40] ainsi que le modèle sphérique 3D [41, 42].

Le comportement algébrique des fonctions d'échelle  $f_C$  et  $f_R$  est caractérisé par un unique exposant  $\lambda = \lambda_C = \lambda_R \approx 1.7 \pm 0.1$ , très proche de l'exposant de champs libres  $\lambda^0 = d/2$  et satisfaisant aux conditions d'encadrement [9, 10, 12] :  $d/2 \leq \lambda \leq d$ . Ce résultat confirme également les prédictions de Picone et al. [16] sur l'égalité des exposants  $\lambda_C$  et  $\lambda_R$  lorsque l'état initial est désordonné. L'analyse numérique des fonctions de réponse montre que  $a = 1/2$ . Cette valeur est également retrouvée dans le modèle sphérique tridimensionnel [98, 15, 20, 16]. Le rapport de fluctuation-dissipation a été déterminé grâce à des simulations ZFC et des calculs sur  $X(t, t_w)$ . Dans les deux approches nous trouvons :  $X_\infty = 0$ , ce résultat étant généralement admis pour toute trempe en-dessous de  $T_c$ . Les analyses du taux de fluctuation dissipation ont par ailleurs confirmé les formes d'échelle attendues concernant les fonctions d'autocorrélation et d'auto-réponse.

Dans le cas de trempes critiques, les calculs des corrélations et de la réponse ont justifié les conjectures actuelles donnant :

$$C(t, t_w) \simeq t_w^{-2\beta/\nu z_c} f_C(t/t_w) \quad , \quad R(t, t_w) \simeq t_w^{-1-2\beta/\nu z_c} f_R(t/t_w)$$

avec  $f_C(x) \simeq f_R(x) \sim x^{-\lambda^c/z_c}$  pour  $x \gg 1$ . Nous avons extrait des fonctions d'autocorrélation la valeur  $\lambda^c/z_c \approx 1.34 \pm 0.05$ . Nous avons vérifié que cette valeur coïncidait avec l'exposant associé à la réponse linéaire. L'étude des effets de taille finie sur l'autocorrélation a confirmé la relation d'échelle dynamique :  $C(t, t_w, L) = b^{-2\beta/\nu} C(b^{-z_c}t, b^{-z_c}t_w, b^{-1}L)$  où  $L$  est la taille du système et  $b$  un facteur de dilatation arbitraire. Les prédictions de l'hypothèse IEL ont également été vérifiées avec succès sur les fonctions d'auto-réponse avec la même valeur de l'exposant  $\lambda^c/z_c$ . Notre estimation satisfait ici encore aux conditions d'encadrement de Fisher, Yeung et al. [9, 10] et se trouve être assez proche de l'exposant critique relatif au modèle d'Ising 3D où<sup>5</sup>  $\lambda_{Is}^c \approx 2.8$  [11].

Les calculs de susceptibilité magnétique obtenue par application d'un champ aléatoire ou par intégration de la réponse linéaire ne montrent aucune violation du FDT alors que les calculs de Calabrese et Gambassi [27], utilisant un développement en  $\epsilon = d - 4$ , prévoient  $X_\infty \simeq 0.416(8)$ . Les calculs numériques du taux de fluctuation dissipation ont révélé que cette quantité converge dans la limite asymptotique vers une constante proche de  $0.43 \pm 0.04$ , compatible avec l'approche analytique.

---

<sup>5</sup>En prenant  $z_c = 2$ , on obtient  $\lambda^c \approx 2.68$  dans le modèle XY à trois dimensions.

## DEUXIEME PARTIE

### Relaxation dans la chaîne quantique d'Ising



# Chapitre 5

## Chaîne quantique d'Ising

### 5.1 Introduction

La chaîne quantique d'Ising en champ transverse constitue un des systèmes les plus simples présentant une transition de phase quantique à température nulle. Outre son intérêt théorique, ce modèle est également étudié expérimentalement<sup>1</sup> dans le contexte des recherches sur les verres quantiques [100]. En effet, lorsque la température de transition de la phase "vitreuse" est suffisamment basse interviennent des effets quantiques.

Depuis plus de vingt ans, de nombreuses études théoriques<sup>2</sup> sur les chaînes quantiques désordonnées s'emploient à comprendre les effets des fluctuations quantiques sur les propriétés à l'équilibre et les phénomènes critiques relatifs à ces systèmes.

Les études sur les verres de spin classiques ont montré que le phénomène de vieillissement était dû à un ralentissement de la dynamique interdisant un retour à l'équilibre (pour des échelles de temps "accessibles" expérimentalement). Pour des systèmes quantiques, la dynamique à température nulle est générée par les fluctuations quantiques et il a été montré expérimentalement [104] et théoriquement que ces systèmes présentaient également du vieillissement [105, 106].

Cette deuxième partie est consacrée à l'étude de la dynamique à température nulle de la chaîne quantique d'Ising désordonnée. Nous nous intéressons à l'évolution des aimantations transverses de volume et de surface ainsi qu'aux fonctions de corrélation bord à bord spin-spin  $\langle \sigma_1^x(t) \sigma_L^x(t) \rangle$ . L'évolution des opérateurs quantiques, représentés en terme de fermions libres, est donnée par l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Les grandeurs dynamiques sont donc obtenues ici à partir d'une équation d'évolution parfaitement justifiée microscopiquement.

Si la solution de la chaîne d'Ising homogène est connue depuis les travaux de Lieb, Schultz

---

<sup>1</sup>La réf.[99] comporte quelques exemples de matériaux décrits par un Hamiltonien d'Ising dans un champ transverse.

<sup>2</sup>De nombreuses techniques ont été employées pour ces études théoriques, nous pouvons notamment citer la méthode des répliques [101], le groupe de renormalisation [102] et les simulations Monte Carlo [103].

et Mattis, le cas du modèle bidimensionnel avec désordre corrélé a été exactement résolu par McCoy et Wu [107]. Grâce à la correspondance entre systèmes classiques à  $d$  dimensions et systèmes quantiques à  $d + 1$  dimensions, Shankar et Murthy [108] ont transcrit les travaux de McCoy et Wu sur la chaîne quantique désordonnée. Plus tard, Fisher [102], s'appuyant sur une procédure de renormalisation introduite par Ma et al. [109], a étudié plus en détail la transition de phase quantique présentée par ce modèle. Fisher caractérisa l'écart au point critique par un paramètre  $\delta$  prenant en compte les distributions des couplages et des champs magnétiques. Il a également montré que l'exposant dynamique  $z$  varie continûment avec  $\delta$  dans la phase paramagnétique ( $\delta > 0$ ) alors qu'au point critique ( $\delta = 0$ ),  $z = \infty$ . Les calculs numériques [110, 111] ainsi que les travaux [112] utilisant l'approche de Ma, ont confirmé et complété les prédictions de Fisher quant aux propriétés de la phase de Griffiths [113, 114, 115]. Les résultats issus des techniques de renormalisation ont été appuyés par des calculs numériques basés sur une représentation des opérateurs en terme de fermions libres. La description fermionique a également permis d'étudier la structure du spectre en énergie [110] ainsi que les aimantations de surface et les fonctions de corrélation spin-spin [116, 117, 118, 119].

Les travaux de Niemeijer [120] et Tjon [121] dans les années 60, ont montré que la relaxation à très basse température de chaînes quantiques n'était pas exponentielle mais algébrique contrairement aux prédictions de Terwiel et Mazur [122]. Plus récemment, les calculs analytiques des aimantations et des fonctions de corrélation dans les chaînes d'Ising et XY homogènes [123, 106, 124, 125, 126] ont confirmé le caractère algébrique de la relaxation<sup>3</sup>. Il a été notamment montré par Schütz et Trimper [106] que lorsque l'état initial est ordonné, l'aimantation décroît comme  $\propto t^{-\omega}$  avec respectivement  $\omega = 3/2$  et  $\omega = 1$  dans les chaînes d'Ising et XX. Les calculs de fonctions d'autocorrélation  $C(t, t_w)$  [106, 126] ont également confirmé la présence de vieillissement dans ces chaînes quantiques. Dans le cas d'une préparation inhomogène, Berim et al. [124] ont montré que l'exposant  $\omega$  dépend explicitement du vecteur d'onde caractérisant l'inhomogénéité de l'état initial.

Cette deuxième partie débute par une présentation générale des chaînes d'Ising quantiques homogène et désordonnée placées dans un champ transverse. Nous rappelons notamment les principaux résultats de Fisher concernant la chaîne présentant des couplages aléatoires. Le chapitre suivant est consacré au calcul des quantités dynamiques en utilisant une description fermionique. Nous exposerons ensuite nos résultats relatifs à la chaîne d'Ising désordonnée placée sous un champ transverse uniforme  $h_0$ . Le système est préparé dans des états parfaitement ordonnés respectivement dans les directions  $x$  et  $z$ . Les calculs concernent l'évolution des aimantations transverses et longitudinales ainsi que des fonctions de corrélation bord à bord pour différentes valeurs de champ. Ce travail a été publié en 2002 dans *The European Physical Journal B* [128].

---

<sup>3</sup>Des mesures expérimentales ont mis en évidence une relaxation magnétique algébrique à très basse température [127].

## 5.2 Modèle d'Ising quantique

### 5.2.1 Cas homogène

#### Présentation

Le modèle d'Ising classique a été introduit par Lenz et Ising en 1920 [129] dans le but de décrire le comportement collectif d'une assemblée de moments magnétiques. Ce modèle considère les interactions magnétiques à courte portée de spins placés sur un réseau  $\Lambda$ . Les moments magnétiques  $S_i = \pm 1$  interagissent en premiers voisins avec des couplages ferro- ( $J > 0$ ) ou antiferromagnétiques ( $J < 0$ ). Le Hamiltonien classique est donné par :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in \Lambda} S_i S_j, \quad (5.1)$$

où  $i$  et  $j$  repèrent les positions des spins premiers voisins.

La chaîne d'Ising quantique décrit les interactions entre des spins  $1/2$  disposés sur un réseau unidimensionnel. Les trois composantes du spin  $S$  sont représentées par des matrices de Pauli :

$$S^{x,y,z} = \frac{1}{2} \sigma^{x,y,z} \quad (5.2)$$

où

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Les matrices de Pauli satisfont les règles de commutation :

$$[\sigma_i^x, \sigma_j^y] = 2i\delta_{ij}\sigma_i^z, \quad [\sigma_i^y, \sigma_j^z] = 2i\delta_{ij}\sigma_i^x, \quad [\sigma_i^z, \sigma_j^x] = 2i\delta_{ij}\sigma_i^y \quad (5.4)$$

et

$$[\sigma_i^x, \sigma_j^x] = [\sigma_i^y, \sigma_j^y] = [\sigma_i^z, \sigma_j^z] = 0. \quad (5.5)$$

Le Hamiltonien de la chaîne d'Ising quantique en champ transverse s'écrit :

$$H = -J \sum_k \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x - h \sum_k \sigma_k^z. \quad (5.6)$$

Ce modèle, présentant une transition de phase quantique à température nulle, a été exactement résolu en 1961 [130] par des méthodes de seconde quantification. Grâce à la correspondance formelle entre des systèmes quantiques à  $d$  dimensions et des systèmes classiques à  $d+1$  dimensions, on montre que ce modèle se situe dans la même classe d'universalité que le modèle d'Ising classique à deux dimensions [107].

#### Diagonalisation du Hamiltonien en champ transverse

Nous considérons une chaîne d'Ising comportant  $L$  sites et placée sous un champ magnétique  $h$  transverse. Nous nous plaçons dans des conditions de bords libres. Le Hamiltonien

est alors défini par :

$$H = -J \sum_{k=1}^{L-1} \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x - h \sum_{k=1}^L \sigma_k^z. \quad (5.7)$$

Ce Hamiltonien peut être réduit à un Hamiltonien de fermions libres par transformation de Jordan-Wigner [131] suivie d'une transformation canonique, de type Bogoliubov [132]. Ici, nous introduisons les opérateurs  $A_k$  et  $B_k$  définis par :

$$A_k = \prod_{j=1}^{k-1} (-\sigma_j^z) \sigma_k^x \quad (5.8)$$

$$B_k = i \prod_{j=1}^{k-1} (-\sigma_j^z) \sigma_k^y. \quad (5.9)$$

Ces opérateurs satisfont les règles d'anticommutation :

$$\{A_k, A_l\} = -\{B_k, B_l\} = 2\delta_{kl} \quad (5.10)$$

$$\{A_k, B_l\} = 0. \quad (5.11)$$

A partir des définitions (5.8) et (5.9), les opérateurs  $\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x$  et  $\sigma_k^z$  peuvent être réexprimés en fonction des opérateurs  $A$  et  $B$  :

$$\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x = B_k A_{k+1} \quad (5.12)$$

$$\sigma_k^z = -A_k B_k. \quad (5.13)$$

En introduisant le vecteur à deux composantes

$$\Gamma_k = \begin{pmatrix} A_k \\ iB_k \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

et son adjoint  $\Gamma_k^+ = (A_k, iB_k)$ , le Hamiltonien (5.7) se réécrit :

$$H = \frac{J}{2} \sum_{k=1}^{L-1} \Gamma_k^+ [\sigma^y + i\sigma^x] \Gamma_{k+1} + \frac{h}{2} \sum_{k=1}^L \Gamma_k^+ \sigma^y \Gamma_k. \quad (5.15)$$

Cette relation peut être réexprimée sous une forme plus compacte :

$$H = \frac{1}{2} \Gamma^+ \mathcal{T} \Gamma \quad (5.16)$$



### 5.2.2 Cas désordonné

#### Présentation

Le modèle d'Ising occupe une place de choix dans l'étude de systèmes désordonnés puisqu'il a été résolu de manière analytique par McCoy et Wu [107]. Le modèle de Wu et McCoy [107, 114] considère des spins d'Ising placés sur un réseau rectangulaire. Les couplages horizontaux  $J_i$  sont aléatoires mais invariants le long d'une même colonne alors que les liaisons verticales  $K$  sont toutes identiques (voir figure 5.1).

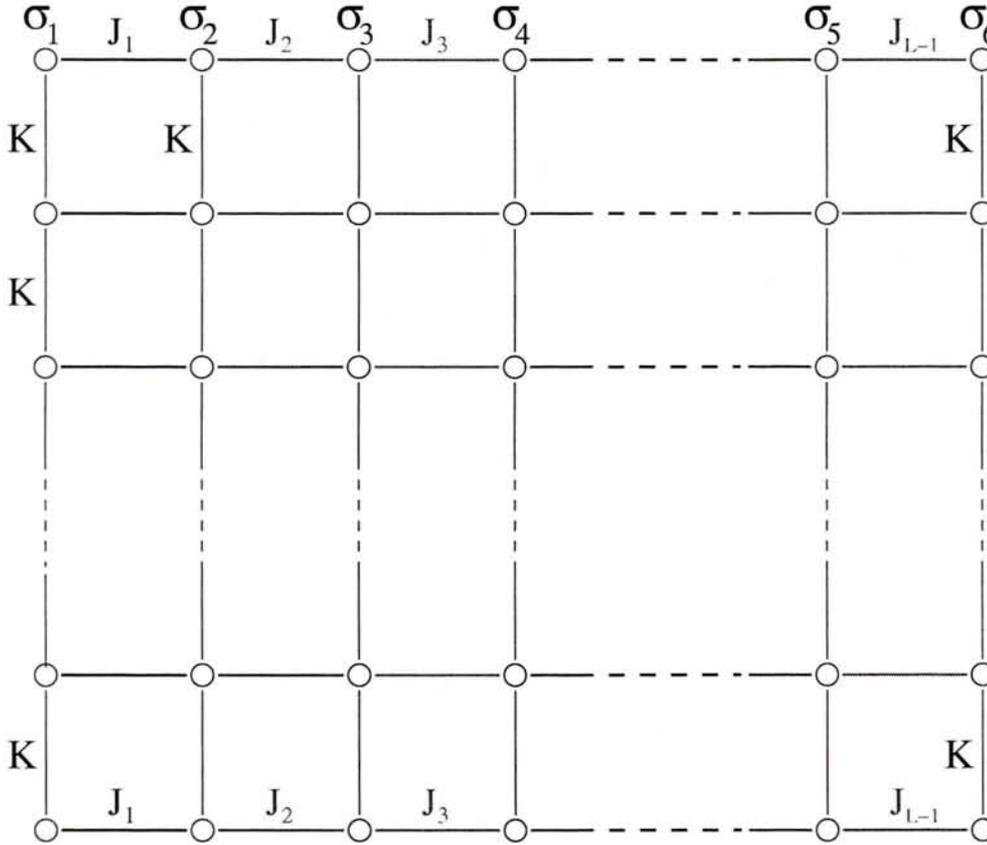


FIG. 5.1 – Modèle de McCoy et Wu

L'intérêt de ce modèle, a priori artificiel, est dû à l'équivalence de sa matrice de transfert dans la direction verticale avec le Hamiltonien quantique :

$$\mathcal{H} = - \sum_i J_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - \sum_i h_i \sigma_i^z, \quad (5.23)$$

où les champs  $h_i$ , tous identiques, sont reliés aux liaisons  $K$ . Par la suite, Shankar et Murthy [108] ont étendu ce modèle à des champs magnétiques  $h_i$  aléatoires.

Les travaux de Shankar et al. [108] et Fisher [102] sur la chaîne d'Ising décrite par le Hamiltonien (5.23) ont montré que ce système présente une transition de phase quantique à

température nulle lorsque :

$$[\ln J] = [\ln h] \quad (5.24)$$

où  $[\cdot]$  représente une moyenne sur les réalisations du désordre. L'écart au point critique est paramétré par :

$$\delta = \frac{[\ln h] - [\ln J]}{\text{var}[h] + \text{var}[J]}, \quad (5.25)$$

où  $\text{var}[\cdot]$  désigne la variance de la distribution considérée. Dans toute la suite, nous noterons respectivement  $\pi(J)$  et  $\rho(h)$  les distributions des couplages et des champs.

### Propriétés à température nulle

A température nulle, la chaîne d'Ising désordonnée en champ transverse présente un point critique séparant une phase paramagnétique ( $\delta > 0$ ) d'une phase aimantée ( $\delta < 0$ ). La phase paramagnétique présente une particularité pour  $\delta < \delta_G$  où  $\delta_G$  est la valeur maximale de  $\delta$  pour laquelle il existe des domaines  $\Lambda_G$  vérifiant  $h_i < J_i, \forall i \in \Lambda_G$ . Dans cette phase

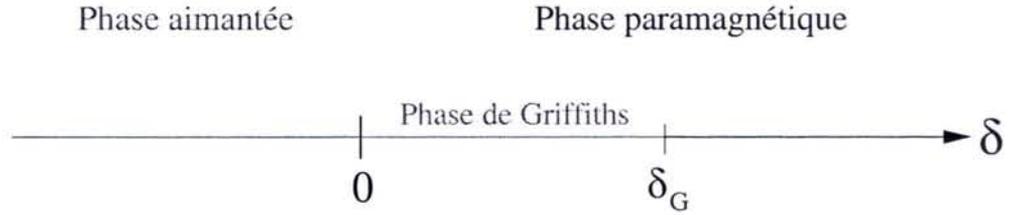


FIG. 5.2 – Diagramme de phase de la chaîne d'Ising désordonnée en champ transverse à température nulle.

faiblement désordonnée (appelée aussi phase *de Griffiths*<sup>5</sup>) l'énergie libre n'est plus une fonction analytique du champ longitudinal<sup>6</sup>  $H_x$ .

**Phase désordonnée ( $\delta > 0$ )** L'exposant dynamique  $z$  reliant le temps de relaxation  $\tau_r$  à l'échelle de longueur caractéristique  $l$  associée est défini par  $\tau_r \sim l^z$ . Il a été montré [117] que dans la phase de Griffiths, cet exposant peut être calculé à partir de la racine positive de l'équation :

$$\left[ \left( \frac{J}{h} \right)^{1/z} \right] = 1, \quad (5.26)$$

où  $[\cdot]$  représente une valeur moyenne sur le désordre gelé. L'équation (5.26) implique que  $z$  dépend de  $\delta$  et pour  $0 < \delta < \delta_G$  [102, 110, 116] :

$$z = \frac{1}{2}\delta(1 + O(\delta))^2, \quad \delta \rightarrow 0, \quad (5.27)$$

<sup>5</sup>Il existe également une phase de Griffiths dans la région faiblement ordonnée où réciproquement  $J_i < h_i, \forall i \in \Lambda_G$ .

<sup>6</sup>Ce champ intervient dans le Hamiltonien par une interaction du type  $H_x \sigma_i^x$ .

et

$$\lim_{\delta \rightarrow \delta_G^-} z = 1. \quad (5.28)$$

Dans la phase de Griffiths, l'aimantation  $m^x$  est une fonction singulière du champ magnétique uniforme  $H_x$  [114, 102] :  $m_{sing}^x(H_x) \sim |H_x|^{1/2}$ , induisant une susceptibilité magnétique infinie. Dans toute la phase paramagnétique, les fonctions de corrélation spatiales  $C_r^x = \langle \sigma_i^x \sigma_{i+r}^x \rangle$  présentent une décroissance exponentielle de la forme :  $C_r^x \sim \exp(-r/\xi)$  où la longueur de corrélation moyenne  $\xi$  est donnée par :

$$\xi \approx l_V \delta^{-\nu} \quad , \quad l_V = \frac{2}{\text{var}[h] - \text{var}[J]} \quad , \quad (5.29)$$

avec  $\nu = 2$ .

**Phase critique ( $\delta = 0$ )** Dans la phase critique, le temps de relaxation  $\tau_r$ , inversement proportionnel à l'espacement des niveaux d'énergie du bas du spectre, est relié à la longueur de corrélation  $\xi$  par :

$$\ln \tau_r \sim \xi^{1/2} \quad , \quad (5.30)$$

correspondant à  $z_c \rightarrow \infty$ . A l'approche du point critique, l'aimantation de surface  $m_s = \langle \sigma_1^z \rangle$  se comporte comme

$$m_s \sim \delta^{\beta_s} \quad , \quad (5.31)$$

avec  $\beta_s = 1$  [114]. L'aimantation de volume, définie par  $\langle \sigma_i^z \rangle$  ( $i$  étant affecté à un site "suffisamment éloigné" de la surface) est caractérisée par un autre exposant  $\beta = 2 - (1 + \sqrt{5})/2$  d'après les résultats de Fisher [102]. La moyenne des fonctions de corrélation spatiale  $[C_r^x]$  présente un comportement algébrique de la forme :

$$[C_r^x] \sim \frac{1}{|r|^{2-\phi}} \quad , \quad \phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad (5.32)$$

Au voisinage du point critique, les distributions de probabilité étant très étendues, les quantités correspondantes ne sont plus *auto-moyennantes*. De ce fait, les valeurs moyennes et les valeurs typiques ne coïncident plus. La valeur moyenne représente l'évaluation de la grandeur mesurée au cours d'une expérience alors que la valeur typique est la valeur obtenue avec une probabilité de un pour un événement donné. Cette propriété caractéristique, apparaissant dans certains systèmes désordonnés, se manifeste dans l'évaluation des fonctions de corrélation spatiales  $C_r^x$ . La valeur moyenne  $[C_r^x]$  est essentiellement obtenue à partir de rares événements correspondant à une paire de spins fortement corrélés :  $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+r}^x \rangle \simeq 1$ . Shankar et Murthy ont montré [108, 102] que pour de faibles valeurs de  $\delta$  les corrélations spatiales *typiques* adoptent une décroissance exponentielle :

$$-\ln C_r^x \approx \frac{|r|}{\xi_t} \quad , \quad (5.33)$$

où la longueur de corrélation typique  $\xi_t$  est caractérisée par l'exposant critique  $\nu_t = 1$  (qui est la valeur de  $\nu$  dans la chaîne d'Ising homogène).

### 5.3 Calculs dynamiques

La dynamique "naturelle" de systèmes quantiques est gouvernée par l'équation de Liouville<sup>7</sup> :

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = i[H, \rho(t)] \equiv \mathcal{L}(\rho(t)) , \quad (5.34)$$

où  $\rho$  est l'opérateur densité,  $H$  le Hamiltonien et  $[, ]$  un commutateur. Le super-opérateur  $\mathcal{L}$  est appelé opérateur quantique de Liouville. La valeur moyenne d'une observable  $\mathcal{O}$  à l'instant  $t$  est donnée par :

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) = Tr\{\rho(t)\mathcal{O}\} , \quad (5.35)$$

avec  $Tr\{\rho\} = 1$ , où  $Tr\{\cdot\}$  désigne la trace.

Habituellement, afin d'étudier les propriétés dynamiques d'un système quantique, on le couple à un bain lui-même décrit de manière quantique. Le réservoir peut être notamment modélisé par une assemblée d'oscillateurs harmoniques en équilibre à une température  $T$ . Le Hamiltonien total  $H$  est divisé en trois termes :

$$H = H_s + H_I + H_b , \quad (5.36)$$

où  $H_s$  et  $H_b$  sont respectivement les Hamiltoniens du système et du bain et  $H_I$  représente l'interaction entre ces deux parties. À présent, les quantités moyennes sur le système sont obtenues à partir de l'opérateur densité réduit :

$$\rho_s(t) = Tr_b\{\rho(t)\} , \quad (5.37)$$

où l'on a effectué la trace de  $\rho(t)$  sur les degrés de liberté du bain. La valeur moyenne de l'observable  $\mathcal{O}$  est donnée par :

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) = Tr_s\{\rho_s(t)\mathcal{O}\} , \quad (5.38)$$

où  $Tr_s$  est la trace réalisée sur les degrés de liberté du système.

Cette approche est en général très complexe et nous avons choisi une voie plus simple. Nous considérons le cas d'un système isolé préparé dans un état initial pur, décrit par le ket  $|\Psi_0\rangle$ . L'évolution temporelle de  $|\Psi_0\rangle$  est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$|\Psi(t)\rangle = \exp(-iHt)|\Psi_0\rangle , \quad (5.39)$$

où  $H$  est le Hamiltonien du système fermé. La valeur moyenne à l'instant  $t$  de l'opérateur  $\mathcal{O}$  est alors donnée par la moyenne quantique :

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) = \langle \Psi(t)|\mathcal{O}|\Psi(t)\rangle . \quad (5.40)$$

Dans la représentation de Heisenberg, l'évolution de l'observable est traduite dans l'opérateur

$$\mathcal{O}(t) = \exp(iHt)\mathcal{O}\exp(-iHt) , \quad (5.41)$$

---

<sup>7</sup>Cette relation est l'analogie quantique de (1.2)

et sa valeur moyenne est obtenue par :

$$\langle O \rangle(t) = \langle \Psi_0 | \exp(iHt) \mathcal{O}(t) \exp(-iHt) | \Psi_0 \rangle . \quad (5.42)$$

Nous nous intéressons au calcul des valeurs moyennes des aimantations et des fonctions de corrélations dans une chaîne d'Ising de taille  $L$  décrite par le Hamiltonien (5.23) dans des conditions de bords libres. Le système est initialement préparé dans un état  $|\Psi_0\rangle$ . L'évolution temporelle de l'aimantation transverse au site  $i$  est alors donnée par :

$$m_{\Psi_0}^z(i, t) = \langle \Psi_0 | \sigma_i^z(t) | \Psi_0 \rangle , \quad (5.43)$$

où  $\sigma_i^z$  est la matrice de Pauli introduite dans (5.3). De la même façon, on étudie les fonctions de corrélation bord à bord  $\tilde{C}_L^{\Psi_0}(t)$  définies par :

$$\tilde{C}_L^{\Psi_0}(t) \equiv \langle \sigma_1^x(t) \sigma_L^x(t) \rangle = \langle \Psi_0 | \sigma_1^x(t) \sigma_L^x(t) | \Psi_0 \rangle , \quad (5.44)$$

Dans toute la suite, nous considérerons deux types d'états initiaux. Le système peut être préparé dans l'état  $|\Psi_0\rangle = |z\rangle$  défini par :

$$|z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad (5.45)$$

et satisfaisant  $\sigma_i^z |z\rangle = |z\rangle$  pour  $i = 1, 2, \dots, L$ . L'autre état initial considéré, noté  $|x\rangle$ , est donné par :

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} , \quad (5.46)$$

et vérifie  $\sigma_i^x |x\rangle = |x\rangle$  pour  $i = 1, 2, \dots, L$ . L'action respective des opérateurs  $\sigma_i^x$  et  $\sigma_i^z$  sur les états  $|z\rangle$  et  $|x\rangle$  provoque le renversement du spin  $i$  puisque :

$$\sigma^x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma^z \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.47)$$

en d'autres termes :

$$\langle z | \sigma_i^x | z \rangle = 0 \quad , \quad \langle x | \sigma_i^z | x \rangle = 0 \quad (5.48)$$

pour  $i = 1, 2, \dots, L$ . Il en est de même pour l'opérateur  $\sigma_i^y$  :

$$\langle x | \sigma_i^y | x \rangle = \langle z | \sigma_i^y | z \rangle = 0 \quad , \quad i = 1, 2, \dots, L . \quad (5.49)$$



En inversant ces expressions, nous obtenons :

$$\eta_q^+ = \frac{1}{2} \sum_k (\phi_q(k) A_k + \psi_q(k) B_k) \quad (5.56)$$

$$\eta_q = \frac{1}{2} \sum_k (\phi_q(k) A_k - \psi_q(k) B_k) . \quad (5.57)$$

### Expression des contractions

L'évolution temporelle à température nulle des opérateurs fermioniques diagonaux  $\eta_q^+$  et  $\eta_q$  est donnée par :

$$\eta_q^+(t) = e^{i\mathcal{H}t} \eta_q^+ e^{-i\mathcal{H}t} = e^{i\epsilon_q t \eta_q^+} \eta_q^+ e^{-i\epsilon_q t \eta_q^+} . \quad (5.58)$$

Nous avons utilisé ici la forme quadratique (5.15) pour  $\mathcal{H}$  ainsi que la relation de commutation  $[\eta_q^+, \eta_{q'}] = \delta_{q,q'}$ . D'autre part, comme  $(\eta_q^+)^2 = 0$ , nous obtenons :  $\eta_q^+ e^{-i\epsilon_q t \eta_q^+} = \eta_q^+$ , ce qui implique :

$$\eta_q^+(t) = e^{i\epsilon_q t} \eta_q^+ \quad (5.59)$$

et

$$\eta_q(t) = e^{-i\epsilon_q t} \eta_q \quad (5.60)$$

Nous en déduisons l'évolution temporelle des opérateurs échelle :

$$A_k(t) = \sum_q \phi_q(k) [e^{i\epsilon_q t} \eta_q^+ + e^{-i\epsilon_q t} \eta_q] \quad (5.61)$$

$$B_k(t) = \sum_q \psi_q(k) [e^{i\epsilon_q t} \eta_q^+ - e^{-i\epsilon_q t} \eta_q] . \quad (5.62)$$

En réinjectant dans ces deux relations les expressions de  $\eta_q^+$  et  $\eta_q$  provenant de (5.56,5.57), nous obtenons :

$$A_k(t) = \sum_l \langle A_k A_l \rangle_t A_l + \langle A_k B_l \rangle_t B_l \quad (5.63)$$

et

$$B_k(t) = \sum_l \langle B_k A_l \rangle_t A_l + \langle B_k B_l \rangle_t B_l , \quad (5.64)$$

où les contractions  $\langle \dots \rangle_t$  définies à partir d'anticommutateurs sont données par [126, 125] :

$$\langle A_k A_l \rangle_t \equiv \frac{1}{2} \{A_k(t), A_l\} = \sum_q \phi_q(k) \phi_q(l) \cos(\epsilon_q t) \quad (5.65)$$

$$\langle B_k B_l \rangle_t \equiv \frac{1}{2} \{B_k(t), B_l\} = \sum_q \psi_q(k) \psi_q(l) \cos(\epsilon_q t) \quad (5.66)$$

et

$$\langle A_k B_l \rangle_t = \langle B_l A_k \rangle_t = i \sum_q \phi_q(k) \psi_q(l) \sin(\epsilon_q t) . \quad (5.67)$$

Ces contractions peuvent être exprimées en terme de fonctions de Bessel  $J_\nu(x)$  lorsque la chaîne est homogène [126, 125] :

$$\langle A_k A_l \rangle_t = \langle B_k B_l \rangle_t = (-1)^{k+l} J_{2k-2l}(2t) \quad (5.68)$$

$$\langle A_k B_l \rangle_t = i(-1)^{k+l+1} J_{2k-2l+1}(2t) , \quad (5.69)$$

lorsque  $k = O(L/2)$ . Dans le cas désordonné, les contractions sont calculées numériquement à partir des vecteurs  $\phi_q$  et  $\psi_q$  extraits de  $V_q$  et des valeurs propres  $\epsilon_q$ .

### 5.3.2 Calcul des aimantations moyennes

L'évolution de l'aimantation transversale  $m_{\Psi_0}^z(i, t)$  est définie par :

$$m_{\Psi_0}^z(i, t) = \langle \Psi_0 | B_i(t) A_i(t) | \Psi_0 \rangle . \quad (5.70)$$

Le produit d'opérateurs  $B_i(t) A_i(t)$  déduit de (5.63) et (5.64) peut se réécrire de manière plus compacte sous la forme :

$$B_i(t) A_i(t) = \sum_{\substack{j, j' \\ i_1, i_2}} \langle B_i \Gamma_j^{i_1} \rangle_t \langle A_i \Gamma_{j'}^{i_2} \rangle_t \Gamma_j^{i_1} \Gamma_{j'}^{i_2} \quad (5.71)$$

où

$$\Gamma_j^{i_1} = \begin{cases} A_j & \text{si } i_1 = 1 \\ B_j & \text{si } i_1 = 2 \end{cases} . \quad (5.72)$$

Ainsi  $m_{\Psi_0}^z(i, t)$  est donné par l'expression :

$$m_{\Psi_0}^z(i, t) = \sum_{\substack{j, j' \\ i_1, i_2}} \langle B_i \Gamma_j^{i_1} \rangle_t \langle A_i \Gamma_{j'}^{i_2} \rangle_t \langle \Psi_0 | \Gamma_j^{i_1} \Gamma_{j'}^{i_2} | \Psi_0 \rangle , \quad (5.73)$$

où il reste à déterminer  $\langle \Psi_0 | \Gamma_j^{i_1} \Gamma_{j'}^{i_2} | \Psi_0 \rangle$  en fonction de l'état initial.

#### Système préparé dans l'état $|z\rangle$

L'expression de  $m_z^z(i, t)$  fait intervenir les contributions non nulles des termes :  $\langle z | \Gamma_j^{i_1} \Gamma_{j'}^{i_2} | z \rangle$ . L'action des opérateurs  $\Gamma_j^{i_1}$  et  $\Gamma_{j'}^{i_2}$  renverse respectivement les spins situés en  $j$  et  $j'$ . De ce fait, les contributions non nulles apparaissent pour  $j = j'$ . Dans ce cas, nous avons pour  $j = 1, 2, \dots, L$  :

$$\langle z | A_j A_j | z \rangle = -\langle z | B_j B_j | z \rangle = 1 , \quad (5.74)$$

puisque  $A^2 = -B^2 = 1$ , quelque soit  $|\Psi_0\rangle$ , et

$$\langle z | A_j B_j | z \rangle = -\langle z | B_j A_j | z \rangle = -1 . \quad (5.75)$$

Nous en déduisons :

$$m_z^z(i, t) = \langle z | \sigma_i^z(t) | z \rangle = \sum_j (\langle B_i A_j \rangle_t \langle A_i A_j \rangle_t - \langle B_i B_j \rangle_t \langle A_i B_j \rangle_t) + \sum_j (\langle B_i B_j \rangle_t \langle A_i A_j \rangle_t - \langle B_i A_j \rangle_t \langle A_i B_j \rangle_t) \quad (5.76)$$

On montre assez facilement que la première somme dans (5.76) s'annule exactement réduisant le résultat final à :

$$m_z^z(i, t) = \sum_{j=1}^L \left( \langle B_i A_j \rangle_t \langle A_i A_j \rangle_t - \langle B_i B_j \rangle_t \langle A_i B_j \rangle_t \right) \quad (5.77)$$

L'aimantation transverse est évaluée numériquement à partir de l'expression (5.77) comportant les contractions calculées au préalable grâce à (5.65, 5.66, 5.67).

### Système préparé dans l'état $|x\rangle$

En appliquant la même méthode au calcul de  $m_x^z(i, t)$ , nous devons évaluer les contributions non nulles de  $\langle x | \Gamma_j^{i_1} \Gamma_{j'}^{i_2} | x \rangle$ . Ici, l'action des opérateurs  $\Gamma_j^{i_1}$  et  $\Gamma_{j'}^{i_2}$  sur l'état  $|x\rangle$  est différente du cas précédent. Par exemple, pour  $j < j'$  l'opérateur  $A_j A_{j'}$  retourne les spins situés entre les positions  $j$  et  $j' - 1$ . Les contributions non nulles concernent les termes de type :

$$\langle x | A_j A_j | x \rangle = -\langle x | B_j B_j | x \rangle = 1 \quad (5.78)$$

$$\langle x | A_{j+1} B_j | x \rangle = -\langle x | B_j A_{j+1} | x \rangle = 1. \quad (5.79)$$

Nous en déduisons :

$$m_x^z(i, t) = \langle x | \sigma_i^z(t) | x \rangle = \sum_j (\langle B_i A_j \rangle_t \langle A_i A_j \rangle_t - \langle B_i B_j \rangle_t \langle A_i B_j \rangle_t) + \sum_j (\langle B_i A_{j+1} \rangle_t \langle A_i B_j \rangle_t - \langle B_i B_j \rangle_t \langle A_i A_{j+1} \rangle_t) \quad (5.80)$$

où comme précédemment, la première somme s'annule. L'évolution de l'aimantation est donc donnée par :

$$m_x^z(i, t) = \sum_{j=1}^L \left( \langle B_i A_{j+1} \rangle_t \langle A_i B_j \rangle_t - \langle B_i B_j \rangle_t \langle A_i A_{j+1} \rangle_t \right). \quad (5.81)$$

### 5.3.3 Fonctions de corrélation connexes $C_L^{x,z}(t)$

L'évolution des fonctions de corrélation  $\tilde{C}_L^{\Psi_0}(t)$  se détermine grâce à la moyenne :

$$\tilde{C}_L^{\Psi_0}(t) = \langle \Psi_0 | A_1(t) B_L(t) Q | \Psi_0 \rangle, \quad (5.82)$$

où nous avons utilisé (5.51). Nous devons donc évaluer les contributions non nulles des termes  $\langle \Psi_0 | \Gamma_j^{i_1} \Gamma_{j'}^{i_2} Q | \Psi_0 \rangle$ .

Pour un système préparé dans l'état  $|z\rangle$ , l'action de l'opérateur  $Q$  sur l'état initial est :

$$Q|z\rangle = \prod_{m=1}^L (-\sigma_m^z)|z\rangle = (-1)^L|z\rangle . \quad (5.83)$$

Les contributions non nulles concernent les cas où  $i_1 \neq i_2$  et  $j = j'$ . Dans une chaîne comportant un nombre de sites pair, l'expression des fonctions de corrélation  $\tilde{C}_L^z(t)$  vaut alors :

$$\tilde{C}_L^z(t) = \sum_{j=1}^L \left( \langle A_1 B_j \rangle_t \langle B_L A_j \rangle_t - \langle A_1 A_j \rangle_t \langle B_L B_j \rangle_t \right) . \quad (5.84)$$

La fonction de corrélation connexe  $C_L^z(t)$  est définie par :

$$C_L^z(t) = \tilde{C}_L^z(t) - \langle z | \sigma_1^x(t) | z \rangle \langle z | \sigma_L^x(t) | z \rangle , \quad (5.85)$$

et comme :

$$\langle z | \sigma_1^x(t) | z \rangle = \langle z | \sigma_L^x(t) | z \rangle = 0 , \quad (5.86)$$

alors :

$$C_L^z(t) = \tilde{C}_L^z(t) . \quad (5.87)$$

Lorsque  $|\Psi_0\rangle = |x\rangle$ , l'action de l'opérateur  $Q$  sur l'état initial renverse tous les spins de la chaîne, de sorte que :

$$Q|x\rangle = |\bar{x}\rangle , \quad (5.88)$$

où  $\langle x | \bar{x} \rangle = 0$ . Les éléments non nuls sont donnés par :

$$\langle x | A_1 B_L | \bar{x} \rangle = -\langle x | B_L A_1 | \bar{x} \rangle = 1 . \quad (5.89)$$

Nous en déduisons l'évolution des fonctions de corrélation  $\tilde{C}_L^x(t)$  :

$$\tilde{C}_L^x(t) = \langle A_1 A_1 \rangle_t \langle B_L B_L \rangle_t - \langle A_1 B_L \rangle_t \langle B_L A_1 \rangle_t . \quad (5.90)$$

La fonction de corrélation connexe  $C_L^x(t)$  est obtenue en retranchant à (5.90) le produit  $\langle x | \sigma_1^x(t) | x \rangle \langle x | \sigma_L^x(t) | x \rangle$  dont les termes sont donnés par :

$$\langle x | \sigma_1^x(t) | x \rangle = \langle x | A_1(t) | x \rangle = \langle A_1 A_1 \rangle_t \quad (5.91)$$

et

$$\langle x | \sigma_L^x(t) | x \rangle = \langle x | B_L(t) Q | x \rangle = \langle x | B_L(t) | \bar{x} \rangle = \langle B_L B_L \rangle_t . \quad (5.92)$$

Ainsi, la fonction de corrélation connexe est réduite à :

$$C_L^x(t) = -\langle A_1 B_L \rangle_t \langle B_L A_1 \rangle_t = |\langle A_1 B_L \rangle_t|^2 . \quad (5.93)$$



# Chapitre 6

## Dynamique hors de l'équilibre

Nous étudions la dynamique hors équilibre d'une chaîne d'Ising désordonnée de taille  $L$  avec des conditions de bords libres. Le Hamiltonien est défini par :

$$\mathcal{H} = - \sum_{k=1}^{L-1} J_k \sigma_k^x \sigma_{k+1}^x - \sum_{k=1}^L h_k \sigma_k^z, \quad (6.1)$$

où les distributions des couplages et des champs sont données par :

$$\pi(J) = \begin{cases} 1 & \text{si } J \in [0, 1] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (6.2)$$

et

$$\rho(h) = \delta(h - h_0) \quad (6.3)$$

La valeur du champ critique  $h_c$  déduite de (5.25) est obtenue pour  $h_0 = e^{-1}$ . Les quantités calculées sont obtenues après avoir été moyennées sur les réalisations du désordre.

### 6.1 Aimantations de surface et de volume

#### 6.1.1 Aimantations sous champ critique

Nous considérons ici l'évolution des aimantations de surface et de volume pour des systèmes placés sous champ critique  $h_c$  et préparés dans les états  $|x\rangle$  et  $|z\rangle$  à  $t = 0$ .

La figure 6.1 montre l'évolution des aimantations transverses de surface  $m_z^z(1, t) \equiv \langle z | \sigma_1^z(t) | z \rangle$  et de volume  $m_z^z(L/2, t) \equiv \langle z | \sigma_{L/2}^z(t) | z \rangle$  calculées pour un état initial préparé dans l'état  $|z\rangle$ . Dans la limite des temps longs, les aimantations de surface et de volume tendent respectivement vers des constantes  $m_z^s$  et  $m_z^v$  indépendantes de la taille du système. La relaxation ne suit pas une loi exponentielle mais plutôt algébrique. Cette décroissance s'accompagne d'oscillations dont la période proche de  $2\pi$ , est liée aux propriétés de la distribution du désordre. Nous avons vérifié que ces oscillations persistaient pour une distribution exponentielle des couplages :  $\pi(J) = \alpha \exp(-\alpha J)$ . Avec cette nouvelle distribution, la période

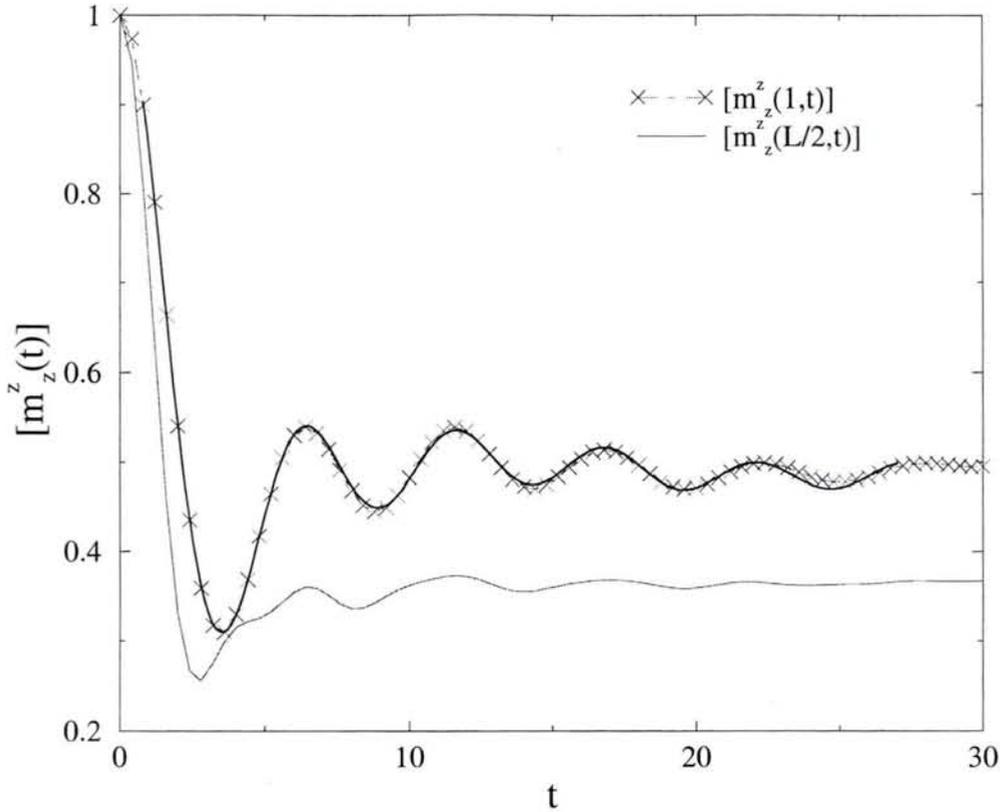


FIG. 6.1 – Aimantations critiques transverses dans la chaîne d’Ising désordonnée préparée dans l’état  $|z\rangle$ .

des oscillations varie linéairement avec le paramètre  $\alpha$ . Le temps microscopique  $\tau$  caractéristique de ces oscillations est donc inversement proportionnel au couplage moyen  $[J] = \alpha^{-1}$  du système.

Pour une distribution de couplage définie par (6.2), le comportement de l’aimantation de surface est très bien décrit par la fonction (voir fig. 6.1)

$$t^{-1.15}[\cos(1.2t - 1.46) - 0.43 \cos(0.3t - 1)] + 0.5$$

justifiant une relaxation algébrique. En raison de la divergence de notre fonction "test" lorsque  $t \rightarrow 0$ , nous n’avons pas pris en compte les valeurs de  $[m_z^z(1, t)]$  aux temps courts. Nous n’avons pas été en mesure de reproduire cette analyse sur l’aimantation de volume en raison de la faible amplitude des oscillations.

La figure 6.3 représente l’évolution des aimantations de surface  $m_x^z(1, t)$  et de volume  $m_x^z(L/2, t)$  pour un système préparé dans l’état  $|x\rangle$ . Comme précédemment, l’approche des aimantations vers leur valeur stationnaire  $m_x^s$  et  $m_x^v$  est algébrique. On remarque que les comportements de  $m_z^z(L/2, t)$  et  $m_x^z(L/2, t)$  sont similaires à ceux observés dans la chaîne homogène dans

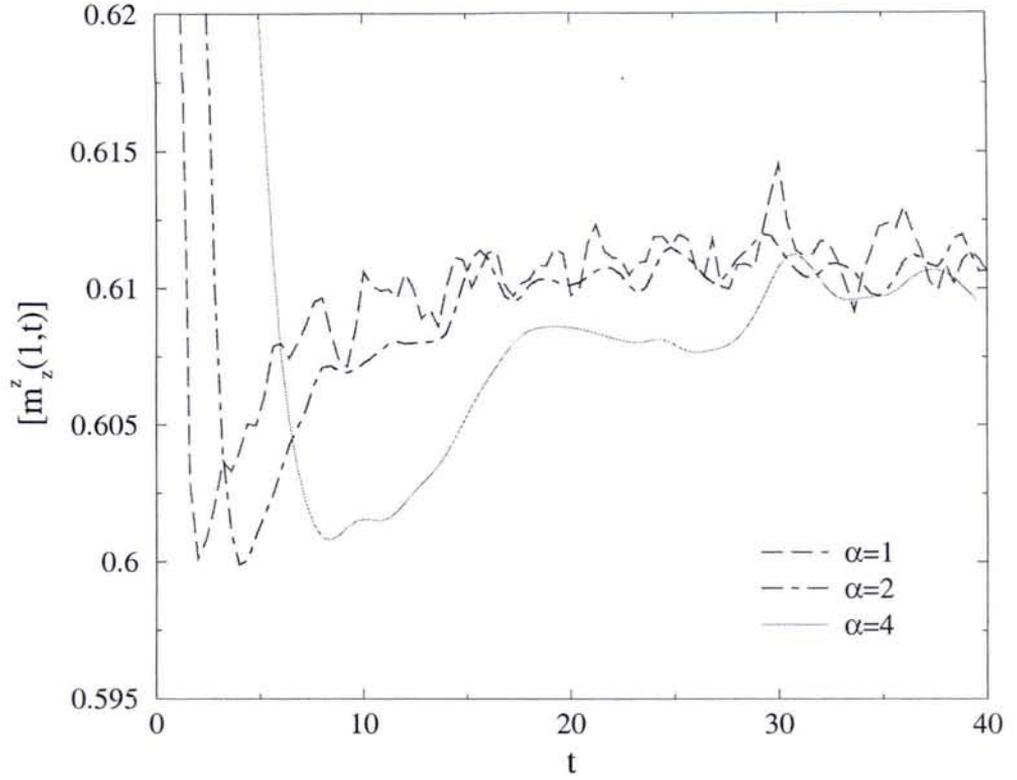


FIG. 6.2 – Aimantation transverse de surface dans la phase critique pour une distribution de couplage exponentielle  $\pi(J) = \alpha \exp(-\alpha J)$ . Le système est préparé dans l'état  $|z\rangle$  et les quantités ont été moyennées sur  $10^5$  réalisations.

laquelle [106, 126, 125] :

$$m_z^z(t) = \frac{1}{2} + \frac{J_1(4t)}{4t} \quad (6.4)$$

$$m_x^z(t) = \frac{1}{2} - \frac{J_1(4t)}{4t}, \quad (6.5)$$

où  $J_1$  est une fonction de Bessel de première espèce. Dans ce cas, la relaxation obéit à une loi algébrique en  $t^{-3/2}$ .

On remarque également que dans la chaîne homogène :  $m_z^z(t) + m_x^z(t) = 1$ . Ce résultat peut se démontrer par des arguments de dualité. Pour un système initialement préparé dans l'état  $|z\rangle$ , la densité d'énergie à  $t = 0$  est donnée par :

$$e(0) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L-1} \langle z | h_{i,i+1} | z \rangle \quad (6.6)$$

où  $h_{i,i+1}$  est le Hamiltonien local de la chaîne homogène défini par

$$h_{i,i+1} \equiv -\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - h \sigma_i^z.$$

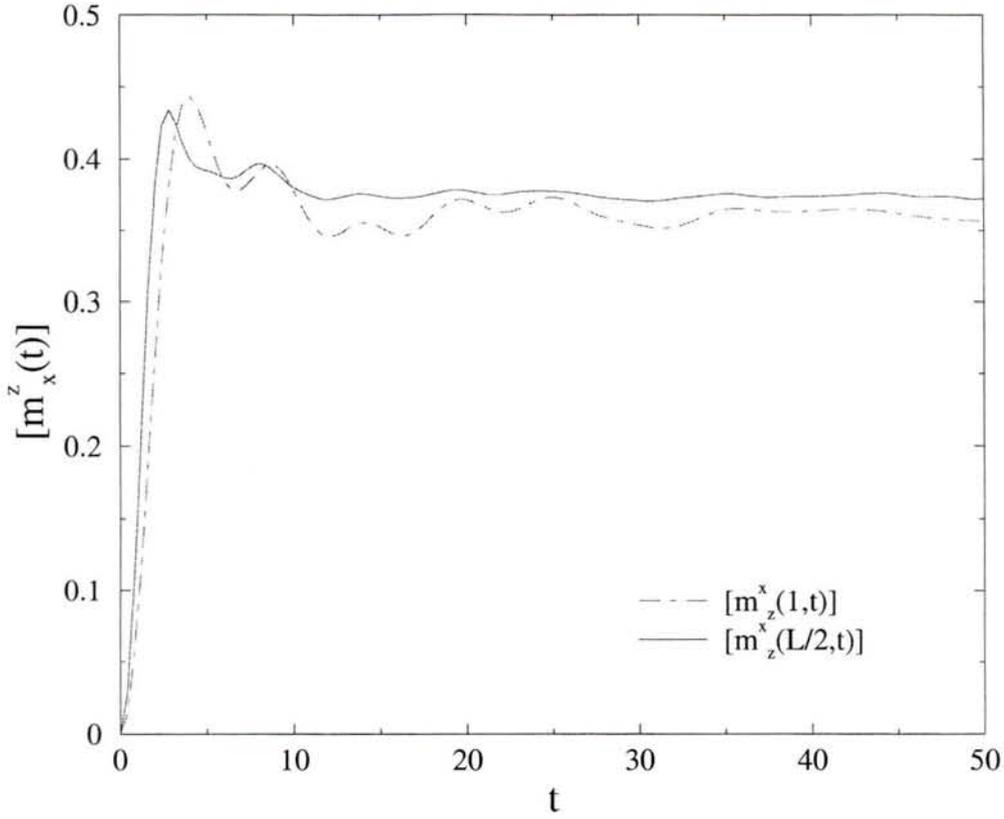


FIG. 6.3 – Aimantations transverses dans la chaîne d’Ising désordonnée sous champ critique. Le système est préparé dans l’état initial  $|x\rangle$ .

Le système étant invariant par translation  $h_{i,i+1} = h$  et la densité d’énergie initiale vaut :

$$e(0) = \langle z|h|z\rangle = -h\langle z|\sigma^z|z\rangle = -h. \quad (6.7)$$

Comme l’énergie du système est conservée, on a pour tout  $t$  :

$$\begin{aligned} e(t) &= \langle z|h(t)|z\rangle = -\langle z|\sigma_i^x(t)\sigma_{i+1}^x(t)|z\rangle - h\langle z|\sigma_i^z(t)|z\rangle \\ &= -h. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Ainsi au point critique ( $h = 1$ ), les deux contributions du Hamiltonien local vérifient :

$$\langle z|\sigma_i^x(t)\sigma_{i+1}^x(t)|z\rangle + \langle z|\sigma_i^z(t)|z\rangle = 1. \quad (6.9)$$

De plus, comme la chaîne homogène est autoduale au point critique, alors :

$$\langle z|\sigma_i^x(t)\sigma_{i+1}^x(t)|z\rangle = \langle x|\sigma_i^z(t)|x\rangle, \quad (6.10)$$

nous en déduisons donc que<sup>1</sup>  $m_x^z(t) + m_z^z(t) = 1$ .

<sup>1</sup>Le fait que  $\lim_{t \rightarrow \infty} m_{x,z}^z(t) = 1/2$ , implique que pour un système préparé dans l’état  $|z\rangle$ , l’énergie est équitablement répartie sur les sites et sur les liaisons dans la limite asymptotique.

### 6.1.2 Valeurs asymptotiques des aimantations transverses

Nous avons calculé la valeur asymptotique de l'aimantation pour différentes amplitudes de champ magnétique  $h_0$ . Les résultats ont été obtenus sur des systèmes de taille croissante préparés initialement dans l'état  $|x\rangle$  ou  $|z\rangle$ . La figure 6.4 donne les valeurs de l'aimantation transverse en fonction de l'écart au point critique  $h_0/h_c$  pour des systèmes de taille  $L = 20, 30, 40$  et  $50$ . Nous avons également représenté la dépendance en champ de l'aimantation dans la chaîne d'Ising homogène extraite de la référence [106] :

$$m = \frac{1 - h^2 - 2\epsilon(h - 1)}{2(1_h)}, \quad \text{pour } h \equiv \frac{h_0}{h_c} \leq 1 \quad (6.11)$$

$$m = -\frac{1 + h + 2\epsilon(2h - 1)}{2h^2}, \quad \text{pour } h \geq 1 \quad (6.12)$$

où la densité d'énergie  $\epsilon$  de l'état initial est donnée par  $\epsilon = -2(m_0^x)^2 - hm_0^z$ . Nos résultats ne semblent pas être sensibles aux effets de taille finie comme le prouve la superposition des courbes correspondant aux différentes tailles. Contrairement au cas homogène, l'aimantation ne présente aucune singularité au voisinage du point critique dans l'hypothèse où les effets de taille finie sont négligés.

## 6.2 Fonctions de corrélation des spins de surface

### 6.2.1 Fonctions de corrélation sous champ critique

Nous nous intéressons à présent à l'évolution des fonctions de corrélation connexes entre les spins situés aux extrémités de la chaîne sous champ critique :

$$C_L^x(t) = \langle x | \sigma_1^x(t) \sigma_L^x(t) | x \rangle - \langle x | \sigma_1^x(t) | x \rangle \langle x | \sigma_L^x(t) | x \rangle \quad (6.13)$$

et, d'après (5.86) :

$$[C_L^z(t)] \equiv [\langle z | \sigma_1^x(t) \sigma_L^x(t) | z \rangle]. \quad (6.14)$$

L'analyse aux temps courts des fonctions de corrélation montre que celles-ci restent nulles jusqu'à un seuil  $\tau$  dépendant de  $L$  et de la préparation initiale. Les excitations se propageant à une vitesse finie, les corrélations entre les spins de surface demeurent nulles en moyenne tant que le signal n'a pas joint les deux extrémités ( $t < \tau(L)$ ). Comme la vitesse  $v$  de ces excitations est indépendante de la taille du système, la valeur<sup>2</sup> du seuil  $\tau^{x,z}(L)$  est proportionnelle à  $L$ . Nous remarquons sur la figure 6.5 que  $\tau^x \approx 2\tau^z \approx L$ . La propagation des excitations, générées par le retournement des spins sous l'effet de l'opérateur  $\sigma^z$ , étant favorisée avec un état initial  $|z\rangle$ , il est normal de trouver  $\tau^z < \tau^x$ .

Pour  $t \geq \tau^{x,z}$ , les corrélations  $[C_L^{x,z}(t)]$  augmentent jusqu'à atteindre une valeur constante  $[C_L^{x,z}(\infty)]$  pour de très longs temps d'observation (figure 6.6). L'étude de systèmes de différentes tailles montre que la valeur asymptotique  $[C_L^{x,z}(\infty)]$  est fonction de  $L$ .

<sup>2</sup>Il a été montré dans la réf. [126] que la valeur de  $\tau$  est indépendante de  $h$  pour  $h \geq 1$  alors que  $\tau$  augmente quand  $h$  diminue pour  $h < 1$

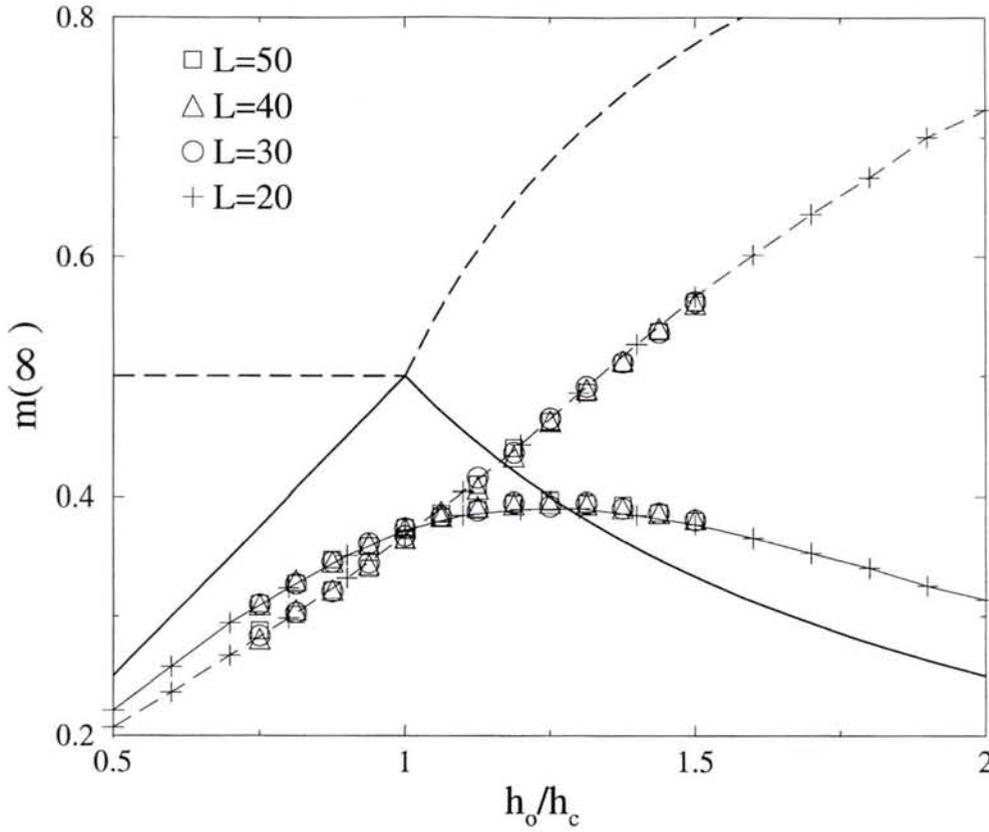


FIG. 6.4 – Valeurs asymptotiques de l'aimantation transverse en fonction de  $h_0/h_c$ . Les courbes garnies de symboles se réfèrent aux systèmes désordonnés préparés dans les états  $|x\rangle$  (ligne continue) et  $|z\rangle$  (tirets). Les lignes épaisses dépourvues de symbole représentent la valeur de l'aimantation dans la chaîne d'Ising homogène. La ligne continue (discontinue) est associée à un système préparé dans l'état  $|x\rangle$  ( $|z\rangle$ ).

### 6.2.2 Valeurs asymptotiques

Le calcul des valeurs asymptotiques  $C_L^x(\infty)$  pour des systèmes de différentes tailles  $L$  montre au point critique que  $C_L^x(\infty) \sim 1/L$ . Ce comportement peut être expliqué en explicitant la forme (5.93) et en utilisant (5.67) :

$$\begin{aligned}
 C_L^x(t) &= \sum_{q,q'} \phi_q(1)\phi_{q'}(1)\psi_q(L)\psi_{q'}(L) \sin(\epsilon_q t) \sin(\epsilon_{q'} t) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_q D_{qq} \{1 - \cos(2\epsilon_q t)\} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{q,q'>q} D_{qq'} \{\cos[(\epsilon_{q'} - \epsilon_q)t] - \cos[(\epsilon_{q'} + \epsilon_q)t]\} \quad (6.15)
 \end{aligned}$$

$$= G(L) + F(L, t), \quad (6.16)$$

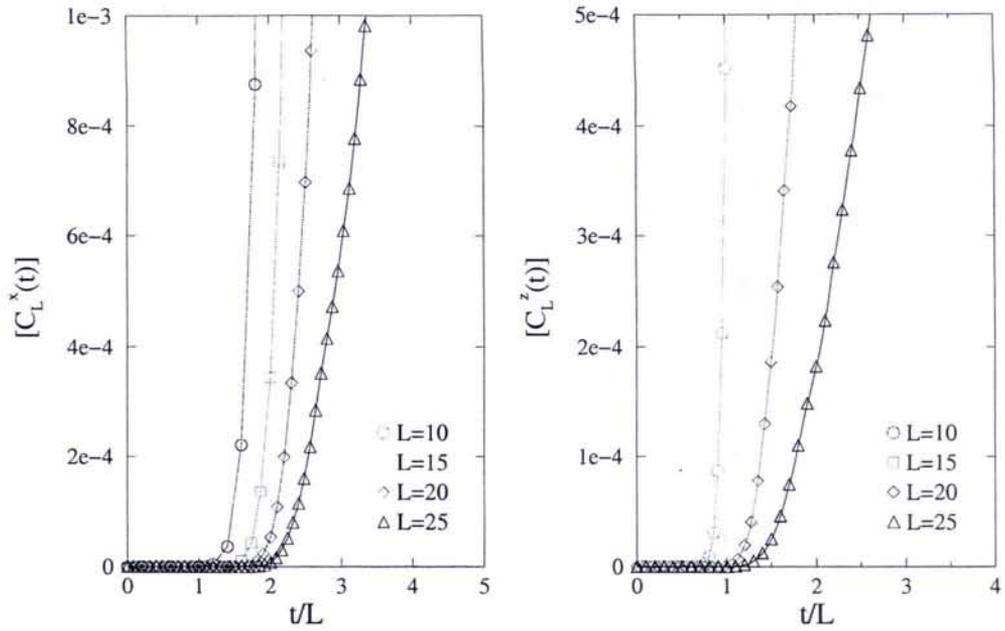


FIG. 6.5 – Evolution aux temps courts des fonctions de corrélation bord à bord  $[C_L^{x,z}(t)]$  pour différentes tailles de systèmes.

avec

$$D_{qq'} = \phi_q(1)\phi_{q'}(1)\psi_q(L)\psi_{q'}(L) . \quad (6.17)$$

Dans la limite des temps longs, les phases deviennent aléatoires ( $F(L, t \gg 1) \rightarrow 0$ ) et seule subsiste la moyenne :

$$[\tilde{C}_L^x(t)] \simeq [G(L)] \equiv \frac{1}{2} \sum_q [\phi_q^2(1)\psi_q^2(L)] , \quad t \gg 1 . \quad (6.18)$$

En fait, c'est le bas du spectre, donc la plus petite excitation, qui fixe le temps caractéristique de relaxation  $\tau_r$  pour lequel, lorsque  $t > \tau_r$  le corrélateur atteint une valeur stationnaire. Au point critique, les excitations  $\epsilon_q$  se comportent comme  $\epsilon_q \sim \exp(-aL^{1/2})$  dans le bas du spectre [110, 116] et le temps de relaxation caractéristique est  $\tau_r \sim \exp(aL^{1/2})$ . De plus, la somme (6.18) est dominée par le terme associé au mode  $q = 1$  localisé aux extrémités de la chaîne :

$$[G(L)] \propto [\phi_1^2(1)\psi_1^2(L)] , \quad (6.19)$$

où  $\phi_1(1)$  et  $\psi_1(L)$  représentent les aimantations de surface à l'équilibre dans la direction  $x$  [134, 135] pour  $\epsilon_1 \rightarrow 0$ . Ces aimantations sont données par :

$$\langle \sigma_1^x \rangle = \phi_1(1) = \left( 1 + \sum_{i=1}^{L-1} \prod_{j=1}^i \lambda_j \right)^{-1/2} \quad (6.20)$$

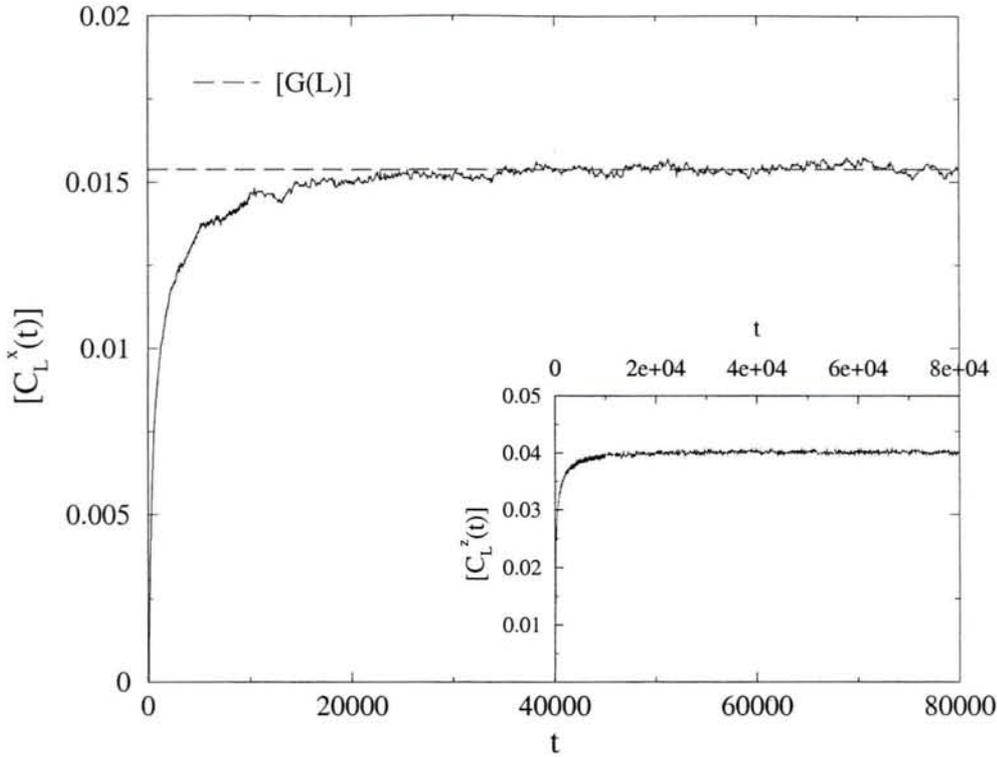


FIG. 6.6 – Relaxation des fonctions de corrélation moyennes  $[C_L^x(t)]$  des spins de surface dans une chaîne de taille  $L = 20$ . Le système, préparé dans l'état  $|x\rangle$ , est placé sous champ critique ( $\delta = 0$ ). L'insert montre la fonction de corrélation  $[C_L^z(t)]$  calculée sur ce même système préparé dans l'état  $|z\rangle$ . L'équation de la droite (en traits interrompus) est donnée par (6.18). Les calculs ont requis 50000 échantillons

et

$$\langle \sigma_L^x \rangle = \psi_1(L) = \left( 1 + \sum_{i=1}^{L-1} \prod_{j=1}^i \lambda_{L-j} \right)^{-1/2}, \quad (6.21)$$

où  $\lambda_j = (h_j/J_j)^2$ . Au point critique, les fluctuations des couplages  $\lambda_j$  sont déterminées grâce au théorème de la limite centrale :

$$\sum_{i=1}^{L-1} \prod_{j=1}^i \lambda_j = \sum_{i=1}^{L-1} \exp \left[ \sum_{j=1}^i \ln \lambda_j \right] \sim \exp(cL^{1/2}), \quad c > 0. \quad (6.22)$$

De ce fait, la contribution d'un échantillon au calcul de la moyenne  $[G(L)]$  est proportionnelle à  $\exp(-cL^{1/2})$ . La moyenne  $[G(L)]$  fait apparaître l'aimantation de surface  $\phi_1(1)$  qui d'après (6.20), vérifie :

$$[\phi_1(1)]^{-2} = 1 + \lambda_1 + \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 + \dots + \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \dots \lambda_{L-1}, \quad (6.23)$$

où les  $\lambda_j$  sont des variables aléatoires appartenant à l'intervalle  $[h_0^2, \infty[$ . Ainsi, l'aimantation de surface  $\phi_1(1)$  est non nulle si chaque terme de la somme (6.23) reste fini. Autrement dit, chaque terme de (6.23) doit comporter au moins autant de couplages *forts* ( $\lambda_j \ll 1$ ) que de couplages *faibles* ( $\lambda_j \gg 1$ ). La probabilité  $P_s^{(1)}(L)$  pour qu'un échantillon caractérisé par ses couplages  $\{\lambda_j\}$  vérifie cette condition peut être interprétée en terme de marche aléatoire [116, 136, 118]. Si chaque couplage fort (faible) est associé à un déplacement vers le haut (bas), alors les échantillons contribuant à  $\phi_1(1) \neq 0$  sont décrits par une marche aléatoire n'explorant que des ordonnées positives ou nulles (voir figure 6.7). De la même manière,

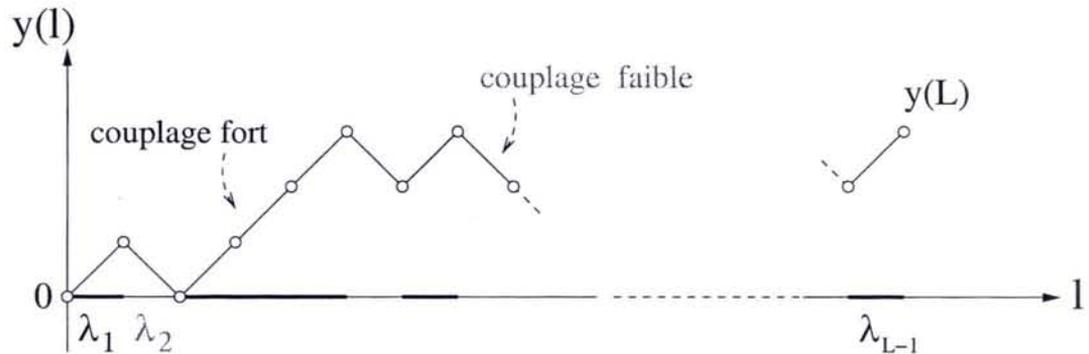


FIG. 6.7 – Marche aléatoire unidimensionnelle de  $L - 1$  pas contribuant à l'aimantation  $\phi(1)$ .

l'aimantation de surface  $\psi_1(L)$  est non nulle si le marcheur partant de l'ordonnée  $y_L$ , rejoint  $y_0$  sans jamais dépasser son ordonnée de départ. Les couplages des échantillons décrivent donc une marche aléatoire de  $L$  pas entre deux murs absorbants d'ordonnée respective  $y = -1$  et  $y = y_L + 1$ . La probabilité  $P_s(L)$  pour qu'un échantillon contribue à  $[G(L)] \neq 0$  est liée à la probabilité de survie du marcheur après  $L$  pas, voir figure 6.8. On montre que dans le

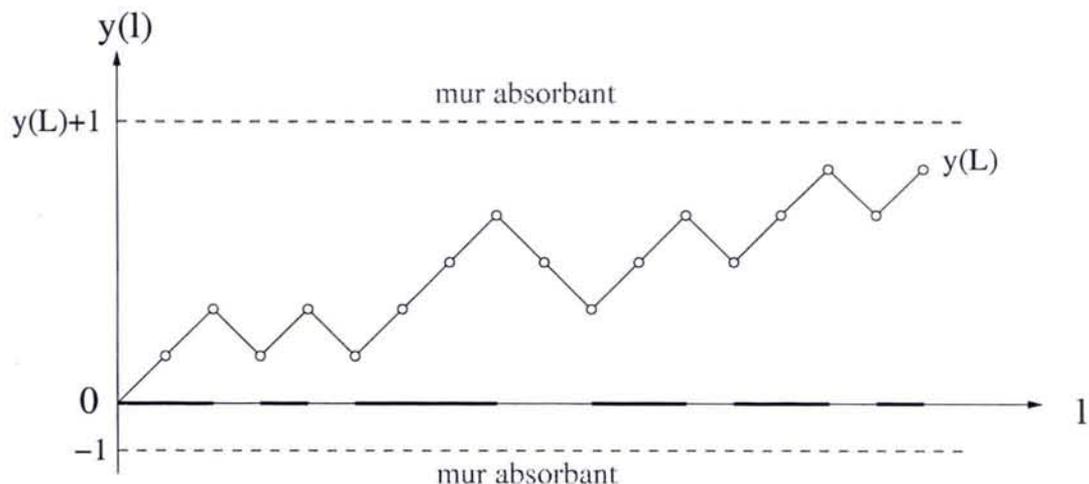


FIG. 6.8 – Marche aléatoire entre deux murs absorbants contribuant à  $G(L)$ .

cas d'une marche isotrope, correspondant au cas critique  $\delta = 0$ , la probabilité de survie d'un marcheur accomplissant  $L$  pas entre  $y_0 = 1$  et  $y_L = r - 1$  sans toucher les murs distants de  $r$  est :

$$P_s(L, r - 1) = \frac{1}{r + 1} \sum_{m=-r}^r (-1)^{m+1} \cos^L \left( \frac{\pi m}{r + 1} \right) \sin^2 \left( \frac{\pi m}{r + 1} \right). \quad (6.24)$$

La fonction  $[G(L)]$  est alors donnée par :

$$[G(L)] \sim \sum_{r=1}^{L-1} P_s(L, r). \quad (6.25)$$

L'analyse de la somme de probabilités (6.25) dans la limite continue aboutit à  $[G(L)] \sim 1/L$ . Dans le cas où  $\delta > 0$ , la marche n'est plus isotrope et le marcheur est attiré vers le mur absorbant. Les rares contributions à  $[G(L)]$  proviennent des fluctuations maintenant le marcheur à l'écart des murs. D'après la réf. [116], la probabilité correspondante se comporte comme  $P_s^{\delta > 0}(L) \sim L^{-3/2} \exp(-aL^{1/2})$ . Dans la phase ferromagnétique ( $\delta < 0$ ), le marcheur a tendance à s'éloigner du mur absorbant. De ce fait, pour  $L$  suffisamment grand, les fluctuations ne sont plus assez importantes pour que le marcheur atteigne un des murs. La probabilité de survie du marcheur ne dépend alors plus de  $L$  et tend vers une constante.

La figure 6.9 montre la dépendance de  $[G(L)]$  avec la taille du système dans les trois situations évoquées ( $\delta = 0, > 0$  et  $< 0$ ). L'évolution des valeurs de  $[G(L)]$  calculées avec (6.18) corroborent les prédictions de la marche aléatoire. Pour  $h_0 = h_c$  ( $\delta = 0$ ),  $[G(L)]$  évolue proportionnellement à  $1/L$ . Dans la phase paramagnétique ( $h_0 > h_c$ ), l'insert de la figure 6.9 confirme que  $[G(L)] \sim L^{-3/2} \exp(-aL^{1/2})$ . Enfin, pour  $h_0 < h_c$ , la valeur asymptotique des corrélations  $C_L^x$  tend vers une constante indépendante de  $L$ .

### 6.3 Conclusion

Nous avons étudié numériquement la relaxation de l'aimantation et des fonctions de corrélation bord à bord dans la chaîne d'Ising désordonnée.

A partir de systèmes préparés dans les états  $|x\rangle$  et  $|z\rangle$ , nous avons observé une relaxation algébrique des aimantations transverses accompagnée d'oscillations dont la période est directement liée à la distribution des couplages. Ces oscillations rendent difficile l'extraction de l'exposant associé à la relaxation. Néanmoins il semble que l'aimantation transverse se comporte en  $\propto t^{-1.15}$ . Dans la chaîne homogène, l'aimantation transverse relaxe plus rapidement avec un exposant universel valant  $3/2$  quelque soit  $0 < h < \infty$  [106, 126]. L'étude des valeurs asymptotiques  $[m_{\Psi_0}^z(h_0)]$  montre que lorsque  $|\Psi_0\rangle = |z\rangle$  l'aimantation est une fonction croissante du champ transverse. L'allure de la fonction  $[m_x^z(h_0)]$  est comparable à celle observée dans le cas homogène (voir figure 6.4). Cependant, dans ce dernier cas la singularité de l'aimantation au point critique ne semble pas reproduite dans la chaîne désordonnée. Nous avons calculé la valeur stationnaire de l'aimantation  $[m_x^z(h_0)]$  pour des systèmes de différentes tailles au voisinage du point critique, la superposition des résultats ne montre aucune évolution avec la taille de la chaîne et aucune singularité de l'aimantation. Pour des

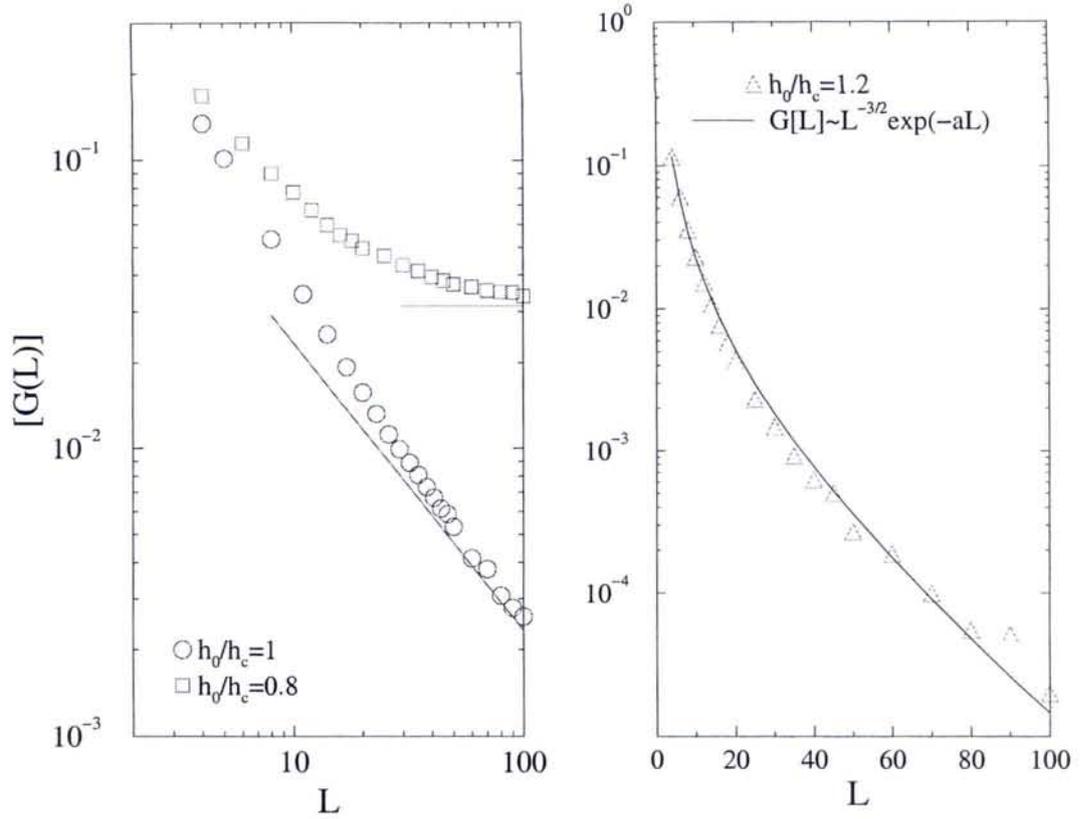


FIG. 6.9 – Dépendance des valeurs asymptotiques  $[G(L)]$  avec la taille  $L$  du système. Sur le graphe de gauche, les symboles se réfèrent au calcul de  $[G(L)]$  pour  $\delta < 0$  et  $\delta = 0$ , les lignes donnent les résultats analytiques. Le graphe de droite concerne le cas  $\delta > 0$  où les prédictions donnent  $[G(L)] \sim L^{-3/2} \exp(-aL)$  (ligne continue).

raisons de dualité, au point critique, la chaîne homogène satisfait l'égalité  $m_x^z = m_z^z$  [106]. Nous observons la même chose dans la chaîne désordonnée :  $[m_x^z(h_c)] = [m_z^z(h_c)]$ .

Les résultats de l'étude dynamique des fonctions de corrélation  $\langle \sigma_1^x(t) \sigma_L^x(t) \rangle$ , liées au développement des corrélations spatiales, sont plus instructifs. Pour des temps inférieurs à un seuil  $\tau$  déterminé par la taille  $L$  du système et son état initial, les corrélations restent nulles en raison de la vitesse finie des excitations. L'étude de ces corrélations dans la chaîne homogène par Iglói et Rieger [126] a relevé un comportement similaire dicté par les interférences quantiques. Ils ont observé que les corrélations  $C_L^x(t)$  restaient nulles en dessous d'un seuil  $\tau_L$ . Puis pour  $t \geq \tau_L$ , les corrélations augmentent très rapidement pour atteindre leur valeur maximale  $C_{max}^x(\tau_L)$  avant de décroître jusqu'à  $t = 3\tau_L$  où elles augmentent de nouveau pour atteindre un autre maxima  $C_{max}^x(3\tau_L)$ , et ainsi de suite pour  $t = 5\tau_L$ , etc... La dépendance de  $C_L^x(t)$  avec  $L$  à  $t$  fixé a révélé une décroissance proportionnelle à  $L^{-a}$ . Pour  $h = 1 (> 1)$ , il a été trouvé  $C_{max}^x(\tau_L) \sim L^{-2/3} (\sim L^{-1})$  alors que  $C_L^x(t \neq \tau_L) \sim L^{-1}$  pour  $h \geq 1$ . Dans le cas de la chaîne avec des couplages aléatoires, dès que les extrémités de

celle-ci sont *connectées*, c'est-à-dire pour  $t \geq \tau$ , les corrélations ne présentent pas de maxima mais augmentent continûment jusqu'à atteindre une valeur stationnaire dépendant de  $h_0$  et de  $L$ . Cette différence s'explique par le fait que les interférences quantiques sont effacées par la présence du désordre des couplages magnétiques.

La valeur asymptotique des corrélations  $C_L^x(t)$  a pu être reliée au produit des aimantations de surface. Pour un champ critique, les contributions non nulles de ces aimantations proviennent de rares échantillons caractérisés par des domaines fortement corrélés ( $\lambda_j \ll 1$ ). La densité de probabilité  $P_s(L)$  de ces échantillons a été déterminée grâce à une interprétation en terme de marche aléatoire, où nous avons trouvé  $P_s(L) \sim 1/L$ . Chaque échantillon donnant une contribution d'ordre un au corrélateur  $C_L^x(\infty)$ , nous en avons déduit que  $[C_L^x(\infty)] \sim 1/L$ , cette dépendance étant retrouvée dans la chaîne homogène où [126]  $C_L^x(t) \sim 1/L$  à  $t \neq \tau_L$  fixé. Pour un échantillon ferromagnétique ( $\delta < 0$ ), la marche aléatoire associée s'écarte des bords absorbants si bien que la taille du système n'intervient plus dans la probabilité de survie du marcheur. Dans ce cas, la valeur asymptotique des corrélations tend vers une constante indépendante de  $L$  pour  $L$  suffisamment grand. Lorsque  $h_0 > h_c$ , le marcheur est attiré vers les murs,  $C_L^x(\infty)$  diminue donc logiquement avec  $L$  en suivant une décroissance exponentielle proportionnelle à  $\exp(-aL^{1/2})$  alors que cette décroissance est algébrique dans la chaîne homogène avec un exposant  $a = 1$ .

Les résultats de Iglói et Rieger [126] montrent que la dépendance des corrélations bord à bord avec la taille du système est algébrique. Dans le cas de la chaîne désordonnée, nous ne retrouvons cette dépendance algébrique que pour  $h_0 = h_c$ . Si dans la chaîne homogène, le comportement asymptotique des corrélations est dicté par les fluctuations quantiques, il est exclusivement dû à la distribution statistique des couplages dans la chaîne désordonnée. Ceci explique les différents comportements qualitatifs de  $[C_L^x(\infty)]$  en fonction des couplages  $\lambda_i$ .

## Annexe A

# Fonctions de corrélation dans l'approximation des ondes de spin

Nous détaillons ici le calcul des fonctions de corrélation dans le modèle XY 2D lors d'une trempe dans sa phase critique à partir d'un état initial thermalisé à  $T_i \leq T_{KT}$ . La dynamique, non conservative et dissipative, est régie par une équation de Langevin décrivant la relaxation du paramètre d'ordre  $\vec{\phi}$  réévalué à une échelle hydrodynamique :

$$\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta \vec{\phi}} + \vec{\zeta}(\mathbf{x}, t) . \quad (\text{A.1})$$

Ici,  $\vec{\phi}(\mathbf{x}, t)$  est un vecteur à deux composantes dont la fonctionnelle en énergie

$$H[\vec{\phi}] = \int d^2\mathbf{x} \left[ \frac{1}{2} (\nabla \vec{\phi})^2 + V(\vec{\phi}) \right] , \quad (\text{A.2})$$

a un potentiel  $V(\vec{\phi})$  minimal pour  $|\vec{\phi}| = 1$  de sorte que  $V(\vec{\phi}) = V_0(\vec{\phi}^2 - 1)^2$ . Le bruit thermique  $\vec{\zeta} = (\zeta_1, \zeta_2)$  suit une distribution gaussienne dont les deux moments sont caractérisés par :

$$\langle \zeta_i(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \zeta_i(\mathbf{x}, t) \zeta_j(\mathbf{x}', t') \rangle = 2T\delta^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t')\delta_{ij} . \quad (\text{A.3})$$

Le champ  $\vec{\phi}$  peut se réécrire en fonction d'un paramètre angulaire :  $\vec{\phi} = \exp(i\theta)$  et dans la limite des basses températures, l'énergie devient :

$$H = \frac{\rho_s}{2} \int d^2\mathbf{x} (\nabla \theta)^2 , \quad (\text{A.4})$$

avec  $\rho_s(T) = T/2\pi\eta(T)$ . A présent nous pouvons réécrire l'équation de mouvement du modèle A (A.1) dans l'espace de Fourier dans l'approximation des ondes de spins :

$$\dot{\theta}_{\mathbf{k}} = -\rho_s(T)k^2\theta_{\mathbf{k}} + \zeta_{\mathbf{k}} , \quad (\text{A.5})$$

où  $\zeta_{\mathbf{k}}$  est la composante du bruit localement perpendiculaire à  $\vec{\phi}$  vérifiant :

$$\langle \zeta_{\mathbf{k}}(t) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \zeta_{\mathbf{k}}(t) \zeta_{\mathbf{k}'}(t') \rangle = 2T\delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}\delta(t - t') . \quad (\text{A.6})$$

L'approximation de basse température néglige l'influence des vortex, on peut légitimement omettre la périodicité sur  $[0, 2\pi]$  de la variable  $\theta$  qui, après avoir été réévaluée à une échelle mésoscopique, peut être assimilée à une variable continue sur  $[-\infty, \infty[$ . La résolution de l'équation (A.5) conduit à :

$$\theta_{\mathbf{k}}(t) = \theta_{\mathbf{k}}(0)e^{-k^2 t} + \int_0^t d\bar{t} e^{-k^2(t-\bar{t})} \zeta_{\mathbf{k}}(\bar{t}), \quad (\text{A.7})$$

où  $t$  est le temps d'observation. Connaissant le comportement de  $\theta_{\mathbf{k}}(t)$ , nous voulons maintenant calculer

$$C(t, t_w) \equiv \langle \cos[\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w)] \rangle = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \langle (\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w))^{2n} \rangle, \quad (\text{A.8})$$

où la fonction d'autocorrélation a été développée en puissance de  $\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w)$ . Le caractère gaussien des fluctuations de phase permet de relier les moments de  $\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w)$  avec leur écart-type [84] :

$$\langle (\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w))^{2n} \rangle = (2n-1)!! \langle (\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w))^2 \rangle^n. \quad (\text{A.9})$$

Et comme  $(2n-1)!!/(2n)! = 1/(n!2^n)$ , la fonction d'autocorrélation s'exprime uniquement en terme du second moment  $\langle (\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w))^2 \rangle$ , soit :

$$C(t, t_w) = \exp\left\{-\frac{1}{2}B(t, t_w)\right\}, \quad (\text{A.10})$$

avec

$$\begin{aligned} B(t, t_w) &= \langle [\theta(\mathbf{x}, t) - \theta(\mathbf{x}, t_w)]^2 \rangle \\ &= \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} [\langle \theta_{\mathbf{k}}(t)\theta_{-\mathbf{k}}(t) \rangle + \langle \theta_{\mathbf{k}}(t_w)\theta_{-\mathbf{k}}(t_w) \rangle - 2\langle \theta_{\mathbf{k}}(t)\theta_{-\mathbf{k}}(t_w) \rangle]. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Les trois termes de l'intégrale (A.11) se calculent grâce à (A.7) puisque :

$$\langle \theta_{\mathbf{k}}(t_1)\theta_{-\mathbf{k}}(t_2) \rangle = \langle \theta_{\mathbf{k}}(0)\theta_{-\mathbf{k}}(0) \rangle e^{-k^2(t_1-t_2)} + \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} d\bar{t}_1 d\bar{t}_2 e^{-k^2(t_1-\bar{t}_1)} e^{-k^2(t_2-\bar{t}_2)} \langle \zeta_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1)\zeta_{-\mathbf{k}}(\bar{t}_2) \rangle. \quad (\text{A.12})$$

Par ailleurs, nous faisons l'hypothèse que la densité de probabilité des phases à  $t = 0$  suit une distribution gaussienne, soit :

$$P[\{\theta_{\mathbf{k}}(0)\}] \approx \exp\left[-\sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{4\pi\eta_i} \theta_{\mathbf{k}}(0)\theta_{-\mathbf{k}}(0)\right], \quad (\text{A.13})$$

où  $\eta_i$  est l'exposant critique initial des corrélations. Cette hypothèse permet de calculer les corrélations initiales des phases<sup>1</sup> et donc le premier terme de (A.12) :

$$\langle \theta_{\mathbf{k}}(0)\theta_{-\mathbf{k}}(0) \rangle e^{-k^2(t_1+t_2)} = \frac{2\pi}{k^2} \eta_i e^{-k^2(t_1+t_2)}. \quad (\text{A.14})$$

<sup>1</sup>La relation (A.14) est également valable lorsque le système est initialement ordonné puisque dans ce cas  $\langle \theta_{\mathbf{k}}(0)\theta_{-\mathbf{k}}(0) \rangle = 0$  et  $\eta_i \equiv \eta(T=0) = 0$ .

Le calcul de la double intégrale ne pose aucun problème et aboutit à

$$\int_0^{t_1} \int_0^{t_2} d\bar{t}_1 d\bar{t}_2 e^{-k^2(t_1-\bar{t}_1)} e^{-k^2(t_2-\bar{t}_2)} \langle \zeta_{\mathbf{k}}(\bar{t}_1) \zeta_{-\mathbf{k}}(\bar{t}_2) \rangle = \frac{2\pi}{k^2} \eta_f \left( e^{-k^2(t_1-t_2)} - e^{-k^2(t_1+t_2)} \right), \quad (\text{A.15})$$

où  $\eta_f = T/(2\pi\rho_s(T))$ . En affectant à  $t_1$  et  $t_2$  les variables de temps appropriés, nous pouvons évaluer  $B(t, t_w)$  :

$$B(t, t_w) = \int \frac{d^2\mathbf{k}}{2\pi k^2} \left[ (\eta_i - \eta_f) \left( e^{-2k^2 t} + e^{-2k^2 t_w} - 2e^{-2k^2(t+t_w)} \right) + \eta_f e^{-k^2(t-t_w)} \right]. \quad (\text{A.16})$$

La divergence ultra-violet de l'intégrale est réglée en multipliant chaque intégrant par un facteur  $\exp(-a_0^2 k^2)$  dans lequel  $a_0$  matérialise le pas du réseau. Le résultat conduit à :

$$B(t, t_w) = \eta_f \ln \left( \frac{t - t_w + a_0^2}{a_0^2} \right) + (\eta_i - \eta_f) \ln \left( \frac{t + t_w + a_0^2}{\sqrt{(2t + a_0^2)(2t_w + a_0^2)}} \right) \quad (\text{A.17})$$

qui, dans la limite  $t \gg t_w \gg a_0^2$  donne le résultat attendu pour les fonctions d'autocorrélation :

$$C(t, t_w) = \frac{1}{(t - t_w)^{\eta_f/2}} \left[ \frac{(t/t_w + 1)^2}{4t/t_w} \right]^{(\eta_f - \eta_i)/4} \quad (\text{A.18})$$



## Annexe B

### Réponse angulaire et fonction de réponse

Cette annexe vise à montrer, grâce au formalisme MSR, que la fonction de réponse  $R(t, t_w)$  est liée à la réponse angulaire  $R_\theta(t, t_w) = \delta\langle\theta(t)\rangle/\delta h(t_w)$  par l'intermédiaire de la fonction de corrélation, soit :

$$R(t, t_w) = R_\theta(t, t_w)C(t, t_w) . \quad (\text{B.1})$$

Le formalisme MSR est un puissant outil de traitement de systèmes classiques en interaction avec un environnement classique. Nous n'aborderons pas les fondements ainsi que les multiples domaines d'application de cette théorie, pour les détails voir les références [32, 45]. Ce qu'il faut retenir de la théorie MSR appliquée au modèle XY est que la moyenne  $\langle\phi(t)\rangle$  du paramètre d'ordre se calcule à partir d'une intégrale fonctionnelle :

$$\langle\phi(t, \mathbf{r})\rangle = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\tilde{\phi} \phi(t, \mathbf{r}) \exp\left(-S_{eff}[\phi, \tilde{\phi}, \mathbf{h}]\right) , \quad (\text{B.2})$$

où  $S_{eff}[\phi, \tilde{\phi}, \mathbf{h}]$  est une action effective constituée ici par la somme de deux termes :

$$S[\phi, \tilde{\phi}, \mathbf{h}] = \int dt d\mathbf{r} \tilde{\phi} \left[ \frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{\delta H}{\delta\phi} \right] , \quad (\text{B.3})$$

et

$$s[\phi, \tilde{\phi}] = -\frac{1}{2} \int dt d\mathbf{r} dt' d\mathbf{r}' \langle\zeta(t, \mathbf{r})\zeta(t', \mathbf{r}')\rangle \tilde{\phi}(t, \mathbf{r})\tilde{\phi}(t', \mathbf{r}') - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \tilde{\phi}(0, \mathbf{r}) a(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tilde{\phi}(0, \mathbf{r}') . \quad (\text{B.4})$$

Le champ  $\tilde{\phi}$  est appelé champ de réponse du fait de la relation :

$$\frac{\delta\langle\phi(t, \mathbf{r})\rangle}{\delta h(t', \mathbf{r}')} = \langle\phi(t, \mathbf{r})\tilde{\phi}(t', \mathbf{r}')\rangle . \quad (\text{B.5})$$

et la fonction  $a(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  de (B.4) décrit les corrélations spatiales initiales qui, dans l'approximation des ondes de spin, sont données par leur transformée de Fourier :

$$\hat{a}(k) = \frac{2\pi\eta(T_i)}{k^2} = \frac{T_i}{k^2} . \quad (\text{B.6})$$

Le bruit thermique  $\zeta(t, \mathbf{r})$  est un bruit blanc dont les deux premiers moments sont donnés par

$$\langle \zeta(t, \mathbf{r}) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \zeta(t, \mathbf{r}) \zeta(t', \mathbf{r}') \rangle = 2T \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta(t - t'). \quad (\text{B.7})$$

L'action (B.4) décrivant les fluctuations thermiques et initiales s'écrit alors sous la forme :

$$s[\phi, \tilde{\phi}] = - \int dt d\mathbf{r} dt' d\mathbf{r}' \tilde{\phi}(t, \mathbf{r}) \kappa(t, t'; \mathbf{r} - \mathbf{r}') \tilde{\phi}(t', \mathbf{r}'), \quad (\text{B.8})$$

où

$$\kappa(t, t'; \mathbf{r} - \mathbf{r}') = T \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{1}{2} \delta(t) \delta(t') a(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{B.9})$$

Dans notre cas le paramètre d'ordre est la variable angulaire  $\theta$  mais nous conservons la notation  $\phi$  plus habituelle à la théorie des champs.

Nous commençons d'abord par expliciter l'action (B.3) en définissant le hamiltonien  $H$  sous champ :

$$H[\phi, \mathbf{h}] = - \int d\mathbf{r} ((\nabla\phi)^2 + \mathbf{h}\phi(\mathbf{r})) = - \int d\mathbf{r} ((\nabla\phi)^2 + h_x \cos \phi(\mathbf{r}) + h_y \sin \phi(\mathbf{r})) , \quad (\text{B.10})$$

qui, réinjecté dans (B.3), donne l'action :

$$S[\phi, \tilde{\phi}, \mathbf{h}] = \int dt d\mathbf{r} \tilde{\phi} \left[ \frac{\partial\phi}{\partial t} - \Delta\phi + h_x \sin(\phi) - h_y \cos(\phi) \right]. \quad (\text{B.11})$$

La fonction d'autoréponse  $R(t, t_w)$  est définie par la limite :

$$R(t, t_w) = \lim_{\mathbf{h} \rightarrow 0} \left[ \frac{\langle \cos \phi(t, \mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{h}} - \langle \cos \phi(t, \mathbf{r}) \rangle}{h_x(t_w, \mathbf{r})} + \frac{\langle \sin \phi(t, \mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{h}} - \langle \sin \phi(t, \mathbf{r}) \rangle}{h_y(t_w, \mathbf{r})} \right], \quad (\text{B.12})$$

où  $\langle \cdot \rangle_{\mathbf{h}}$  précise que la valeur moyenne a été calculée en présence d'un champ magnétique  $\mathbf{h}$ . L'évaluation de l'aimantation dans la direction  $x$  est ramené à un calcul intégral du type :

$$\langle \cos \phi(t, \mathbf{r}) \rangle = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\tilde{\phi} \left\{ \cos \phi(t, \mathbf{r}) \exp \left( - \int dt d\mathbf{r} \tilde{\phi} \left[ \frac{\partial\phi}{\partial t} - \Delta\phi \right] \right) \exp \left( -s[\phi, \tilde{\phi}] \right) \right\} \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} \langle \cos \phi(t, \mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{h}} &= \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\tilde{\phi} \left\{ \cos \phi(t, \mathbf{r}) \right. \\ &\times \exp \left( - \int dt d\mathbf{r} \tilde{\phi} \left[ \frac{\partial\phi}{\partial t} - \Delta\phi + h_x(t_w) \sin \phi(t_w) - h_y(t_w) \cos \phi(t_w) \right] \right) \exp \left( -s[\phi, \tilde{\phi}] \right) \left. \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

et en développant l'action (B.11) au premier ordre en  $\mathbf{h}$  on obtient :

$$\langle \cos \phi(t, \mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{h}} = \langle \cos \phi(t, \mathbf{r}) \rangle + h_x(t_w, \mathbf{r}) \langle \cos \phi(t, \mathbf{r}) \sin \phi(t_w, \mathbf{r}) \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}) \rangle, \quad (\text{B.15})$$

L'aimantation dans la direction  $y$  se calcule de la même façon :

$$\langle \sin \phi(t, \mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{h}} = \langle \sin \phi(t, \mathbf{r}) \rangle - h_y(t_w, \mathbf{r}) \langle \sin \phi(t, \mathbf{r}) \cos \phi(t_w, \mathbf{r}) \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}) \rangle. \quad (\text{B.16})$$

Ainsi la fonction de réponse s'obtient en calculant la moyenne :

$$R(t, t_w; \mathbf{r}) = \langle \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}) \sin(\phi(t, \mathbf{r}) - \phi(t_w, \mathbf{r})) \rangle \quad (\text{B.17})$$

$$= \langle \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}) \sin(\phi(t, \mathbf{r}) - \phi(t_w, \mathbf{r})) \exp(-s[\phi, \tilde{\phi}]) \rangle_0, \quad (\text{B.18})$$

où  $\langle \cdot \rangle_0$  indique que la moyenne n'a été calculée qu'avec l'action  $S[\phi, \tilde{\phi}, 0]$ . En développant le sinus, la loi binômiale donne :

$$R(t, t_w; \mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{2k+1} R_{k,l}(t, t_w; \mathbf{r}), \quad (\text{B.19})$$

avec

$$R_{k,l}(t, t_w; \mathbf{r}) = \frac{(-1)^{k+l+1}}{l!(2k+1-l)!} \langle \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}) \phi^l(t, \mathbf{r}) \phi^{2k+1-l}(t_w, \mathbf{r}) \exp(-s[\phi, \tilde{\phi}]) \rangle_0. \quad (\text{B.20})$$

Les champs  $\phi$  et  $\tilde{\phi}$  étant gaussiens, leurs corrélations vérifient ici :

$$\begin{aligned} \langle \phi(t, \mathbf{r}) \phi(t_w, \mathbf{r}') \rangle_0 &= 0 \\ \langle \tilde{\phi}(t, \mathbf{r}) \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}') \rangle_0 &= 0 \\ \langle \phi(t, \mathbf{r}) \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}') \rangle_0 &\equiv R_\theta(t, t_w; |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{\Theta(t - t_w)}{4\pi(t - t_w)} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{4(t - t_w)}\right). \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Ainsi, le développement au premier ordre de l'exponentielle dans (B.20) donne :

$$R_{k,l}(t, t_w; \mathbf{r}) = \frac{(-1)^{l+1}}{l!(2k+1-l)!k!} \int \prod_{j=1}^k dj dj' \langle \tilde{\phi}(t_w, \mathbf{r}) \phi^l(t, \mathbf{r}) \phi^{2k+1-l}(t_w, \mathbf{r}) \tilde{\phi}(j) \kappa(j, j') \tilde{\phi}(j') \rangle_0, \quad (\text{B.22})$$

où  $j$  représente le couple de variables  $(t_j, \mathbf{r}_j)$ . Après avoir identifié  $R_\theta(t, t_w; \mathbf{r})$ , le théorème de Wick permet de décomposer la corrélation des  $2k+2$  champs restants en somme de corrélations à deux champs satisfaisant (B.21) :

$$\begin{aligned} R_{k,0}(t, t_w; \mathbf{r}) &= 0 \\ R_{k,l}(t, t_w; \mathbf{r}) &= \frac{(-1)^{l+1}}{(l-1)!(2k+1-l)!k!} \int \prod_{j=1}^k dj dj' R_\theta(t, t_w; \mathbf{r}) \\ &\quad \times \langle \phi^{l-1}(t, \mathbf{r}) \phi^{2k+1-l}(t_w, \mathbf{r}) \tilde{\phi}(j) \kappa(j, j') \tilde{\phi}(j') \rangle_0. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Le calcul de la somme sur  $l$  donne :

$$R(t, t_w; \mathbf{r}) = R_\theta(t, t_w; \mathbf{r}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!(2k)!} \int \prod_{j=1}^k dj dj' \langle [\phi(t, \mathbf{r}) - \phi(t_w, \mathbf{r})]^{2k} \tilde{\phi}(j) \kappa(j, j') \tilde{\phi}(j') \rangle_0. \quad (\text{B.24})$$

En appliquant la même stratégie que précédemment sur la fonction d'autocorrélation, on trouve :

$$\begin{aligned} C(t, t_w; \mathbf{r}) &= \sum_{k=0}^{\infty} c_k(t, t_w; \mathbf{r}) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \langle [\phi(t, \mathbf{r}) - \phi(t_w, \mathbf{r})]^{2k} \exp(-s[\phi, \tilde{\phi}]) \rangle_0. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Ici, c'est le  $k$ -ème ordre du développement de l'exponentielle qui apporte une contribution non-nulle d'après (B.21), soit :

$$c_k(t, t_w; \mathbf{r}) = \frac{1}{k!(2k)!} \int \prod_{j=1}^k dj dj' \langle [\phi(t, \mathbf{r}) - \phi(t_w, \mathbf{r})]^{2k} \tilde{\phi}(j) \kappa(j, j') \tilde{\phi}(j') \rangle_0. \quad (\text{B.26})$$

Ce terme apparaissant dans (B.24), nous pouvons réécrire la fonction de réponse sous la forme :

$$R(t, t_w; \mathbf{r}) = R_\theta(t, t_w; \mathbf{r}) C(t, t_w; \mathbf{r}), \quad (\text{B.27})$$

où  $R_\theta(t, t_w)$  est donné par (B.21) et  $C(t, t_w)$  a été calculé dans l'annexe A. Le résultat final est donc :

$$R(t, t_w) = \frac{\eta(T_f)}{2T_f(t - t_w)^{1+\eta(T_f)/2}} \left[ \frac{(\lambda + 1)^2}{4\lambda} \right]^{\frac{\eta(T_f) - \eta(T_i)}{4}}, \quad (\text{B.28})$$

où  $\lambda = t/t_w$  et  $T = 2\pi\eta(T)$  dans l'approximation des ondes de spin.

## Annexe C

# Invariance d'échelle locale et fonctions de réponse

Cette annexe donne quelques notions sur la théorie de l'invariance conforme<sup>1</sup> [137] dans le cadre d'une dynamique de croissance de domaines régie par une équation de Langevin. Dans ce contexte, en faisant l'hypothèse que la fonction d'autoréponse  $R(t, t_w)$  se transforme de manière covariante sous certaines transformations d'échelle locales, alors il a été montré que [39, 38] :

$$R(t, t_w) \simeq r_0 \left( \frac{t}{t_w} \right)^{1+a-\lambda_R/z} (t - t_w)^{-1-a}, \quad (\text{C.1})$$

où  $r_0$  est une amplitude positive. Cette relation est valable pour une dynamique critique (auquel cas l'exposant  $\lambda_R/z$  est remplacé par  $\lambda_R/z_c$ ) ou dans la phase ordonnée.

Dans le cadre de phénomènes critiques à l'équilibre, l'invariance conforme<sup>2</sup> s'appuie sur la covariance de corrélateurs à  $n$  points  $G(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \langle \phi_1(\mathbf{r}_1) \dots \phi_n(\mathbf{r}_n) \rangle$  sous les transformations globales  $\mathbf{r}_i \mapsto b\mathbf{r}_i$

$$G(b\mathbf{r}_1, \dots, b\mathbf{r}_n) = b^{-(x_1+\dots+x_n)} G(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n), \quad (\text{C.2})$$

où  $x_i$  est la dimension d'échelle du champ  $\phi_i$  vérifiant :  $\phi_i(b\mathbf{r}_i) = b^{-x_i} \phi_i(\mathbf{r}_i)$ . Ainsi, au point critique, l'invariance d'échelle globale est étendue à une invariance conforme. De la même façon, Henkel [38] a montré qu'une transformation d'échelle globale infinitésimale dynamique

$$t \mapsto (1 + \varepsilon)^z t, \quad \mathbf{r} \mapsto (1 + \varepsilon)\mathbf{r} \quad (\text{C.3})$$

avec une constante  $|\varepsilon| \ll 1$ , peut être étendue, quelque soit la valeur de l'exposant dynamique  $z$ , à une transformation d'échelle *locale* infinitésimale où  $\varepsilon = \varepsilon(t, \mathbf{r})$  dépend à présent de l'espace et du temps.

---

<sup>1</sup>Pour une description plus détaillée de la théorie de l'invariance conforme reliée aux transformations d'échelle dynamique, le lecteur pourra consulter la revue [38].

<sup>2</sup>Voir les réf.[138, 139] pour une introduction.

## Invariance de Schrödinger

Les transformations d'échelles locales représentent les symétries adoptées par certaines équations aux dérivées partielles telles que l'équation libre de Schrödinger dans le cas où  $z = 2$  (cf. équation de diffusion libre). Dans ce paragraphe, nous déterminons les éléments de symétrie de l'équation libre de Schrödinger afin d'en déduire les propriétés de symétrie de l'équation de Langevin.

Le groupe de Schrödinger [140], donne les éléments de symétrie maximale de l'équation libre de Schrödinger :

$$D^{-1} \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} = \Delta \psi(t, \mathbf{r}), \quad (\text{C.4})$$

où  $D$  est une constante de diffusion. Le groupe de Schrödinger  $Sch(d)$  agit sur les coordonnées de l'espace  $\mathbf{r}$  et du temps  $t$  par la transformation  $(t, \mathbf{r}) \mapsto (t', \mathbf{r}') = g(t, \mathbf{r})$  où

$$t \mapsto t' = \frac{\alpha t + \beta}{\gamma t + \delta}, \quad \mathbf{r} \mapsto \mathbf{r}' = \frac{\mathcal{R}\mathbf{r} + \mathbf{v}t + \mathbf{a}}{\gamma t + \delta} \quad (\text{C.5})$$

où  $\mathcal{R}$  est une matrice de rotation<sup>3</sup> et  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \mathbf{v}, \mathbf{a}$  sont des paramètres réels vérifiant  $\alpha\delta - \beta\gamma = 1$ . L'action du groupe  $Sch(d)$  sur les fonctions d'ondes  $\psi = \psi(t, \mathbf{r})$  solutions de l'équation libre de Schrödinger donne la transformation :

$$\psi(t, \mathbf{r}) \mapsto (T_g \psi)(t, \mathbf{r}) = f_g[g^{-1}(t, \mathbf{r})] \psi[g^{-1}(t, \mathbf{r})], \quad (\text{C.6})$$

où la fonction compagnon  $f_g$  est connue explicitement [140, 141].

Pour simplifier les notations, nous nous plaçons dans le cas unidimensionnel<sup>4</sup> ( $d = 1$ ) pour présenter les générateurs de  $Sch(1)$  donnant les symétries de (C.4) :

$$\begin{aligned} X_{-1} &= -\partial_t && \text{translation dans le temps} \\ X_0 &= -t\partial_t - \frac{1}{2}r\partial_r - \frac{x}{2} && \text{dilatation} \\ X_1 &= -t^2\partial_t - tr\partial_r - xt - \frac{\mathcal{M}}{2}r^2 && \text{transformation spéciale de Schrödinger} \\ Y_{-1/2} &= -\partial_r && \text{translation dans l'espace} \\ Y_{1/2} &= -t\partial_r - \mathcal{M}r && \text{transformation de Galilei} \\ M_0 &= -\mathcal{M} && \text{changement de phase} \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

où  $D^{-1} = 2\mathcal{M}$  et  $x = d/2$  représente la dimension d'échelle de la fonction d'onde  $\psi(t, \mathbf{r})$  solution de (C.4). L'ensemble de ces générateurs forme une algèbre de Lie notée  $\mathbf{sch}_1$  satisfaisant

<sup>3</sup>dans un espace à  $d$  dimensions

<sup>4</sup>La généralisation à  $d > 1$  ne pose pas de problème.

les relations commutation :

$$[X_n, X_{n'}] = (n - n')X_{n+n'}, [X_n, Y_m] = \left(\frac{n}{2} - m\right) Y_{n+m}, [Y_{1/2}, Y_{-1/2}] = M_0 \quad (\text{C.8})$$

où  $n, n' \in \{\pm 1, 0\}$  et  $m \in \{\pm \frac{1}{2}\}$ .

Considérant l'équation de Langevin sans bruit thermique donnant l'évolution du champ  $\phi(t, \mathbf{r})$  :

$$\frac{\partial \phi(t, \mathbf{r})}{\partial t} = \Delta \phi(t, \mathbf{r}), \quad (\text{C.9})$$

nous remarquons que cette équation possède les mêmes propriétés de symétrie que (C.4). On qualifie alors un champ  $\phi$  de *quasi-primaire* s'il se transforme suivant (C.6) avec  $g(t, \mathbf{r})$  donnée par (C.5) où  $\alpha\delta - \beta\gamma = 1$ .

## Invariance d'échelle locale

Nous faisons ici l'hypothèse que les fonctions de réponse spatiales à deux temps, définies dans le contexte de la théorie MSR (voir annexe B.), par<sup>5</sup> :

$$R(t_1, t_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left. \frac{\delta \langle \phi(t_1, \mathbf{r}_1) \rangle}{\delta h(t_2, \mathbf{r}_2)} \right|_{h=0} = \langle \phi(t_1, \mathbf{r}_1) \tilde{\phi}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (\text{C.10})$$

sont covariantes sous certaines transformations locales. Etant donné que nous considérons une dynamique hors de l'équilibre, l'invariance par translation dans le temps est brisée. De ce fait, les champs  $\phi(t, \mathbf{r})$  et  $\tilde{\phi}(t, \mathbf{r})$  ne sont pas covariants sous l'ensemble des transformations (C.7) mais uniquement pour celles définissant le sous-algèbre  $\mathcal{S} = \{X_0, X_1, Y_{-1/2}, Y_{1/2}\}$ . Ainsi, les conditions de covariance de la fonction de réponse  $R$  sont définies par :

$$X_0 R = X_1 R = Y_m R = 0, \quad m = \pm \frac{1}{2}. \quad (\text{C.11})$$

En utilisant l'invariance par translation dans le temps, nous pouvons écrire  $R = R(t_1, t_2; \mathbf{r})$  avec  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . Si à présent, on s'intéresse aux fonctions d'autoréponse à deux temps  $R(t, t_w)$ , il suffit de poser  $\mathbf{r} = 0$ . Dans ce cas, les conditions  $Y_{-1/2} R(t, t_w) = Y_{1/2} R(t, t_w) = 0$  sont automatiquement satisfaites. Ainsi, les deux conditions restantes sont  $X_0 R(t, t_w) = X_1 R(t, t_w) = 0$  et conduisent aux équations différentielles :

$$\left( t \partial_t + t_w \partial_{t_w} + \frac{x_1}{z} + \frac{x_2}{z} \right) R(t, t_w) = 0, \quad (\text{C.12})$$

$$\left( t^2 \partial_t + t_w^2 \partial_{t_w} + \frac{2x_1}{z} t + \frac{2x_2}{z} t_w \right) R(t, t_w) = 0. \quad (\text{C.13})$$

La solution est alors donnée par :

$$R(t, t_w) = r_0 \left( \frac{t}{t_w} \right)^{(x_1 - x_2)/z} (t - t_w)^{-(x_1 + x_2)/z}, \quad t > t_w \quad (\text{C.14})$$

<sup>5</sup>Nous admettons ici que le champ de réponse  $\tilde{\phi}$  est un opérateur quasi-primaire.

où  $r_0$  est une amplitude et  $x_1, x_2$  sont respectivement les dimensions d'échelle des champs  $\phi$  et  $\tilde{\phi}$ . La forme générale des fonctions d'autoréponse étant donnée par  $R(t, t_w) = t_w^{-1-a} f_R(t/t_w)$  avec  $f_R(x) \sim x^{-\lambda_R/z}$  dans la limite  $x \gg 1$ , on en déduit par identification des exposants :

$$R(t, t_w) = r_0 \left( \frac{t}{t_w} \right)^{1+a-\lambda_R/z} (t - t_w)^{-1-a}, \quad t > t_w. \quad (\text{C.15})$$

Notons enfin que cette théorie ne s'applique pas au cas du modèle d'Ising à une dimension avec une dynamique de type Glauber à température nulle. Dans ce cas, il faut passer à une représentation généralisée de l'invariance d'échelle locale [31].

# Liste des figures

1.1	Cisaillement d'un liquide par un viscosimètre de Couette. . . . .	10
1.2	Visualisation du modèle d'Ising 2D trempé depuis un état désordonné vers sa phase basse température. . . . .	12
1.3	Processus stochastique décrit par la variable aléatoire $x$ . . . . .	13
1.4	Mesure de la susceptibilité $\chi(t, t_w) = M(t, t_w)/h$ (scénario Zero Field Cooled). . . . .	16
1.5	Fonctions de corrélation connectées dans le modèle d'Ising 2D trempé à $T_c/2$ depuis un état désordonné. . . . .	17
1.6	Susceptibilité magnétique dans le modèle XY 2D trempé depuis un état désordonné vers sa phase critique. . . . .	19
1.7	Mesure des fonctions dynamiques à deux temps lors d'une trempe. . . . .	20
1.8	Trempe en-dessous de $T_c$ depuis une phase désordonnée dans le modèle d'Ising. . . . .	21
1.9	Echelle de temps caractéristiques lors d'une transition de phase dynamique. . . . .	22
1.10	Croissance des domaines critiques dans le modèle d'Ising ( $L^2 = 256^2$ ) trempé à $T_c$ depuis un état initial désordonné. . . . .	24
2.1	Evolution de la fonction d'autocorrélation $\langle \cos[\theta(t) - \theta(0)] \rangle$ dans des simulations Monte Carlo utilisant des dynamiques Metropolis et Glauber dans le modèle XY ( $L^2 = 128^2$ ) trempé dans sa phase critique à $T = 0.1$ . . . . .	28
2.2	Aimantations et fonctions d'autocorrélation moyennées spatialement obtenues par des dynamiques Metropolis et Glauber dans le modèle XY 3D ( $L^3 = 32^3$ ) trempé à $T_c/2$ . . . . .	29
2.3	Fonction d'autocorrélation au cours du processus de thermalisation à température critique d'un réseau carré de taille $L^2 = 512^2$ initialement ordonné. . . . .	30
2.4	Profil de $h(t)$ lors des approches TRM et ZFC. . . . .	33
3.1	Configuration des spins d'un vortex dans un réseau XY. . . . .	39
3.2	Vortex isolés dans la phase paramagnétique d'un réseau XY de taille $L^2 = 10^2$ . . . . .	40
3.3	Configuration des spins à $T = 0.1$ sur un réseau de dimensions $512 \times 512$ . L'orientation des spins est représentée par une teinte de gris proportionnelle à $\sin^2 2\theta$ . . . . .	42
3.4	. . . . .	44
3.5	Exposants critiques des corrélations extraits de nos simulations par régression non-linéaire. . . . .	45
3.6	Comportement asymptotique de $C(t, t_w)$ pour cinq températures de trempe dans le régime d'échelle $t > t_w \gg 1$ . . . . .	46

3.7	Fonctions de réponse représentées dans la variable $t - t_w$ lors de trempes opérées à $T_f = 0.3$ et $T_f = T_{KT}$ sur des systèmes de taille $L^2 = 100^2$ avec 10000 réalisations. . . . .	48
3.8	Fonctions d'autoréponse obtenues par simulations Monte Carlo de trempes à $T_f \leq T_{KT}$ . . . . .	49
3.9	A gauche : rapport de fluctuation-dissipation calculé à $T_f = 0.3$ sur un système de taille $L^2 = 50^2$ . A droite : graphe paramétrique représentant la susceptibilité magnétique en fonction de $C(t, t_w)$ dans un scénario ZFC pour $T_f = 0.3$ dans un système de taille $L^2 = 100^2$ . . . . .	50
3.10	Evaluation du temps de décorrélation lors de la thermalisation d'un système $L^2 = 100^2$ à différentes températures critiques $T_i$ . . . . .	51
3.11	Régime asymptotique des fonctions d'autocorrélation lors de trempes à $T_f = 0.3$ (10000 échantillons) et $T_f = 0.5$ (20000 échantillons) depuis un état initial préparé à $T_i = 0.1$ . . . . .	52
3.12	Etude par régression linéaire des exposants des fonctions relatives au vieillissement des corrélations lors de trempes à $T_f = 0.3$ (à gauche) et $T_f = 0.5$ (à droite) depuis $T_i = 0.1$ . . . . .	53
3.13	Fonctions d'autocorrélation affectées à une trempe de $T_i = T_{KT}$ vers $T_f = 0.1$ . . . . .	54
3.14	Fonctions d'autoréponse affectées à des trempes à $T_f = 0.3$ depuis différentes températures de préparation $T_i$ . . . . .	55
3.15	Graphe paramétrique de la susceptibilité ZFC lors de trempes à très basses températures partant d'un état initial thermalisé à $T_{KT}$ . . . . .	56
3.16	Rapports de fluctuation-dissipation évalués lors d'une trempe à $T_f = 0.1$ d'un système de taille $100 \times 100$ initialement thermalisé à $T_{KT}$ . . . . .	57
3.17	Représentation des fonctions d'autocorrélation réévaluées lors de trempes à $T_f \leq T_{KT}$ depuis un état désordonné. . . . .	58
3.18	Comportement asymptotique des fonctions d'autoréponse lors de trempes à $T_f = 0.1$ et $T_f = 0.3$ sur un système de taille $L^2 = 100^2$ . . . . .	59
3.19	Représentation paramétrique de la susceptibilité ZFC en fonction de $C(t, t_w)$ dans un système de dimensions $L^2 = 100^2$ trempé à $T_f = 0.3$ . . . . .	60
3.20	A gauche : représentation paramétrique de la susceptibilité magnétique $\chi$ en fonction de $C(t, t_w)$ pour différentes températures de trempe avec $t_w = 100$ . A droite : évolution de $X_\infty^\chi$ en fonction de la température réduite. La droite montre un comportement linéaire en $T/(2T_{KT})$ . . . . .	61
3.21	Taux de fluctuation-dissipation rescalés lors d'une trempe depuis un état désordonné à $T_f = 0.7$ sur un système de taille $L^2 = 50^2$ . . . . .	62
3.22	Taux de fluctuation-dissipation rescalés lors d'une trempe depuis un état désordonné à $T_f = 0.3$ sur un système de taille $L^2 = 50^2$ . . . . .	63
4.1	Structure de lignes de vortex dans un réseau tridimensionnel. . . . .	67
4.2	Croissance de domaines ordonnés dans le modèle XY 3D ( $L^3 = 128^3$ ) trempé à $t = 0$ à $T_f = 0.9 < T_c$ depuis un état initial totalement désordonné. . . . .	69
4.3	Fonctions d'autocorrélation représentées dans la variable d'échelle $t/t_w$ lors d'une trempe à $T_f = 0.9$ (avec $10^3$ échantillons). . . . .	71

4.4	Fonctions d'autocorrélation à $T_f = 1.5$ représentées dans les variables $t/t_w$ et $(t + t_w)^2/4tt_w$ . . . . .	71
4.5	Fonctions d'autoréponse à deux temps représentées dans leur variable d'échelle $t/t_w$ lors d'une trempe à $T_f = 0.9$ . . . . .	73
4.6	Fonctions d'autoréponse affectées à un système trempé à $T_f = 1.5$ depuis un état initial désordonné. . . . .	74
4.7	Susceptibilités ZFC calculées à $T_f = 0.3$ pour $t_w = 100$ et $1000$ sur un système de taille $L^3 = 100^3$ . . . . .	75
4.8	Taux de fluctuation-dissipation représentés dans la variable $t/t_w$ lors d'une trempe à $T_f = 0.9$ sur un système de taille $L^3 = 30^3$ . . . . .	76
4.9	Fonctions d'autocorrélation calculées à $T_c$ pour six temps d'attente. . . . .	77
4.10	Variation de l'exposant $\lambda^c/z_c$ évalué par régressions algébriques dans le régime asymptotique à partir des résultats de la figure 4.9. . . . .	78
4.11	Evolution de l'exposant $\lambda^c/z_c$ avec la taille $L$ du système à $t_w = 80$ . . . . .	79
4.12	Fonctions d'autocorrélation exprimées dans la variable d'échelle $t/L^{z_c}$ pour $t_w = 0.2L^{z_c}$ avec $L = 10, 20, 30$ et $40$ . . . . .	80
4.13	Fonctions d'échelle de la réponse lors d'une trempe critique d'un système de taille $L^3 = 50^3$ . . . . .	81
4.14	Susceptibilités magnétiques calculées à $T_c$ pour $t_w = 200$ . Les symboles "+" correspondent à la susceptibilité ZFC calculée de manière standard via (2.14) et les cercles se réfèrent au calcul de la réponse intégrée. . . . .	82
4.15	Taux de fluctuation-dissipation calculé à $T_c$ représenté dans la variable $t_w/t$ . . . . .	83
5.1	Modèle de McCoy et Wu . . . . .	94
5.2	Diagramme de phase de la chaîne d'Ising désordonnée en champ transverse à température nulle. . . . .	95
6.1	Aimantations critiques transverses dans la chaîne d'Ising désordonnée préparée dans l'état $ z\rangle$ . . . . .	106
6.2	Aimantation transverse de surface dans la phase critique pour une distribution de couplage exponentielle $\pi(J) = \alpha \exp(-\alpha J)$ . . . . .	107
6.3	Aimantations transverses dans la chaîne d'Ising désordonnée sous champ critique. Le système est préparé dans l'état initial $ x\rangle$ . . . . .	108
6.4	Valeurs asymptotiques de l'aimantation transverse en fonction de $h_0/h_c$ pour des systèmes désordonnés préparés dans les états $ x\rangle$ et $ z\rangle$ . . . . .	110
6.5	Evolution aux temps courts des fonctions de corrélation bord à bord $[C_L^{x,z}(t)]$ pour différentes tailles de systèmes. . . . .	111
6.6	Relaxation des fonctions de corrélation moyennes $[C_L^x(t)]$ des spins de surface dans une chaîne de taille $L = 20$ sous champ critique. . . . .	112
6.7	Marche aléatoire unidimensionnelle de $L - 1$ pas contribuant à l'aimantation $\phi(1)$ . . . . .	113
6.8	Marche aléatoire entre deux murs absorbants contribuant à $G(L)$ . . . . .	114
6.9	Dépendance des valeurs asymptotiques $[G(L)]$ avec la taille $L$ du système. . . . .	115



# Bibliographie

- [1] L. C. E. Struick, *Physical Aging in Amorphous Polymers and Other Materials*, Elsevier Houston (1978)
- [2] L. Lundgren, P. Svedlindh, P. Nordblad et O. Beckman, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 911 (1983) ; L. Lundgren, P. Svedlindh, P. Nordblad et O. Beckman, *J. Appl. Phys.* **57**, 3371 (1985)
- [3] R. V. Chamberlin, M. Hardiman et R. Orbach, *J. Appl. Phys.* **52**, 1771 (1983)
- [4] J. Hammann, M. Lederman, M. Ocio, R. Orbach et E. Vincent, *Physica A* **185**, 278 (1992)
- [5] K. Jonason, E. Vincent, J. Hammann, J.-P. Bouchaud et P. Nordblad, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3243 (1998) ; K. Jonason, P. Nordblad, E. Vincent, J. Hammann et J.-P. Bouchaud, *Eur. Phys. J. B* **13**, 99 (2000)
- [6] A. J. Bray, *Adv. Phys.* **43**, 357 (1994)
- [7] K. Binder et D. Stauffer, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1006 (1974) ; J. Marro, J. L. Lebowitz et M. H. Kalos, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 282 (1979)
- [8] P. Granberg et al., *Phys. Rev. B* **35**, 2075 (1987)
- [9] D. S. Fisher et D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **38**, 373 (1988)
- [10] C. Yeung, M. Rao et R. C. Desai, *Phys. Rev. E* **53**, 3073 (1996)
- [11] D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **40**, 304 (1989)
- [12] T. J. Newman et A. J. Bray, *J. Phys. A* **23**, L279 (1990) ; *J. Phys. A* **23**, 4491 (1990)
- [13] A. J. Bray, K. Humayun et T. J. Newman, *Phys. Rev. B* **43**, 3699 (1991)
- [14] H. K. Janssen, B. Schaub et B. Schmittmann, *Z. Phys. B* **73**, 539 (1989)
- [15] W. Zippold, R. Kühn et H. Horner, *Eur. Phys. J. B* **13**, 531 (2000)
- [16] A. Picone et M. Henkel, *J. Phys. A* **35**, 5575 (2002)
- [17] C. Godrèche et J. M. Luck, *J. Phys. A* **33**, 1151 (2000)
- [18] C. Godrèche et J. M. Luck, *J. Phys. Cond. Matt.* **14**, 1589 (2002)
- [19] L. Berthier, J. L. Barrat et J. Kurchan, *Eur. Phys. J.* **11**, 635 (1999)
- [20] C. Godrèche et J. M. Luck, *J. Phys. A* **33**, 9141 (2000)
- [21] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan et G. Parisi *J. Phys. I* **4**, 1641 (1994)
- [22] L. F. Cugliandolo et J. Kurchan, *J. Phys. A* **27**, 5749 (1994)

- [23] J. P. Bouchaud, L. F. Cugliandolo, J. Kurchan et M. Mézard dans *Spin Glasses and Random Fields* Directions in Condensed Matter Physics - vol. 12, ed. A P Young (1998)
- [24] A. Barrat, Phys. Rev. E **57**, 3629 (1998)
- [25] P. Mayer, L. Berthier, J. Garrahan et P. Sollich, Phys. Rev. E **68**, 016116 (2003)
- [26] G. Schehr et P. Le Doussal, Phys. Rev. E **68**, 046101 (2003)
- [27] P. Calabrese et A. Gambassi, Phys. Rev. E **66**, 066101 (2002) ; Phys. Rev. E **65**, 066120 (2002)
- [28] C. Chatelain, cond-matt/0404017 (2004)
- [29] A. D. Rutenberg et A. J. Bray, Phys. Rev. E **51**, R1641 (1995)
- [30] L. Berthier, P. C. W. Holdsworth et M. Sellitto, J. Phys. A **34**, 1805 (2001)
- [31] A. Picone et M. Henkel, Nucl. Phys. B **688**, 217 (2004)
- [32] P. C. Martin, E. D. Siggia et H. H. Rose, Phys. Rev. A **8**, 423 (1973) ; C. de Dominicis, Phys. Rev. B **18**, 4913 (1978)
- [33] A. D. Rutenberg et A. J. Bray, Phys. Rev. E **51**, 5499 (1995)
- [34] F. Rojas et A. D. Rutenberg, Phys. Rev. E **60**, 212 (1999)
- [35] C. Chatelain, J. Phys. A **36**, 10739 (2003)
- [36] F. Ricci-Tersenghi, Phys. Rev. E **68**, 065104(R) (2003)
- [37] S. Abriet et D. Karevski, Eur. Phys. J. B **37**, 47 (2003)
- [38] M. Henkel, Nucl. Phys. B **645**, 405 (2002)
- [39] M. Henkel, M. Pleimling, C. Godrèche et J. M. Luck, Phys. Rev. Lett. **87**, 265701 (2001)
- [40] M. Henkel et M. Pleimling, Phys. Rev. E **68**, 065101(R) (2003)
- [41] M. Henkel, M. Paessens et M. Pleimling, Europhys. Lett. **62**, 664 (2003)
- [42] M. Henkel, M. Paessens et M. Pleimling, Phys. Rev. E **69**, 056109 (2004)
- [43] S. Abriet et D. Karevski, cond-mat/0405598 (2004)
- [44] L. Berthier et J. L. Barrat, J. Chem. Phys. **116**, 6228 (2002)
- [45] L. F. Cugliandolo, *Slow Relaxation and Non Equilibrium Dynamics in Condensed Matter*, Les Houches Session 77, juillet 2002 ; cond-mat/0210312 (2002)
- [46] L. F. Cugliandolo et P. Le Doussal, Phys. Rev. E **53**, 1525 (1996)
- [47] G. Blatter, M. V. Fegelman, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin et V. M. Vinokur, Rev. Mod. Phys. **66**, 1125 (1994)
- [48] Pour une revue sur les verres de spin voir K. Binder et A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986)
- [49] E. Vincent, V. Dupuis, M. Alba, J. Hammann et J.-P. Bouchaud, Europhys. Lett. **29**, 1 (1999)
- [50] M. R. Evans et R. A. Blythe, Physica A **313**, 110 (2002)

- [51] T. Liggett, *Interacting particle systems : contact, voter and exclusion processes*, Ed. Springer-Verlag (1999)
- [52] G. M. Schütz, J. Phys. A **28**, 3405 (1995) ; Phys. Rev. E **53**, 1475 (1996)
- [53] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963)
- [54] J. E. Santos, J. Phys. A **30**, 3249 (1997)
- [55] P. C. Hohenberg et B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977)
- [56] A. Crisanti et F. Ritort, J. Phys. A **36**, R181 (2003)
- [57] K. Kawasaki, Phys. Rev. **145**, 224 (1966)
- [58] F. Corberi, E. Lippiello et M. Zanetti, Phys. Rev. E **65**, 066114 (2002) ; C. Godrèche, F. Krzakala et F. Ricci-Tersenghi, J. Stat. Mech. : Theor. Exp. P04007 (2004) ; cond-mat/0401334
- [59] M. P. Nightingale et H. W. J. Blöte, Phys. Rev. Lett. **76**, 4548 (1996)
- [60] E. Lippiello et M. Zanetti, Phys. Rev. E **61**, 3369 (2000)
- [61] M. E. J. Newman et G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press (1999)
- [62] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989)
- [63] F. Corberi, E. Lippiello et M. Zanetti, cond-matt/0307542 (2003)
- [64] D. J. Bishop et J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **40**, 1727 (1978) ; I. Rudnick, Phys. Rev. Lett. **40**, 1454 (1978) ; G. Agnolet, D. F. Mc Queeney et J. D. Reppy, Phys. Rev. B **39**, 8934 (1989)
- [65] A. F. Hebard et A. T. Fiory, Phys. Rev. Lett. **50**, 1603 (1983)
- [66] M. P. A. Fisher et D. H. Lee, Phys. Rev. B **39**, 2756 (1989)
- [67] D. R. Nelson et B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979)
- [68] C. A. Murray et D. H. Van Winkle, Phys. Rev. Lett. **58**, 1200 (1987)
- [69] J. A. Lipa, D. R. Swanson, J. A. Nissen, T. C. P. Chui et U. E. Israelsson, Phys. Rev. Lett. **76**, 944 (1996)
- [70] D'autres références concernant les applications du modèle XY 2D se trouvent dans le livre de M. Laguës et A. Lesne, *Invariances d'échelle. Des changements d'états à la turbulence*, Ed. Belin (2003)
- [71] J. M. Kosterlitz et D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973) ; J. M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974)
- [72] N. D. Mermin et H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)
- [73] V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971) ; Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972)
- [74] B. Berche, J. Phys. A **36**, 585 (2003)
- [75] B. Zheng, M. Schultz et S. Trimper, Phys. Rev. E **59**, R1351 (1999)
- [76] R. Gupta et C. F. Baillie, Phys. Rev. B **45**, 2883 (1992) ; Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. B **65**, 184405 (2002)

- [77] Y. Ozeki, K. Ogawa et N. Ito, Phys. Rev. E **67**, 026702 (2003)
- [78] A. N. Pargellis, P. Finn, J. W. Goodby, P. Panizza, B. Yurke et P. E. Cladis, Phys. Rev. A **46**, 7765 (1992)
- [79] B. Yurke, A. N. Pargellis, T. Kovacs et D. A. Huse, Phys. Rev. E **47**, 1525 (1993)
- [80] A. J. Bray, A. J. Briant et D. K. Jervis, Phys. Rev. Lett. **84**, 1503 (2000)
- [81] M. Pleimling et F. Iglói, Phys. Rev. Lett. **92**, 145701 (2004); M. Pleimling, J. Phys. A **37**, R79 (2004)
- [82] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan et L. Peliti, Phys. Rev. E **55**, 3898 (1997)
- [83] L. F. Cugliandolo à paraître dans *Trends in Theoretical Physics II*, Ed. Falomir et al.; cond-mat/9903250 (1999)
- [84] L. P. Lévy, *Magnétisme et supraconductivité*, CNRS Editions - EDP Sciences (1998)
- [85] G. Kohring, R. E. Shrock et P. Wills, Phys. Rev. Lett. **57**, 1358 (1986); G. A. Williams, Phys. Rev. Lett. **59**, 1926 (1987)
- [86] M. Ferer, M. A. Moore et M. Wortis, Phys. Rev. B **8**, 5205 (1973)
- [87] A. P. Gottlob et M. Hasenbush, Physica A **201**, 593 (1993)
- [88] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martin-Mayor et A. Muñoz Sudupe, Phys. Lett. B **387**, 125 (1996)
- [89] J. C. Le Guillou et J. Zinn-Justin, Phys. Rev. B **21**, 3976 (1980); R. Guida et J. Zinn-Justin, J. Phys. A **31**, 8103 (1998)
- [90] K. G. Wilson et M. E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **28**, 240 (1972)
- [91] M. Hasenbush et T. Török, J. Phys. A **32**, 6361 (1999)
- [92] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi et E. Vicari, Phys. Rev. B **61**, 5905 (2000); Phys. Rev. B **62**, 5843 (2000); M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi et E. Vicari, Phys. Rev. B **63**, 214503 (2001)
- [93] R. A. Wickham et A. T. Dorsey, Phys. Rev. B **61**, 6945 (2000)
- [94] L. M. Jensen, B. J. Kim et P. Minnhagen, Europhys. Lett. **49**, 644 (2000)
- [95] M. Mondello et N. Goldenfeld, Phys. Rev. A **42**, 5865 (1990); Phys. Rev. A **45**, 657 (1992)
- [96] L. M. Jensen, B. J. Kim et P. Minnhagen, Phys. Rev. B **61**, 15412 (2000); P. Minnhagen, B. J. Kim et H. Weber, Phys. Rev. Lett. **87**, 037002 (2001)
- [97] F. Corberi, E. Lippiello et M. Zannetti, Eur. Phys. J. B **24**, 359 (2001); Phys. Rev. E **65**, 046136 (2002); cond-matt/0211609
- [98] L. F. Cugliandolo et D. S. Dean, J. Phys. A **28**, 4213 (1995)
- [99] B. K. Chakrabarti, A. Dutta et P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*, Ed. Springer (1996)
- [100] W. Wu, B. Ellman, T. F. Rosenbaum, G. Aeppli et D. H. Reich, Phys. Rev. Lett. **67**, 2076 (1991); W. Wu, B. Bitko, T. F. Rosenbaum et G. Aeppli, Phys. Rev. Lett. **71**, 1919 (1993)

- [101] P. Shukla et S. Singh, Phys. Rev. B **23**, 4661 (1981); T. Giamarchi et P. Le Doussal, Phys. Rev. B **53**, 15206 (1996); T. Nieuwenhuizen et F. Ritort, Physica A **250**, 8 (1998)
- [102] D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **69**, 534 (1992); Phys. Rev. B **51**, 6411 (1995)
- [103] J. Miller et D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **70**, 3147 (1993), D. Grempel et M. Rozenberg, Phys. Rev. Lett. **80**, 389 (1998); H. Rieger et A. P. Young, *Quantum Spin-glasses*, Ed. Springer (1996); cond-mat/9607005 (1996)
- [104] Y. S. Bai et M. D. Fayer, Phys. Rev. B **39**, 11066 (1989)
- [105] L. F. Cugliandolo et G. Lozano, Phys. Rev. B **59**, 915 (1999)
- [106] G. M. Schütz et S. Trimper, Europhys. Lett. **47**, 164 (1999)
- [107] B. M. McCoy et T. T. Wu, Phys. Rev. B **176**, 631 (1968); Phys. Rev. B **188**, 982 (1969); B. M. McCoy, Phys. Rev. **188**, 1014 (1969)
- [108] R. Shankar et G. Murthy, Phys. Rev. B **36**, 536 (1987)
- [109] S. K. Ma, C. Dasgupta et C. K. Hu, Phys. Rev. Lett. **43**, 1434 (1979)
- [110] A. P. Young et H. Rieger, Phys. Rev. B **53**, 8486 (1996)
- [111] M. Guo, R. N. Bhatt et D. A. Huse, cond-mat/9605111 (1996), paru dans Phys. Rev. B
- [112] F. Iglói, R. Juhász et P. Lajkó, Phys. Rev. Lett. **86**, 1343 (2001); F. Iglói, Phys. Rev. B **65**, 064416 (2002)
- [113] R. B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **23**, 17 (1969)
- [114] B. M. McCoy, Phys. Rev. Lett. **23**, 383 (1969)
- [115] A. Brooks Harris, Phys. Rev. B **12**, 203 (1975)
- [116] F. Iglói et H. Rieger, Phys. Rev. B **57**, 11404 (1998)
- [117] F. Iglói et H. Rieger, Phys. Rev. E **58**, 4238 (1998)
- [118] D. Karevski, R. Juhász, L. Turban et F. Iglói, Phys. Rev. B **60**, 4195 (1999)
- [119] F. Iglói, L. Turban et H. Rieger, Phys. Rev. E **59**, 1465 (1999)
- [120] T. Niemeijer, Physica **36**, 377 (1967)
- [121] J. A. Tjon, Phys. Rev. B **2**, 2411 (1970)
- [122] R. H. Terwiel et P. Mazur, Physica **32**, 1813 (1966)
- [123] T. Antal, Z. Rácz, A. Rákos et G. M. Schütz, Phys. Rev. E **59**, 4912 (1999)
- [124] G. O. Berim, S. I. Berim et G. G. Cabrera, Phys. Rev. B **66**, 094401 (2002)
- [125] D. Karevski, Eur. Phys. J. B. **27**, 147 (2002)
- [126] F. Iglói et H. Rieger, Phys. Rev. Lett. **85**, 3233 (2000)
- [127] L. Thomas, A. Caneshi et B. Barbara, Phys. Rev. Lett. **83**, 2398 (1999)
- [128] S. Abriet et D. Karevski, Eur. Phys. J. B **30**, 77 (2002)
- [129] E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925)

- [130] E. Lieb, T. Schultz et D. Mattis, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 407 (1961)
- [131] P. Jordan et E. Z. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928)
- [132] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958)
- [133] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Wetterling et B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 2<sup>nd</sup> Ed.*, Cambridge University Press (1992)
- [134] I. Peschel, *Phys. Rev. B* **30**, 6783 (1984)
- [135] D. Karevski, *J. Phys. A* **33**, L313 (2000)
- [136] F. Iglói, D. Karevski et H. Rieger, *Eur. Phys. J. B* **5**, 613 (1998)
- [137] M. Henkel, *Conformal Invariance and Critical Phenomena*, Ed. Springer (1999)
- [138] J. L. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Mechanics*, Cambridge University Press (1996)
- [139] P. di Francesco, P. Mathieu et D. Sénéchal, *Conformal Field Theory*, Ed. Springer (1997)
- [140] U. Niederer, *Helv. Phys. Acta* **45**, 802 (1972)
- [141] U. Niederer, *Helv. Phys. Acta* **47**, 167 (1974)

Monsieur ABRIET Stéphane

DOCTORAT de l'UNIVERSITE HENRI POINCARÉ, NANCY 1  
en SCIENCES PHYSIQUES

VU, APPROUVÉ ET PERMIS D'IMPRIMER N° 953

Nancy, le 07 juillet 2004

Le Président de l'Université

  
J.P. FINANCE



## Résumé

Cette thèse est consacrée à l'étude de la dynamique hors équilibre dans le modèle XY et la chaîne quantique d'Ising.

La dynamique du modèle XY à deux et trois dimensions a été suivie au cours de trempes simulées par des techniques Monte Carlo.

Les résultats sur la dynamique critique du modèle XY 2D préparé dans un état suffisamment ordonné ont confirmé les prédictions de l'approximation ondes de spin quant au comportement d'échelle des fonctions d'autocorrélation et de réponse à deux temps. Lorsque le système est trempé depuis un état de haute température, la forme de ces fonctions a été obtenue par des hypothèses d'échelle. L'étude de la violation du théorème de fluctuation dissipation a révélé la contribution de corrections logarithmiques provoquant l'annulation du rapport de fluctuation dissipation.

Dans le modèle XY 3D, les simulations Monte Carlo de trempes à  $T \leq T_c$  depuis un état initial désordonné ont validé les conjectures actuelles sur les formes d'échelle et les exposants dynamiques des fonctions de corrélation et de réponse. L'analyse de la réponse linéaire a également confirmé l'hypothèse d'invariance d'échelle locale. Les calculs numériques de rapport de fluctuation dissipation sont en accord avec les prédictions théoriques issues du groupe de renormalisation dans le cas de trempes critiques.

L'étude numérique de la dynamique à température nulle de la chaîne quantique d'Ising désordonnée a révélé une décroissance algébrique de l'aimantation transverse sous champ critique. Le comportement asymptotique des corrélations entre les spins de surface a été interprété en terme de marche aléatoire. Dans les trois phases, cette approche a souligné trois dépendances distinctes des corrélations en fonction de la taille de la chaîne.

**Mots-clés** : dynamique hors équilibre, vieillissement, simulation Monte Carlo, modèle XY, chaîne quantique désordonnée, modèle d'Ising.