

UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE
&
INSTITUT DE PHYSIQUE THEORIQUE
C.E.A.

THESE DE DOCTORAT DE
L'UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE

Spécialité

Physique Théorique

(*Physique de la région parisienne* ED 107)

Présentée par

M. Thomas Sarlat

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l' UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE

Titre:

Un modèle de dimension finie pour la transition vitreuse.

Soutenue le **13 novembre 2009**

devant le jury composé de :

M. P. Viot	Président du jury
M. S. Franz	Rapporteur
M. D. Dean	Rapporteur
M. T. Garel	Examineur
M. M. Tarzia	Examineur
M. A. Billoire	Directeur de thèse
M. G. Biroli	
M. J.-P. Bouchaud	

Table des matières

Table des matières	iii
Introduction	1
1 Phénoménologie de la transition vitreuse.	2
1.1 Viscosité.	2
1.2 Absence de longueur statique divergente	4
1.3 Corrélations dynamiques	6
2 Hétérogénéités dynamiques.	7
2.1 Comment les mesurer ?	8
2.2 Que doit-on expliquer ?	10
3 Modèles théoriques	10
3.1 Random first order theory.	10
3.2 Modèles à contraintes cinétiques.	12
3.3 Frustration géométrique.	13
4 Plan de thèse	14
1 R.F.O.T. :	
Du champ moyen à la dimension finie.	17
1 La théorie de couplage de modes.	17
1.1 Formalisme de l'opérateur de projection.	18
1.2 La théorie de couplage de modes (M.C.T.) des liquides surfondus. . .	19
1.3 Une extension de la M.C.T. ?	24
2 L'apport des systèmes désordonnés.	25
2.1 Lien avec la théorie des liquides : MCT schématique.	25
2.2 L'approche T.A.P.	28
2.3 Au-delà du modèle à p spins :	31
3 La M.C.T. revisitée :	33
3.1 Temps et longueurs :	33
3.2 Une théorie de Landau de la transition vitreuse.	36
4 <i>The random first order theory (RFOT)</i>	39
4.1 L'argument d'Adams-Gibbs.	39
4.2 Etats mosaïques : le scénario RFOT.	40
4.3 D'un scénario à une théorie.	41
2 R.O.M. :	
Thermodynamique	51
1 Présentation du modèle.	52
1.1 Solution invariante par permutation des répliques (RS)	53
1.2 Solution à un pas de brisure.	54
1.3 Lien avec les modèles sphériques [48].	55
2 Simulations numériques	57

2.1	Parallel Tempering.	57
2.2	Paramètres de simulation	58
2.3	Tests d'équilibration.	58
2.4	Faster than the clock.	61
3	Thermodynamique.	62
4	Conclusion	65
3	R.O.M. :	
	Dynamique	
	& Corrections de taille finie	67
1	Théorie de <i>finite-size scaling</i> dans les milieux désordonnés.	67
1.1	Critère de Harris.	69
1.2	Point fixe désordonné	70
1.3	Et au-dessus de la dimension critique supérieure?	74
2	R.O.M. et prédictions M.C.T.	79
2.1	Simulations numériques	79
2.2	Propriétés critiques :	80
2.3	<i>Finite-size scaling</i> : quand le désordre compte.	86
3	Conclusion	91
4	L.O.R.M. :	
	Un modèle de Kač pour le R.O.M.	95
1	Introduction aux modèles de Kač.	96
1.1	Un exemple simple : le modèle d'Ising.	96
1.2	Le modèle à p spins de dimension finie.	97
1.3	Approche TAP.	98
2	Modèles de patches.	101
2.1	Approche naïve.	102
2.2	Définition.	103
2.3	Lien avec les modèles sphériques.	107
3	Simulations numériques en dimension $d = 3$: thermodynamique	108
3.1	Paramètres de simulation	108
3.2	LORM, $d = 3$ et $\gamma = 1/2$	109
3.3	LORM, $d = 3$ et $\gamma = 1/4$	110
3.4	Un argument sommaire.	114
4	Conclusion	115
5	Phénoménologie vitreuse du modèle L.O.R.M.	117
1	Phénoménologie MCT	117
1.1	Simulations numériques	118
1.2	Phénoménologie MCT.	118
2	Cavité	122
2.1	Simulations numériques	124
2.2	Dynamique vitreuse au sein d'une cavité	125
2.3	Taille des cavités et états mosaïques	128
3	Conclusion	130
	Conclusion	131
	Bibliographie	133

Introduction

Lorsque l'on abaisse la température d'un liquide, celui-ci connaît une transition de phase du premier ordre, la cristallisation. Si le refroidissement est suffisamment rapide (trempe), le liquide peut passer sa température de fusion T_m sans cristalliser, et entrer dans une phase surfondue métastable. Les taux de refroidissement expérimentalement accessibles varient typiquement entre 0.1 et 100 K/min . Passée la température de fusion, la viscosité augmente de manière spectaculaire, conduisant à un gel de la structure dans une structure hors d'équilibre et amorphe, *i.e.* sans ordre à grande distance. C'est ce que l'on appelle la transition vitreuse.

Ce gel intervient à une température T_g définie empiriquement comme étant la température à laquelle la viscosité $\eta(T)$ atteint 10^{12} Pa.s., soit un milliard de fois plus élevée que la viscosité du miel. Cette définition de T_g est purement conventionnelle, on aurait bien pu choisir 10^{14} comme 10^{10} Pa.s.. La température de gel est ainsi assez mal définie : à la différence d'une température critique, T_g dépend du protocole suivi (rapidité de la trempe)¹. C'est la signature du caractère hors d'équilibre du verre ainsi formé.

L'origine de ce ralentissement résiste toujours à une compréhension précise, il n'existe pas de théorie communément admise. Même la phénoménologie est toujours l'objet de débats. Puisque la théorie de la transition vitreuse reste encore à construire, il faut effectuer un choix *a priori* parmi les différentes approches possibles. Le travail qui suit est fortement inspiré par la théorie RFOT (*random first order theory*). Ce choix oriente en partie, la lecture de la phénoménologie. C'est pourquoi dans une première section, nous détaillons ce qui nous paraît être les résultats essentiels de la physique des liquides surfondus.

Cependant, une approche transversale des problèmes liés aux dynamiques lentes est apparue récemment. Le concept d'hétérogénéités dynamiques présente ainsi le double avantage d'être indépendant de la description théorique choisie et d'offrir des outils quantitatifs expérimentalement accessibles (susceptibilités non-linéaires). Ces objets ouvrent la voie à de nouveaux tests expérimentaux des diverses approches théoriques, comme nous l'esquisserons dans la deuxième section de cette introduction.

Les théories relatives à la transition vitreuse ont également connus de grands progrès au cours des deux dernières décennies. Que ce soit l'apparition des modèles cinétiquement contraints, ou la rencontre surprenante de la théorie des verres de spin et de la théorie des liquides, une clarification importante des enjeux théoriques est intervenue. Nous présentons succinctement dans une troisième section les grandes idées physiques présidant aux trois grandes théories concurrentes (RFOT, modèles cinétiquement contraints et frustration). La dernière section est enfin consacrée à expliciter l'objet et les objectifs de cette thèse.

1. Elle en dépend néanmoins faiblement. Par exemple, l'équation (empirique) de Bartenev-Ritland reliant T_g au taux de refroidissement, $r \equiv dT/dt$, donne une correction logarithmique : $1/T_g = a - b \ln r$.

1 Phénoménologie de la transition vitreuse.

De nombreuses expériences ont étudié la phénoménologie des liquides surfondus. On peut la résumer en trois grands résultats [10] : 1. l'augmentation non-arrhénienne de la viscosité, 2. l'absence d'une longueur de corrélation statique évidente, 3. des corrélations dynamiques non-triviales.

Si chacun de ces trois résultats sont des faits expérimentaux incontestables, la manière d'en rendre compte l'est beaucoup moins, et s'inscrit souvent dans une approche théorique donnée. L'objet de cette section est de donner une lecture claire de ce qui relève du constat ou de l'interprétation.

1.1 Viscosité.

L'augmentation de la viscosité est particulièrement brutale. La viscosité est approximativement reliée au temps de relaxation des fluctuations de densité par : $\eta(T) = G_\infty \tau_\alpha$, où G_∞ est le module élastique instantané. Quelques degrés au-dessus de T_m , le temps de relaxation τ_α des fluctuations de densité est de l'ordre de la picoseconde. A T_g , qui en pratique est proche de $2/3T_m$, le temps τ_α atteint la centaine de secondes, soit une augmentation de 14 ordres de grandeur. Cela est par exemple suffisant pour figer les ondes capillaires à la surface du liquide [154].

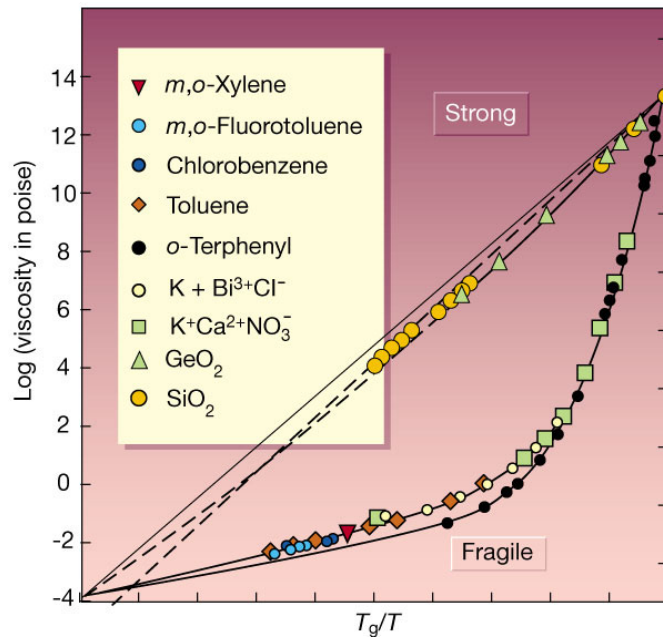


FIGURE 1 – Le diagramme d'Angell (*Angell plot*) de la viscosité de plusieurs liquides surfondus approchant leur température de gel T_g . Une ligne droite dans ce diagramme correspond à une relaxation arrhénienne. Ce diagramme présente deux régions : celle des liquides forts (arrhéniens) et celle des liquides faibles (non-arrhéniens). Ces deux régions ne sont pas abruptement séparées : de nombreux liquides de fragilité intermédiaire comblent l'écart entre ces deux régions. Extrait de [67].

De manière plus quantitative, on peut tracer l'évolution du logarithme de la viscosité en fonction de la température comme à la figure 1. Ce diagramme d'Angell [6] conduit à distinguer les liquides forts (comme la silice, le verre à vitre,...) des liquides fragiles (glycérol, toluène,...). Les liquides forts suivent une loi d'Arrhenius. L'image naïve est que

la relaxation passe par la rupture locale de liaisons chimiques. Pour relaxer, il faut donc sauter une barrière d'énergie activant ce processus. Les liquides fragiles suivent quant à eux une loi différente. Leur énergie d'activation dépend de la température, et croît quand la température décroît, la relaxation devient ainsi de plus en plus lente, et "sur-arrhénienne". L'augmentation des barrières d'énergie suggère que la relaxation des liquides faibles est un phénomène coopératif.

Fragilité

Une loi empirique permettant de rendre compte de cette augmentation est la loi de Vogel, Fulcher et Tamman [82, 157, 164] :

$$\tau_\alpha = \tau_0 \exp \left[\frac{DT_0}{T - T_0} \right] \quad (1)$$

Cette loi fait apparaître deux paramètres T_0 et D . La loi VFT prédit une divergence du temps de relaxation à T_0 , ce qui signifie qu'à cette température, il doit y avoir une transition de phase. Cette loi peut être associée à un phénomène (thermodynamique) coopératif (cf infra). Bien évidemment, l'observation de températures proches de T_0 est impossible : le temps de relaxation excède largement les temps de mesure accessibles.

Le paramètre D est quant à lui une mesure de la fragilité. Plus D est faible, plus le verre est fragile. Une définition de la fragilité communément admise est la suivante [128] :

$$m_A = \frac{d}{dT_g} \log \left(\frac{\eta(T)}{\text{Poise}} \right) \Big|_{T_g} \quad (2)$$

Cette définition ne fait aucune supposition sur la dépendance en température précise de la viscosité $\eta(T)$, elle mesure simplement l'écart à la loi d'Arrhenius. Cette définition donne $m_A = 17$ pour un liquide fort, et $m_A \simeq 100$ pour les liquides fragiles de la figure 1. Il est facile de montrer que la loi VFT conduit à la relation [37, 151, 166] :

$$m_A = 17 \frac{T_0}{T_g - T_0} \quad (3)$$

D'autres lois empiriques sont possibles pour rendre compte de l'évolution en température de la viscosité, par exemple la loi de Bässler [8] :

$$\tau_\alpha = \tau_0 \exp \left[K \left(\frac{T^*}{T} \right)^2 \right] \quad (4)$$

Cette loi suppose une divergence du temps de relaxation à température nulle, ce qui décrit une physique différente de la loi VFT.

Bien que l'augmentation de viscosité s'étale sur 14 ordres de grandeur, l'augmentation de $\ln \eta$ s'étend sur deux décades seulement. Les données expérimentales ne permettent donc pas de trancher clairement la loi qu'il convient de choisir. Néanmoins, d'autres mesures, plus indirectes, viennent appuyer la loi VFT.

Entropie d'excès

A T_g , la structure amorphe du liquide surfondu est gelée. Une interprétation possible est la suivante [85] : cette structure correspond à un minimum local d'un paysage d'énergie complexe, dont les minima sont séparés par des barrières. Lorsque la température est abaissée, l'énergie thermique n'est plus suffisante pour sauter les barrières, la façon, dont le paysage d'énergie est exploré, est modifiée. Dans cette image, on peut donc séparer d'un

Substance	T_0 (K)	T_K (K)
ortho-therphényl	202.4	204.2
2-Méthyl-hydrofurane	69.6	69.3
n-propanol	70.2	72.2
3-Bromo-pentane	82.9	82.5

FIGURE 2 – Comparaison entre les températures T_0 et T_K extraites des mesures de viscosité et d'entropie d'excès.

côté une relaxation rapide au sein d'un même minima et une relaxation lente en sautant les barrières séparant les différents minima. L'entropie est ainsi décomposée entre une entropie vibrationnelle et une entropie configurationnelle comptant tous les minima :

$$S_{liq}(T) = S_{vib}(T) + S_c(T) \quad (5)$$

Si l'on suppose que l'entropie vibrationnelle est proche de celle des solides, une mesure expérimentale de S_c est alors l'entropie d'excès $S_{exc}(T) = S_{liq} - S_{cri}$. Les mesures calorimétriques de l'entropie d'excès s'effectuent en notant que (voir la fig. 3) :

$$S_{exc}(T) = S_{liq} - S_{cri} = \Delta S_m - \int_T^{T_m} \left[\frac{C_{liq}(T')}{T'} - \frac{C_{cri}(T')}{T'} \right] dT' \quad (6)$$

où ΔS_m est l'entropie de fusion, c'est-à-dire la différence entre l'entropie du liquide et du solide à la température de fusion T_m , et $C(T)$ la chaleur spécifique. L'extrapolation du comportement de l'entropie d'excès aux basses températures montre que celle-ci s'annule à une température finie, la température de Kauzmann T_K suivant la loi (voir la fig 3) :

$$S_{exc}(T) = S_\infty \left(1 - \frac{T_K}{T} \right) \quad (7)$$

Empiriquement, on constate que cette température est voisine à quelques pourcents près de la température T_0 extraite de la loi VFT (voir tableau 2). Cette coïncidence remarquable argumente en faveur de la loi VFT, et d'une origine thermodynamique du ralentissement de la dynamique.

1.2 Absence de longueur statique divergente

Les transitions de phase thermodynamiques usuelles (cristallisation, ferromagnétisme,...) associent la divergence du temps de relaxation à la divergence d'une échelle longueur statique mesurée par exemple par la fonction de corrélation à deux points. Cette fonction est accessible expérimentalement dans des expériences de diffusion de rayonnements (X, neutrons,... [119]) au moyen du facteur de structure $S(\mathbf{q})$ défini par :

$$S(\mathbf{q}) = \left\langle \frac{1}{N} \delta \rho_{\mathbf{q}} \delta \rho_{-\mathbf{q}} \right\rangle \quad (8)$$

$$\delta \rho_{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} - \frac{N}{V} \delta_{\mathbf{q},0} \quad (9)$$

où $\delta \rho_{\mathbf{q}}$ désigne donc les composantes de Fourier des fluctuations (statiques) de densité. La figure 4 montre le facteur de structure typique d'un liquide surfondu passant la température de gel. La position et la largeur des pics de $S(q)$ donnent la distance moyenne entre une particule et ses proches voisins ainsi que leur nombre moyen. La forme de $S(q)$ n'évolue pas lorsque l'on passe T_g . Aucun indice d'une longueur de corrélation statique divergente n'apparaît.

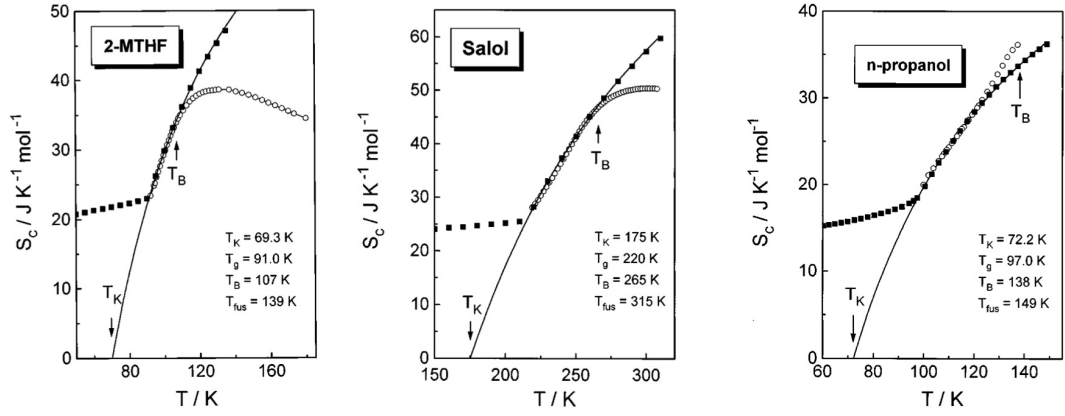


FIGURE 3 – Mesure de l'entropie d'excès $S_{exc}(T)$ pour différents composés. Les carrés noirs représentent les résultats obtenus par calorimétrie différentielle. On note que pour $T < T_g$, le liquide tombe hors d'équilibre. Si l'on extrapole l'entropie d'excès d'équilibre, celle-ci s'annule à T_K . Les cercles creux sont obtenus à partir des spectres de relaxation diélectrique en supposant que la loi VFT est vérifiée. Extrait de [148].

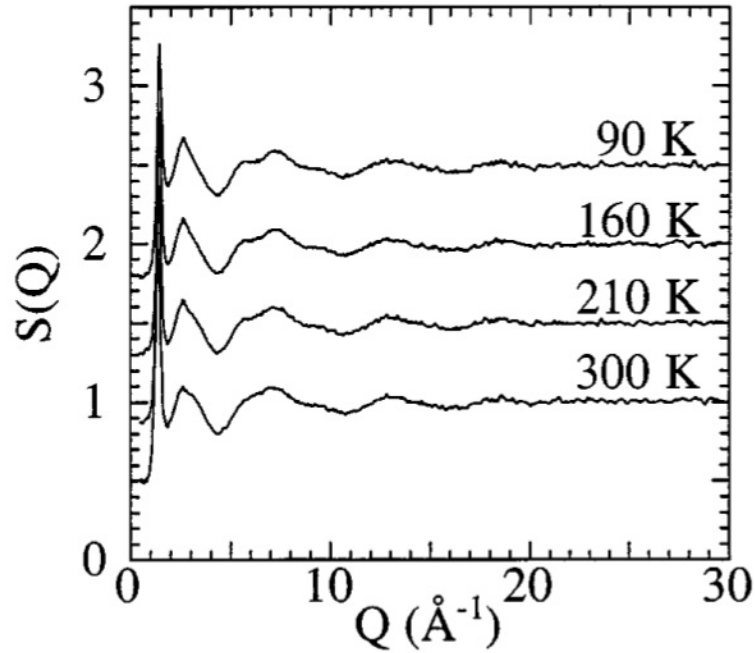


FIGURE 4 – Mesure du facteur de structure $S(q)$ du propylène glycol ($T_g = 160\text{K}$) par diffusion de neutrons pulsés. Afin d'être visibles, les courbes sont décalées suivant l'ordonnée. Aucune évolution structurale notable n'apparaît en abaissant la température. Extrait de [119].

1.3 Corrélations dynamiques

Les expériences de diffusion de neutrons donnent également accès aux fluctuations dynamiques de densité $\delta\rho_{\mathbf{q}}(t)$ au moyen de la fonction intermédiaire de diffusion :

$$F(\mathbf{q}, t) = \left\langle \frac{1}{N} \delta\rho_{\mathbf{q}}(0) \delta\rho_{-\mathbf{q}}(t) \right\rangle \quad (10)$$

$$= \mathcal{F}[\langle \delta\rho_{\mathbf{r}}(0) \delta\rho_{-\mathbf{r}}(t) \rangle] \quad (11)$$

Diverses $F(\mathbf{q}, t)$ sont représentées pour différentes températures sur la figure 5. Ces courbes montrent un premier régime, aux temps courts, de relaxation vers un plateau, puis un second régime de relaxation final caractérisé par une échelle de temps bien plus longue. L'apparition d'un plateau traduit l'existence de fluctuations de densité gelées sur des temps intermédiaires, mais qui peuvent relaxer à temps long au cours de la seconde relaxation, la relaxation α . Une image physique très courante pour décrire ce phénomène est celle de

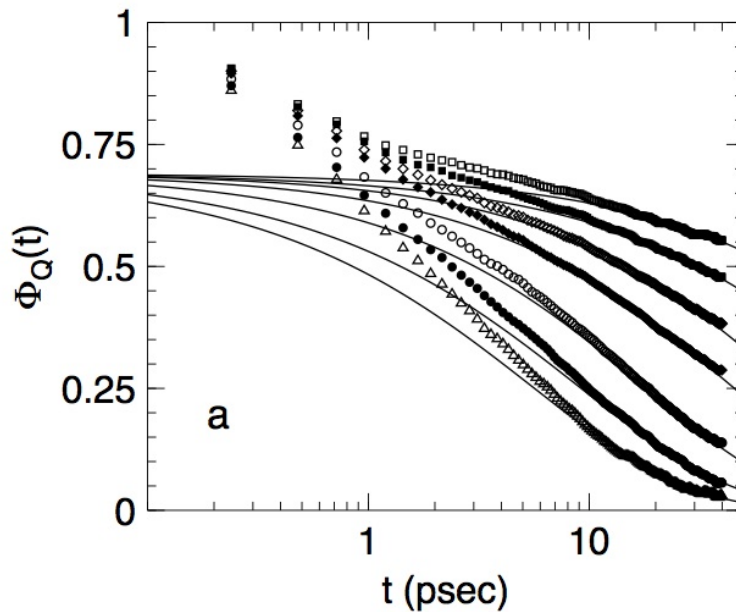


FIGURE 5 – Fonction intermédiaire de diffusion normalisée $\Phi_{\mathbf{q}}(t) = F(\mathbf{q}, t)/S(\mathbf{q})$ de l'orthoterphényl surfondu ($T_g = 243K$, $T_m = 329K$) obtenue par diffusion de neutrons. La température varie entre 313 et 400 K. La relaxation s'effectue en deux temps avec l'apparition progressive d'un plateau lorsque la température est abaissée. Extrait de [160].

l'effet de cage. Dans cette image, le régime de temps court est décrit par la relaxation d'une particule au sein d'une cage formée par ses proches voisins. La thermalisation de la particule dans cette cage explique l'existence d'un plateau. Enfin, la relaxation terminale est obtenue lorsque la particule s'échappe de sa cage. Cette image distingue deux dynamiques : une dynamique locale dans l'espace (la thermalisation de la particule) et une dynamique à longue distance (l'évasion de la particule). Néanmoins, cette description simple est un peu naïve : l'allongement du plateau traduit le fait que les différentes cages commencent à coopérer entre elles [21], et que la dynamique locale ne l'est pas tant.

Les expériences de neutrons ne peuvent être conduites que dans une zone de températures restreinte. L'étude des liquides surfondus repose beaucoup sur des mesures de spectroscopie diélectrique. Il s'agit de la mesure de la réponse d'un diélectrique (le liquide

surfondu) à un champ électrique oscillant. La susceptibilité diélectrique ainsi mesurée est reliée via des théorèmes de fluctuation-dissipation au temps de corrélation des fluctuations de polarisation. Il est généralement admis (et vérifié expérimentalement) que les différentes observables mesurées donnent une dépendance en température identique du temps de relaxation.

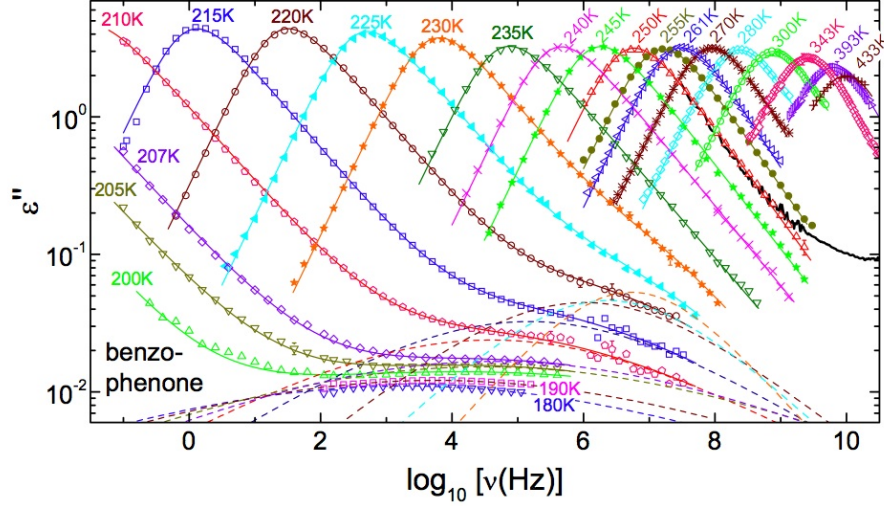


FIGURE 6 – Evolution en température de la susceptibilité diélectrique de la benzophénone mesurée sur environ 10 décades de temps. La dynamique ralentit de 5 décades en seulement 20K. Extrait de [140].

L'évolution en température de la partie imaginaire de la susceptibilité diélectrique $\epsilon''(\omega)$ est reportée à la figure 6 [140]. A haute température, celle-ci est bien représentée par la loi de Debye :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\Delta\epsilon}{1 + i\omega\tau_{\alpha}} \quad (12)$$

Cette loi correspond à une relaxation exponentielle en temps. Quand la température est abaissée, le spectre de relaxation s'écarte de cette loi. Il a été remarqué que dans cette zone, les données sont bien reproduites en temps par une loi exponentielle étirée : $\exp(-t/\tau_{\alpha})^{\beta}$. En fréquence, une loi couramment employée est la loi de Havriliak-Negami :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\Delta\epsilon}{(1 + (i\omega\tau_{\alpha})^{\alpha})^{\gamma}} \quad (13)$$

Cette loi généralise la loi de Debye. Les exposants α , β et γ ne sont pas universels : ils dépendent à la fois de la température et de la sonde dynamique employée. Malgré cela, cette loi empirique exprime le fait que la dynamique devient de plus en plus lente, et de moins en moins arrhénienne (Debye) quand la température baisse. Une corrélation empirique a été notée entre la fragilité et l'écart à la loi d'Arrhenius : plus un liquide est fragile, plus les spectres de relaxation sont larges [67].

2 Hétérogénéités dynamiques.

Si l'on observe le déplacement individuel des particules d'une simulation de sphères molles (voir la fig. 7), on constate qu'il existe des zones où ces particules sont particulière-

ment mobiles et d'autres où elles ne bougent que très peu. Cette répartition spatialement inhomogène des fluctuations temporelles est un exemple d'hétérogénéités dynamiques.

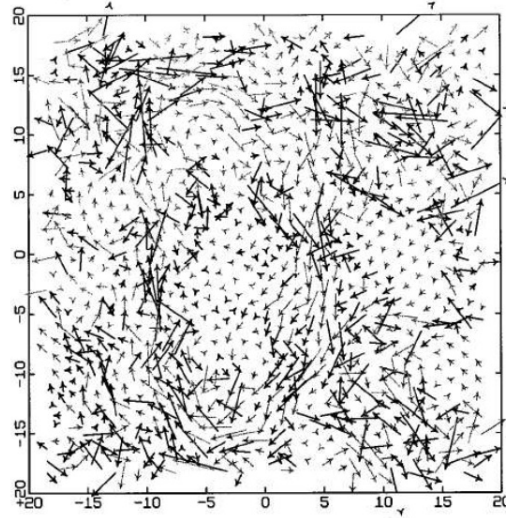


FIGURE 7 – Déplacements individuels des particules d'une simulation de sphères molles bi-dimensionnelles. Les flèches montrent le déplacement des particules sur une durée de dix fois le temps de relaxation τ_α . On constate clairement l'existence de particules beaucoup plus mobiles que d'autres ainsi que de corrélations spatiales. Extrait de [93].

La notion d'hétérogénéités dynamiques a été avancée pour donner une origine au caractère non-exponentiel de la relaxation d'un liquide surfondu. On peut, en effet, imaginer deux mécanismes différents pour expliquer ce phénomène. Le premier consiste à considérer que la relaxation est localement exponentielle, mais que le temps de relaxation varie dans l'espace. Par un effet de moyenne spatiale, la relaxation devient non-exponentielle. Le second considère que la relaxation est par essence complexe et non-locale. Si les deux mécanismes sont vraisemblablement à l'œuvre dans les liquides surfondus, le caractère spatialement hétérogène de la relaxation est désormais bien établi, grâce notamment à des expériences de résonance magnétique nucléaire [163].

2.1 Comment les mesurer ?

Récemment, la caractérisation de ces hétérogénéités a fait des progrès importants par l'introduction de nouvelles observables. Il est ainsi devenu clair que les fonctions de corrélation (dynamique) à quatre points donnent une mesure de ces hétérogénéités.

Considérons par exemple la fonction :

$$G_4(r, t) = \langle \delta\rho(0, 0)\delta\rho(0, t)\delta\rho(r, 0)\delta\rho(r, t) \rangle \quad (14)$$

Cette fonction mesure le degré de corrélation de la relaxation des fluctuations de densité de deux zones distantes de r . On peut associer à cette fonction de corrélation une susceptibilité dynamique $\chi_4(t)$:

$$\chi_4(t) \equiv N \left\langle \left(\frac{1}{V} \int d^3r \delta\rho(r, 0)\delta\rho(r, t) \right)^2 \right\rangle \quad (15)$$

$$= \rho \int d^3r G_4(r, t) \quad (16)$$

$\chi_4(t)$ mesure donc l'extension spatiale des corrélations dynamiques. S'il existe un temps typique des hétérogénéités dynamiques, $\chi_4(t)$ doit avoir un pic à cette valeur, la hauteur de ce pic donne une évaluation du volume corrélé. De manière naïve, en supposant que $G_4(\mathbf{r}, t) \sim \exp(-r/\xi)$, alors $\chi_4(t) \sim \xi^d$.

Si $\chi_4(t)$ est facile à mesurer dans une simulation numérique, ce n'est pas le cas dans une expérience. On peut, néanmoins, montrer que :

$$\chi_4(t) \geq \frac{kT^2}{C_p} \kappa_T(t)^2 \quad (17)$$

où la compressibilité κ_T est définie par :

$$\kappa_T(t) = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{V} \int d^3r < \delta\rho(r, 0) \delta\rho(r, t) > \Big|_{N,P} \quad (18)$$

En utilisant cette borne, il est possible d'avoir accès à une mesure expérimentale du volume de corrélation. En effet, des arguments théoriques ainsi que des simulations numériques détaillées montrent que $\kappa_T(t)$ donne une bonne estimation de $\chi_4(t)$. La figure 8 montre le résultat obtenu pour divers liquides surfondus. On constate que le nombre de molécules corrélées, $N_{corr,T}$ défini par :

$$N_{corr,T} = \sqrt{\frac{kT}{\Delta c_p}} \max_t \kappa_T(t), \quad (19)$$

croît de deux ordres de grandeurs quand $\ln \tau$ augmente de deux décades (Δc_p est la différence de chaleur spécifique entre le liquide surfondu et le cristal). L'évolution précise de $N_{corr,T}$ est en accord qualitatif avec plusieurs théories possibles de la transition vitreuse. La compréhension exacte de la relation entre cette échelle longueur et le temps de relaxation structural est un des enjeux essentiels de la théorie de la transition vitreuse.

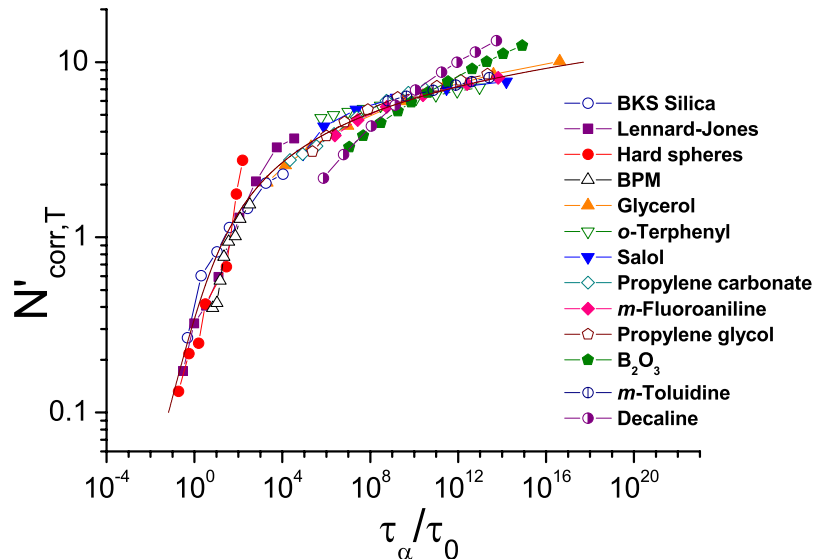


FIGURE 8 – L'évolution comparée de $N_{corr,T}$ et de τ_α pour différents types de liquides surfondus. $N_{corr,T}$ est mesuré en unités arbitraires ce qui explique des valeurs inférieures à 1. Figure extraite de [58].

2.2 Que doit-on expliquer ?

En résumé, les grandes questions que soulèvent l'étude de la phénoménologie vitreuse sont les suivantes [10] :

1. Quelle est l'origine de l'augmentation de la viscosité lorsque l'on approche de T_g ? Et pourquoi est-elle non-arrhénienne ?
2. Le concept de fragilité est-il pertinent ? En particulier, permet-il une description quantitative du comportement des autres observables (relaxation diélectrique,...) ?
3. Quelle est l'origine du lien entre dynamique (temps de relaxation) et thermodynamique (entropie d'excès) ?
4. La transition vitreuse est-elle un phénomène collectif ? S'agit-il d'une transition statique ou dynamique ?
5. Peut-on décrire quantitativement les fluctuations spatio-temporelles de la dynamique ? Quel est leur lien avec le gel vitreux ?
6. Existe-t-il une explication géométrique simple du ralentissement de la dynamique ?

3 Modèles théoriques

Pour répondre aux questions précédentes, plusieurs approches théoriques se sont développées. Il est cependant difficile de les départager : la transition vitreuse est un problème de longueurs intermédiaires. Si le temps de relaxation augmente de quatorze ordres de grandeur, son logarithme qui est la valeur pertinente n'augmente que d'une ou deux décades. Les échelles de longueurs sensibles aux fluctuations dynamiques sont faibles dans les zones expérimentalement accessibles : $\xi_{het}(T_g) \sim 10$. La description théorique s'en trouve compliquer, outre les prédictions asymptotiques, il faut également être capable de traiter précisément les effets présymptotiques.

Il n'est pas question ici de discuter ces différentes approches en grand détail. Il s'agit simplement de donner l'image physique s'en dégageant. Actuellement, trois grands scénarii existent. Le premier prend acte du lien entre fragilité et entropie d'excès. Il relie le ralentissement de la dynamique à l'existence d'une transition de phase non-conventionnelle à une température $T_K < T_g$. C'est la théorie RFOT. Cette théorie, qui est l'objet central de ce travail, fera l'objet d'une présentation plus approfondie au chapitre suivant.

Le second scénario est basé sur des modèles disposant d'une thermodynamique triviale. Le ralentissement est dû à des effets purement dynamiques, et notamment à l'existence de défauts coopératifs. Le lien entre fragilité et entropie d'excès est alors considéré comme accidentel. La dernière approche est celle de la frustration. Il s'agit d'une approche dans l'espace réel exprimant la propagation impossible d'un ordre localement préféré.

3.1 Random first order theory.

Cette théorie [107,109–112,124] est née de la rencontre de l'argument d'Adam-Gibbs [1], de la théorie de couplage de modes [86] et de la théorie des verres de spin [135]. Elle repose sur l'existence d'un paysage d'énergie particulièrement accidenté, caractérisé par de nombreux minima et points stationnaires évoluant avec la température, dans lesquels le système se perd.

L'étude détaillée des modèles désordonnés de spins comme le modèle à p spins de portée infinie a permis de donner corps aux considérations de paysage d'énergie, au moins à un niveau de champ moyen. La physique de ces modèles distingue deux températures : une température dynamique T_d , où le système perd son ergodicité et une température statique de transition de phase T_s , correspondant à la brisure spontanée d'une symétrie statique. Ces

deux températures sont reliées à l'existence d'états métastables et à leur nombre, compté au moyen d'une entropie configurationnelle $s_c(T)$ définie comme $s_c(T) = N^{-1} \ln \mathcal{N}(f)$ où $\mathcal{N}(f)$ est le nombre de points stationnaires d'énergie libre par spin f . La forme typique de cette entropie est représentée à la figure 9.

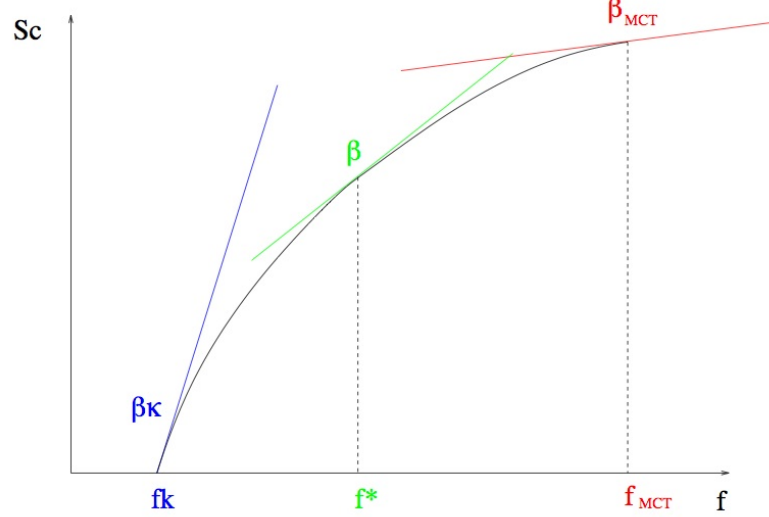


FIGURE 9 – Forme typique de l'entropie configurationnelle en fonction de la densité d'énergie libre f dans le domaine de température $T_K - T_{MCT}$ dans la théorie RFOT. [10].

Considérons les différents régimes de température. Pour $T > T_d$, le paysage d'énergie est simple. Il n'existe qu'un seul minimum (contribuant à l'énergie libre), celui du liquide. Cela se traduit par une entropie configurationnelle nulle. A T_d^- , l'entropie configurationnelle saute abruptement à une valeur finie, il apparaît un nombre exponentiel (dans la taille du système) d'états métastables. Quand la température passe en dessous de T_d , le système est piégé dans ces états métastables. Ceux-ci ont, dans ces modèles, une durée de vie infinie (la hauteur des barrières les séparant diverge avec la taille N du système), il y a une perte d'ergodicité.

Cette transition ergodique/non-ergodique est l'une des prédictions de la théorie de couplage de modes, une théorie auto-consistante des liquides. Le lien est en fait plus profond, puisque l'on peut montrer que les équations dérivées au sein de cette théorie sont valables (et même exactes) pour le modèle à p spins de portée infinie pour $T > T_d$. Leur solution montre l'apparition d'une relaxation complexe, avec l'apparition d'un plateau lorsque l'on approche de T_d , plateau qui devient infini à T_d . Cela explique que T_d est aussi souvent notée T_{MCT} . La perte d'ergodicité du système se traduit aussi dans la "thermodynamique". En restant confiné dans un état, la contribution de l'entropie configurationnelle à l'entropie globale disparaît : il y a un saut de chaleur spécifique (voir l'équation (6)). En fait, si l'on considérait la dynamique du système sur un temps infiniment long ce saut n'interviendrait qu'à T_K .

Pour mettre en lumière le rôle de ces états, on peut décomposer la fonction de partition sur ces états métastables α :

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta f_{\alpha}} = \int df e^{-\beta N f} e^{N s_c(f)} \quad (20)$$

Les points cols de cette intégrale donnent les états typiques du système. Quand $s_c(T)$ est non-nulle, c'est-à-dire entre T_K et T_{MCT} , les états dominants ont une énergie libre

vérifiant :

$$\left. \frac{\partial}{\partial f} s_c(f, T) \right|_{f=f^*} = \beta \quad (21)$$

Cette équation montre le remarquable équilibre entre densité d'énergie libre et entropie configurationnelle. Une discussion graphique est montrée à la figure 9.

Le dernier régime de température est atteint quand la température passe T_s . Le paysage d'énergie continue à évoluer. L'entropie configurationnelle $s_c(T)$ diminue et s'annule à T_s . Cette fois, le système passe par une transition de phase thermodynamique. Le lien avec l'entropie d'excès conduit à identifier T_s et T_K .

Il s'agit là de modèles de champ moyen, que reste-t-il de cette description en dimension finie ? Il n'existe pas de modèle de dimension finie simple où la théorie RFOT ait été vérifiée. Néanmoins, on peut avancer le scénario suivant : en dimension finie, la hauteur des barrières n'est plus infinie, elle est désormais gouvernée par une longueur de "nucléation" ξ_{RFOT} apparaissant au dessous de T_{MCT} et divergeant à T_K . Les états métastables acquièrent une durée de vie finie. Suivant la rapidité du refroidissement, ceux-ci vont tomber hors d'équilibre entre T_{MCT} et T_K . On s'attend donc à ce que T_g se situe entre T_{MCT} et T_K . Dans cette description, le liquide surfondu à l'équilibre est une superposition de domaines de taille linéaire ξ_{RFOT} . La balance entre le coût en tension de surface Υl^θ , $\theta \leq d-1$, et le gain d'entropie configurationnelle $s_c(T)l^d$ conduit à une longueur de fracturation :

$$\xi_{RFOT} = \left(\frac{\Upsilon(T)}{Ts_c(T)} \right)^{\frac{1}{d-\theta}} \quad (22)$$

Et donc à un temps associé :

$$\tau_\alpha \sim \exp \left(\frac{\Upsilon(T)}{Ts_c(T)} \right)^{\frac{\psi}{d-\theta}} \quad (23)$$

où l'exposant ψ caractérise la croissance de la hauteur des barrières $\sim \xi^\psi$. La discussion précise des valeurs des exposants est délicate, et sera abordée au chapitre suivant. Notons simplement que si $\psi = \theta$, on retrouve la loi de VFT en prenant une entropie configurationnelle s'annulant linéairement en T_K .

La force de la RFOT est de donner une vision d'ensemble de la transition vitreuse réconciliant à la fois sa dynamique et sa thermodynamique. Sa grande faiblesse est de ne pas disposer d'un modèle de dimension finie précis où ces prédictions puissent être testées.

3.2 Modèles à contraintes cinétiques.

Une autre approche est celle des modèles cinétiquement contraints. Le modèle le plus célèbre est sans doute celui de Kob et Andersen [114]. Il s'agit d'un modèle de particules sur réseau. A chaque nœud d'un réseau cubique, on associe une variable d'occupation n_i valant 0 ou 1. Ces variables ne sont pas couplées entre elles. Dans cette approche, la thermodynamique est donc triviale. Cependant, les particules suivent une règle dynamique : une particule ne peut sauter sur un site proche-voisin que si ce site est vide, mais l'on exige de plus que les sites qu'elle occupe avant et après le saut soient entourés de moins de m voisins ; m est un paramètre ajustable. Ce modèle met en pratique l'idée d'effet de cage : une particule avec un voisinage dense ne peut pas bouger.

Même si cette règle cinétique est purement locale, la diffusion des défauts dans ce modèle procède par des réarrangements collectifs [161]. Cela conduit à l'émergence d'échelles de longueurs dynamiques croissantes. Il est possible de quantifier très précisément les hétérogénéités dynamiques dans ces modèles. Ceux-ci montrent une dynamique semblable à

celle des liquides surfondus : relaxations non-exponentielles, découplages entre coefficient de diffusion et viscosité...

Ces modèles sont proches de l'idée de volume libre voulant que le ralentissement de la dynamique apparaît lorsque que le volume libre accessible à chaque particule devient supérieur à une valeur seuil. Dans les deux cas, l'identification au niveau moléculaire des lacunes est problématique. De même que l'identification de la valeur de m à choisir.

Par construction, ces modèles ne se préoccupent pas de la thermodynamique. Le lien entre T_0 et T_K devient accidentel, ce que l'expérience semble contredire. Ceci dit, l'interprétation des données expérimentales est loin d'être incontestable.

3.3 Frustration géométrique.

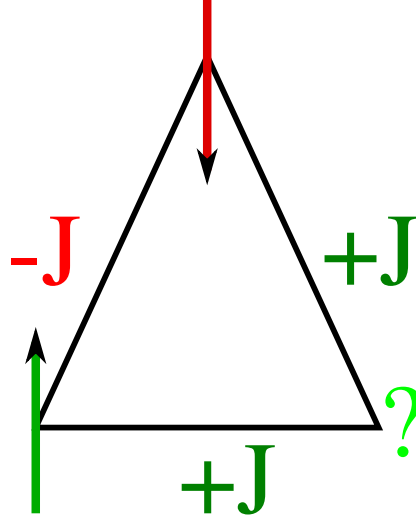


FIGURE 10 – Un exemple de frustration géométrique. Un des liens sera frustré, la minimisation de chacun des liens est impossible.

Le mot frustration désigne dans ce contexte l'impossibilité de minimiser simultanément tous les termes d'interactions de l'énergie d'un système, voir la figure 10. Dans le cas de la transition vitreuse, la frustration géométrique est attribuée à la compétition entre un ordre localement favorable et une contrainte globale prévenant un pavage complet de l'espace utilisant ce motif. Un exemple de modèle reprenant cette idée est le suivant [158] :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + K \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \quad (24)$$

Dans ce modèle, les interactions ferromagnétiques locales sont en compétition avec des interactions anti-ferromagnétiques coulombiennes à longue portée. De manière générique, la transition ferromagnétique intervenant à $T = T_c(K = 0)$ est fortement abaissée quand $K > 0$, et avec une discontinuité quand $K \rightarrow 0$, conduisant à l'idée de criticalité évitée. Dans

le cas de spins d'Ising, en $d = 3$, la transition ferromagnétique du deuxième ordre devient une transition du premier ordre entre une phase paramagnétique et une phase spatialement modulée. Dans l'intervalle $T_c(K) - T_c(0)$, le système est décrit par une mosaïque de domaines correspondant à l'ordre local, dont la taille augmente quand la température diminue [158]. Cela conduit à des relaxations non-exponentielles, des hétérogénéités dynamiques...

Si cette physique est particulièrement séduisante, aucun ordre local n'a jamais été mis en évidence dans les liquides surfondus moléculaires simples. Cela rend ce scénario fragile et d'application pratique mal aisée.

4 Plan de thèse

La théorie RFOT est la seule théorie permettant de rendre compte pleinement de la phénoménologie de la transition vitreuse que ce soit ses aspects thermodynamiques ou cinétiques. L'interaction mutuelle entre la théorie des verres de spins et la théorie de couplage de modes (MCT) a permis de bâtir une théorie de champ moyen solide. Cependant, peu de travaux ont été consacrés à son étude en dimension finie.

Deux obstacles majeurs ont longtemps empêché une étude complète : 1. l'absence d'un modèle de dimension finie compatible avec cette théorie et 2. l'absence d'observables aptes à tester précisément les prédictions émises par la RFOT.

Récemment des progrès substantiels ont été obtenus dans chacune de ces deux directions. L'introduction des fonctions de corrélation d'un point à un ensemble, conjointement à leur traduction phénoménologique (expérience de cavité), a ainsi donné un objet précis à étudier. Parallèlement, la modélisation a également progressé avec l'adaptation des interactions de Kač aux modèles désordonnés de spins. Ces interactions permettent d'interpoler continûment du champ moyen à la dimension finie. Néanmoins, un modèle satisfaisant, c'est-à-dire disposant de la bonne physique, analytiquement soluble et numériquement simulable, reste encore à trouver. L'objet de cette thèse est la recherche et l'étude d'un tel modèle.

Les modèles désordonnés de spins complètement connectés offrent plusieurs candidats de champ moyen possibles : le modèles à p spins, le modèle de Potts à q états, le modèle R.O.M. (*random orthogonal matrices*) par exemple. Pour des raisons techniques que nous aurons l'occasion d'expliquer plus en détail dans les chapitres suivants, nous avons choisis de nous concentrer sur le modèle R.O.M..

La définition et l'étude du modèle de dimension finie demande avant tout une bonne connaissance du modèle de champ moyen. Dans le cas du modèle R.O.M., si l'étude de sa thermodynamique a été en grande partie accomplie que ce soit analytiquement ou numériquement, sa dynamique n'a en revanche été que peu étudiée : les équations dynamiques de ce modèle sont inconnues et aucune étude numérique complète de sa dynamique d'équilibre n'existe. Bien que ce modèle soit supposé suivre une dynamique décrite par la théorie de couplage de modes, personne ne l'a jamais vérifié ! C'est pourquoi une étude numérique exhaustive du R.O.M. est rendue nécessaire. Cette thèse comporte ainsi deux grandes parties : une partie dédiée au champ moyen, au R.O.M., et une à sa contre-partie de dimension finie le modèle L.O.R.M. (*locally orthogonal random matrices*) que nous introduisons.

Avant de se lancer dans l'étude proprement dite de ces modèles, il nous a semblé indispensable de résumer dans le chapitre 1 ce qu'est la théorie RFOT. Nous avons essayé d'en donner une approche unifiée en insistant sur le lien fondamental entre théorie de couplage de modes et systèmes désordonnés. Nous montrons comment ce lien a permis de construire une théorie de champ moyen convaincante, et de préciser l'universalité de ses prédictions, mais également de proposer un scénario de dimension finie. Nous discutons en grand détail ce scénario afin de montrer tout l'intérêt de pouvoir disposer d'un modèle

précis que l'on puisse simuler numériquement.

L'étude du modèle R.O.M. est rassemblée dans les chapitres 2 et 3. Le chapitre 2 s'intéresse à la thermodynamique de ce modèle. Si les simulations numériques sont bien en accord avec l'étude analytique de ce modèle, elles illustrent comment la thermodynamique complexe de ce modèle le rend particulièrement difficile à simuler numériquement. Elle limite donc les tailles de systèmes accessibles.

L'étude de la dynamique du R.O.M. au chapitre 3 permet de sonder les limites de l'universalité des prédictions de la MCT. En effet, l'étude de systèmes de taille réduite demande un traitement rigoureux des corrections de taille finie, que ce soit des effets pré-asymptotiques particulièrement marqués, ou des effets plus subtils du désordre gelé (fluctuations de la température critique). Cela met en lumière le caractère qualitatif des prédictions MCT.

La définition d'un modèle de dimension finie utilisant le R.O.M. comme modèle de référence est un exercice délicat. L'origine de la dynamique vitreuse du R.O.M. tient à l'introduction du désordre gelé, et notamment à l'existence d'une contrainte orthogonale sur la matrice de couplage. Pour conserver cette physique, il faut trouver un moyen de rendre cette contrainte locale afin de doter le modèle d'une structure spatiale. Le chapitre 4 montre comment l'étude de la thermodynamique de ce modèle permet de résoudre cette difficulté et de définir un modèle de dimension finie, le modèle L.O.R.M..

Dans le chapitre 5, nous étudions la phénoménologie vitreuse de ce modèle. L'étude est en fait double. Premièrement, la dynamique d'équilibre permet de tester en dimension finie, cette fois, l'universalité de la théorie MCT. La comparaison avec l'étude du R.O.M. est ici riche, elle montre clairement qu'au-dessus de T_{MCT} , les prédictions du champ moyen sont vérifiées. En outre, il est possible d'aller observer directement les hétérogénéités dynamiques de ce modèle par la mesure directe des fonctions de corrélations à quatre points. Deuxièmement, il est aussi possible de tester l'existence des états mosaïques par la réalisation d'expérience de cavités, ce qui est l'une des questions centrales de la RFOT. Ce modèle est construit pour. Néanmoins, les tailles limitées des systèmes accessibles contraignent à une étude semi-quantitative.

Chapitre 1

R.F.O.T. :

Du champ moyen à la dimension finie.

La *Random First Order Theory* (RFOT) a connu récemment un développement important. Il n'existe malheureusement pas encore de revues détaillées et exhaustives. Cela tient sans doute au fait que cette théorie est constituée d'éléments très divers (théorie des liquides, théorie des verres de spins,...). Néanmoins, nous avons tiré un grand profit des revues existantes, et notamment [10, 40, 42, 56, 113, 124].

Au risque d'être un peu réducteur, la RFOT comprend deux volets inégaux. Une théorie de champ moyen bien établie au moins dans sa partie de haute-température, et une théorie de dimension finie encore largement heuristique. La théorie de champ moyen repose sur les succès à la fois expérimentaux et théoriques de la théorie de couplage de modes (MCT). Celle-ci permet de donner une description quantitative des liquides surfondus pour $T > T_{MCT}$ (voir par exemple [113]), au-delà cette théorie tombe en défaut en prévoyant une transition ergodique/non-ergodique qui n'est jamais observée.

À la fin des années 1980, il a été remarqué que certains modèles de verres de spins avaient une physique de haute-température parfaitement décrite par la théorie de couplage de modes. Ce pont formel a eu un double apport. Il a permis tout d'abord de proposer une théorie de champ moyen dans la région de températures en-dessous de T_{MCT} au sujet de laquelle la MCT restait peu diserte. Mais plus encore, il a permis de donner une image physique simple de la transition ergodique/non-ergodique en termes de paysages d'énergie. C'est cette discussion qui a permis de proposer un scénario pour le comportement des systèmes en dimension finie. Ce scénario est encore sujet à débats. Néanmoins, une reformulation récente lui donne enfin un cadre clair [25].

Le plan de ce chapitre est ainsi assez simple. En raison de son rôle centrale, la première section est consacrée à la présentation de la MCT et de ses prédictions. La deuxième section est consacrée à l'apport de l'analyse des systèmes désordonnés et notamment à l'image physique qu'il donne de la transition vitreuse. La troisième section détaille comment cette image physique a permis de revisiter la MCT et en particulier ses liens avec la notion d'hétérogénéité dynamique. Enfin la quatrième et dernière section est dédiée à la transposition de ces résultats de champ moyen à la dimension finie.

1 La théorie de couplage de modes.

La théorie de couplage de modes a gagné ces dernières années le statut d'une théorie de champ moyen de la transition vitreuse dans le régime des hautes températures ($T > T_d$).

C'est pourquoi dans cette section nous présentons en grand détail sa dérivation et ses prédictions [87, 113, 147]. Nous choisissons ici de garder la dérivation historique au moyen de l'opérateur de projection [86, 120] puisque une dérivation rigoureuse de théorie des champs est toujours manquante (même si de grands progrès ont été obtenus dans cette direction [5, 105]). Ce cadre nous permet de discuter naturellement les tentatives initiales d'amélioration de la MCT (e-MCT), et de montrer la nécessité d'une nouvelle approche pour décrire les systèmes vitreux réels.

1.1 Formalisme de l'opérateur de projection.

Le formalisme de l'opérateur de projection développé par Mori et Zwanzig [139, 168] est une reformulation de l'équation de Liouville en termes opératoriels dont le but est l'élimination des variables lentes au moyen d'un projecteur *ad hoc*. Considérons une observable quelconque $\mathcal{O}$ d'un système classique de N particules en interaction décrit par un hamiltonien $\mathcal{H}$. Son évolution est déterminée par l'équation de Liouville :

$$\partial_t \mathcal{O} = \{H, \mathcal{O}\} \quad (1.1)$$

Pour donner une structure hilbertienne à l'espace des phases, on définit l'opérateur de Liouville $\mathcal{L} \equiv 1/i \{H, \cdot\}$ et on lui associe le produit scalaire :

$$(\mathcal{M}|\mathcal{N}) \equiv \langle \delta \mathcal{M}^* \delta \mathcal{N} \rangle \quad (1.2)$$

où $\delta \mathcal{M} \equiv \mathcal{M} - \langle \mathcal{M} \rangle$, et les crochets désignent la moyenne thermodynamique canonique. Supposons maintenant que l'espace des phases soit composé d'un jeu de variables évoluant lentement dans le temps, rassemblées dans le vecteur $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_n)$, $n < N$. Les deux projecteurs orthogonaux $\mathcal{P}$ et $\mathcal{Q}$ définis par :

$$\mathcal{P}\mathcal{O} \equiv (\mathbf{X}(0)|\mathbf{X}(0))^{-1}(\mathbf{X}(0)|\mathcal{O})\mathbf{X}(0) \quad (1.3)$$

$$\mathcal{Q} \equiv 1 - \mathcal{P} \quad (1.4)$$

permettent formellement de récrire l'équation d'évolution du vecteur $\mathbf{X}$. L'évolution temporelle de $\mathbf{X}$ étant donnée par $\mathbf{X}(t) \equiv \exp(i\mathcal{L}t)\mathbf{X}(0)$,

$$d_t \mathbf{X}(t) = e^{i\mathcal{L}t}(\mathcal{P} + \mathcal{Q})i\mathcal{L}\mathbf{X}(0) \quad (1.5)$$

$$= i\mathbf{\Omega}\mathbf{X}(t) + i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathbf{X}(0) \quad (1.6)$$

Dans cette dernière équation, la matrice des fréquences $i\mathbf{\Omega} \equiv (\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}, i\mathcal{L}\mathbf{X})$ décrit une évolution au sein du sous-espace engendré par $\mathbf{X}(t)$; l'effet des variables rapides est quant à lui complètement caché dans le second terme. Ce second terme peut se scinder en deux parties : une première partie décrivant l'évolution des variables rapides dans le sous-espace orthogonal à $\mathbf{X}$, une seconde partie mêlant variables lentes et rapides. Pour ce faire, on a recours à l'identité suivante :

$$\exp(i\mathcal{L}t) = \exp(i\mathcal{Q}\mathcal{L}t) + \exp(i\mathcal{L}t)i \int_0^t du e^{-i\mathcal{L}u} \mathcal{P}\mathcal{L}e^{i\mathcal{Q}\mathcal{L}u} \quad (1.7)$$

Ainsi, en introduisant une force "fluctuante", orthogonale à $\mathbf{X}(t)$:

$$f(t) \equiv e^{i\mathcal{Q}\mathcal{L}t}i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathbf{X}(0) \quad (1.8)$$

on est ramené à :

$$d_t \mathbf{X}(t) = i\mathbf{\Omega}\mathbf{X}(t) - \int_0^t \mathbf{M}(t)\mathbf{X}(t-u) + f(t) \quad (1.9)$$

où l'on a introduit la fonction mémoire $\mathbf{M}(t)$:

$$\mathbf{M}(t) = (\mathbf{X}(0)|\mathbf{X}(0))^{-1}(f(0)|f(t)). \quad (1.10)$$

Cette fonction couple les différents modes entre eux. L'équation (1.9) est une généralisation de l'équation de Langevin habituelle. L'équation d'évolution de la matrice de corrélation $\mathbf{C}(t) \equiv \langle \mathbf{X}(t)\mathbf{X}(0) \rangle$ s'en suit immédiatement ($\langle f(t) \rangle = 0$) :

$$d_t \mathbf{C}(t) = i\Omega \mathbf{C}(t) - \int_0^t \mathbf{M}(t-u) \mathbf{C}(t-u) \quad (1.11)$$

La décomposition obtenue bien que simple est exacte. Cependant, toute la difficulté du problème réside dans le calcul, même approché de la fonction mémoire. L'introduction de la fonction mémoire dans (1.11) lui donne une structure identique à l'équation de Schwinger-Dyson auto-consistante. $M(t)$ joue un rôle identique à la *self-energy*. Cette remarque établit un lien entre formalisme de l'opérateur de projection et théorie des champs.

Le formalisme de Mori-Zwanzig est très général. Il dépasse le cadre de la transition vitreuse. Il a notamment permis de nombreux progrès dans l'étude des phénomènes critiques et dans la théorie du transport [31, 73, 104].

1.2 La théorie de couplage de modes (M.C.T.) des liquides surfondus.

L'application du formalisme de Mori-Zwanzig pose deux problèmes : 1. identifier un jeu complet de variables lentes, 2. trouver une forme opérationnelle de la fonction mémoire. L'objet de ce paragraphe est de décrire la théorie standard des liquides surfondus, et d'en présenter les principales prédictions quantitatives.

Variables lentes.

Dans un verre, la structure se fige lorsque l'on abaisse la température. Les fluctuations de la densité sont donc des variables lentes de choix. Plus précisément, dans le cas d'un liquide surfondu classique, le hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \mathbf{p}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (1.12)$$

L'espace des phases est ainsi composé des $6N$ positions et impulsions. Les variables lentes associées aux positions ne sont autres que les composantes de Fourier des fluctuations de densité $\delta\rho_{\mathbf{q}}(t)$:

$$\delta\rho_{\mathbf{q}}(t) \equiv \sum_{j=1}^N \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j(t)) - (2\pi)^d \rho \delta(\mathbf{q}), \quad (1.13)$$

les variables lentes associées aux impulsions étant données par les modes de Fourier du courant longitudinal $j_{\mathbf{q}}$, puisque par définition ceux-ci sont liés aux modes des fluctuations de densité :

$$i|q|j_{\mathbf{q}}(t) \equiv i\mathbf{q} \sum_{j=1}^N \frac{1}{m} \mathbf{p}_j(t) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j(t)) = d_t \rho_{\mathbf{q}}(t). \quad (1.14)$$

Le vecteur $\mathbf{X}(t)$ est donc donné par $(\delta\rho_{\mathbf{q}}(t), j_{\mathbf{q}}(t))$. L'application du formalisme de Mori-Zwanzig conduit alors aux équations d'évolution des différents corrélateurs. Par exemple,

la fonction de corrélation densité-densité $C(\mathbf{q}, t)$ est donnée par :

$$d_{tt}C(\mathbf{q}, t) + \frac{\mathbf{q}^2 T}{mC(\mathbf{q}, 0)}C(\mathbf{q}, t) + \frac{m}{NT} \int_0^t du M(\mathbf{q}, u) d_u C(\mathbf{q}, u) = 0 \quad (1.15)$$

$$M(\mathbf{q}, t) = \langle R_{-\mathbf{q}}(0) R_{\mathbf{q}}(t) \rangle \quad (1.16)$$

$$R_{\mathbf{q}}(t) \equiv d_t j_{\mathbf{q}}(t) - i \frac{|\mathbf{q}| T}{mC(\mathbf{q}, 0)} \delta \rho_{\mathbf{q}}(t) \quad (1.17)$$

où $\langle . \rangle$ désigne toujours la valeur moyenne canonique.

Factorisation de couplage de modes.

De manière générale, la fonction de mémoire $M(\mathbf{q}, t)$ a deux contributions : la première, triviale, vient des variables rapides, elle est locale en temps (comparée aux échelles de temps des variables lentes), la seconde est une fonction des variables lentes fortement non-locale en temps. C'est cette seconde part qui doit faire l'objet d'un schéma d'approximation idoine. En remarquant que l'expression de $R_{\mathbf{q}}(t)$ fait intervenir $d_t \mathbf{p}_i \simeq \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} \delta \rho_{-\mathbf{k}} \delta \rho_{\mathbf{k}} (\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{k})$, on est tenté de rechercher $M(\mathbf{q}, t)$ sous la forme d'un noyau quadratique [86, 120] :

$$M(\mathbf{q}, t) \propto \int_{\mathbf{k}} V^{(2)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) C(\mathbf{q} - \mathbf{k}, t) C(\mathbf{k}, t) \quad (1.18)$$

Plus précisément, et sans plus de justification, l'opérateur d'évolution $\exp(i\mathcal{Q}\mathcal{L}t)$ de l'équation (1.7) est remplacé par $\mathcal{R} \exp(i\mathcal{L}t) \mathcal{R}$, le projecteur $\mathcal{R}$ étant défini comme :

$$\mathcal{R} \equiv \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} (\delta \rho_{\mathbf{k}_1} \delta \rho_{\mathbf{k}_2} | \delta \rho_{\mathbf{k}_3} \delta \rho_{\mathbf{k}_4})^{-1} (\delta \rho_{\mathbf{k}_3} \delta \rho_{\mathbf{k}_4} | .) \delta \rho_{\mathbf{k}_1} \delta \rho_{\mathbf{k}_2} \quad (1.19)$$

L'utilisation de cette procédure conduit au résultat suivant :

$$M(\mathbf{q}, t) = M_0 \delta(t) + \frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{\mathbf{k}} |V(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \mathbf{k})|^2 C(\mathbf{q} - \mathbf{k}, t) C(\mathbf{k}, t) \quad (1.20)$$

$$V(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \mathbf{k}) = \frac{\rho T}{mq^2} (\hat{\mathbf{q}} [\mathbf{k} c(k) + (\mathbf{q} - \mathbf{k}) c(|\mathbf{q} - \mathbf{k}|)]) \quad (1.21)$$

où $c(q)$ est la fonction de corrélation directe donné par $(1 - 1/C(k, 0))/\rho$. Le jeu d'équations (1.15) et (1.21) ne dépend plus ainsi que de quantités statiques, mesurables. Il constitue une véritable théorie *ab initio* de la transition vitreuse. On peut récrire (1.15) en introduisant une transformation de Laplace :

$$\hat{C}(\mathbf{q}, z) \equiv \int_0^\infty dt e^{-zt} C(\mathbf{q}, t) \quad (1.22)$$

$$\frac{T \hat{C}(\mathbf{q}, z)}{C(\mathbf{q}, 0) - z \hat{C}(\mathbf{q}, z)} = \frac{\rho C(\mathbf{q}, 0)}{16\pi^3 q^2} \hat{M}(\mathbf{q}, z) \quad (1.23)$$

La transition vitreuse idéale.

La résolution des équations (1.15) et (1.21) définit ce qui est souvent (à tort) appelée la transition vitreuse idéale. Formellement, l'équation (1.15) décrit des oscillateurs harmoniques amortis dont le coefficient d'atténuation dépend du temps et de la variable dynamique elle-même. L'expression (1.21) de la fonction mémoire montre que si le facteur de structure $C(q, 0)$ devient de plus en plus piqué autour d'une valeur particulière q_0 ¹, le

1. On peut considérer le cas schématique où : $C(q, 0) = 1 + C_0 \delta(q - q_0)$. Dans ce cas, les prédictions des équations de couplage de modes (transition ergodique/non-ergodique, relations entre exposants, superposition temps-température,...) sont identiques à celles présentées dans ce paragraphe (voir la section 2.1).

vertex $V^{(2)}$ également, et donc pour ce vecteur d'onde l'amortissement augmente, ce qui empêche la relaxation des fluctuations de densité.

La forme exacte des solutions de l'équation (1.15) n'est connue que numériquement. Elle montre une relaxation en deux étapes avec l'apparition d'un plateau aux temps intermédiaires (fig. 1.1). Avant de détailler chacun des régimes, il est intéressant d'étudier la valeur asymptotique de la fonction de corrélation $C(\mathbf{q}, \tau)$. On a coutume de définir le paramètre *non-ergodique* $f_{\mathbf{q}}$ par :

$$f_{\mathbf{q}} \equiv \frac{1}{C(\mathbf{q}, 0)} \lim_{t \rightarrow \infty} C(\mathbf{q}, t) \quad (1.24)$$

Qui au sein de la M.C.T est donc donné par (cf éq. (1.15) et (1.21)) :

$$\frac{f_{\mathbf{q}}}{1 - f_{\mathbf{q}}} = \rho \frac{C^2(\mathbf{q}, 0)}{2\mathbf{q}^2} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} |V(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \mathbf{k})|^2 C(\mathbf{q}, 0) C(\mathbf{q} - \mathbf{k}, 0) f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q} - \mathbf{k}} \quad (1.25)$$

La seule inconnue restante est alors le potentiel d'interaction. La résolution numérique de cette équation dans le cas de potentiels de sphères dures ou de Lennard-Jones a montré l'existence de deux phases : une phase ergodique pour les hautes températures où $f_{\mathbf{q}}$ s'annule, c'est-à-dire que la fonction de corrélation s'annule à temps infini, et d'une phase non-ergodique où $f_{\mathbf{q}}$ saute à une valeur finie, la fonction de corrélation ne s'annule jamais : il se développe un plateau infini. Il ne s'agit pas ici d'une simple transition liquide-solide puisque dans le cas d'un solide idéal $f_{\mathbf{q}} = 0$. Cette transition est caractérisée par une température T_d à partir de laquelle le temps de relaxation croît au-delà de n'importe quelle borne. On peut ainsi montrer que le temps τ_{α} pour s'échapper du plateau (secteur III de la figure 1.1) vérifie pour $T > T_d$:

$$\tau_{\alpha} \propto \left(\frac{1}{T - T_d} \right)^{\gamma} \quad (1.26)$$

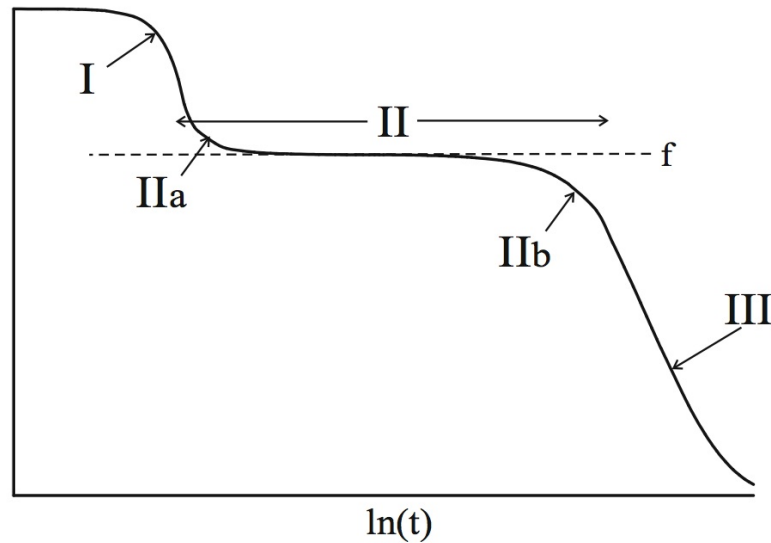


FIGURE 1.1 – Forme typique d'un corrélateur solution des équations M.C.T. dans la phase ergodique : la relaxation s'effectue en deux étapes avec l'apparition d'un plateau. Extrait de [147].

Reprenons les différents secteurs montrés à la figure 1.1. Le premier régime (secteur I) est une relaxation initiale correspondant aux degrés de liberté rapides.

Le secteur II est appelé relaxation β . Dans ce régime, la fonction de corrélation $C(\mathbf{q}, t)$ est gouvernée par une fonction universelle $G(t)$ telle que : $C(\mathbf{q}, t) = f_{\mathbf{q}}C(\mathbf{q}, 0) + c_{\mathbf{q}}G(t)$. $G(t)$ peut s'écrire comme :

$$G(t) = \epsilon^{1/2} g_{\pm} \left(\frac{t}{\tau_{\beta}(\epsilon)} \right) \quad (1.27)$$

en définissant $\epsilon \equiv (T - T_d)/T_d$ et $\tau_{\beta}(\epsilon) \propto \epsilon^{1/2a}$ la position du plateau. L'indice $\pm$ de la fonction d'échelle $g_{\pm}$ donne la position par rapport à T_d . En utilisant l'équation d'évolution de $C(\mathbf{q}, t)$, on voit que la fonction d'échelle $g_{\pm}$ est solution de :

$$\mp z^{-1} + z g_{\pm}^2(z) + i\lambda[V^{(2)}] \int_0^{\infty} e^{izt} g_{\pm}^2(t) dt = 0 \quad (1.28)$$

La forme analytique précise de $g_{\pm}$ n'est pas connue. Néanmoins, près du plateau, elle peut s'exprimer au moyen de lois de puissance. On distingue deux régimes,

– l'approche du plateau (secteur II a de la figure 1.1) correspondant à $t \ll \tau_{\beta}(\epsilon)$ où

$$g_{\pm}(t) \propto \left(\frac{t}{\tau_{\beta}(\epsilon)} \right)^{-a}$$

– et la sortie du plateau (secteur II b de la figure 1.1), ou régime β tardif, correspondant

$$\text{à } \tau_{\beta}(\epsilon) \ll t \ll \tau_{\alpha}, \text{ dans lequel } g_{-}(t) \propto \left(\frac{t}{\tau_{\beta}(\epsilon)} \right)^b$$

Les exposant a et b ne sont pas universels : ils dépendent à la fois du potentiel utilisé, de la forme exacte des équations de couplage de modes, et même faiblement de la température. Cependant, ils doivent satisfaire :

$$\frac{\Gamma^2(1+b)}{\Gamma(1+2b)} = \frac{\Gamma^2(1-a)}{\Gamma(1-2a)} = \lambda \quad (1.29)$$

Le secteur III est celui de la relaxation finale, la relaxation α . Dans ce régime, caractérisé par $t \gg \tau_{\alpha}$, la théorie prévoit une superposition temps-température qui s'exprime par :

$$C(t, T) = \hat{C} \left(\frac{t}{\tau_{\alpha}(T)} \right) \quad (1.30)$$

La forme de la fonction d'échelle $\hat{C}$ est empiriquement approchée par une exponentielle étirée, ou loi de Kohlrausch-Williams-Watt (KWW) :

$$\hat{C}(x) = A \exp(-Bx^{\beta}) \quad (1.31)$$

Le recollement des régimes α et β lie les exposants a , b et γ par une nouvelle relation :

$$\gamma = \frac{1}{2a} + \frac{1}{2b} \quad (1.32)$$

Nous reviendrons plus en détail sur l'universalité des prédictions asymptotiques de la MCT au chapitre 3. Mentionnons simplement que ces prédictions ne sont valables que pour $\epsilon \ll 1$.

Splendeurs et misères de la M.C.T.

La MCT a fait l'objet de nombreux tests expérimentaux (verres structuraux, polymères, colloïdes,...) et numériques (verre de Lennard-Jones, sphères dures et molles,...). Il en ressort :

1. Une description qualitative de la transition vitreuse : séparation de la relaxation entre un régime de temps courts et de temps longs, apparition d'un plateau. L'ajustement des solutions des équations de couplage de modes à des données expérimentales est devenu un passage obligé de l'étude expérimentale des liquides surfondus (voir par exemple la figure 5 [160].)
2. Et des succès quantitatifs dont les propriétés d'universalité de la relaxation β ainsi que la superposition temps-température prévue dans le régime α [84, 113], comme montré à la figure 1.2.

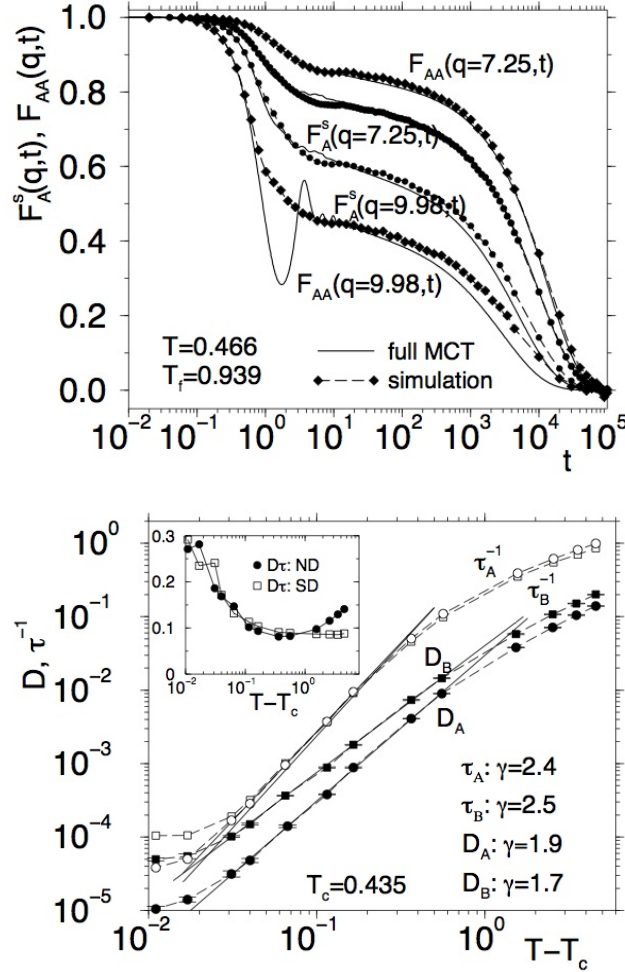


FIGURE 1.2 – *En haut* : Facteurs intermédiaires de structure cohérents et incohérents de particules d'un mélange binaire de particules interagissant par un potentiel de Lennard-Jones. Les losanges sont les résultats des simulations numériques, les lignes pleines correspondent à la résolution des équations MCT. On notera le très bon accord général. *En bas* : Constante de diffusion d'une particule marquée et temps de relaxation α pour le même mélange binaire en fonction de l'écart à la température dynamique (dénotée ici T_c). Les lois de puissance ne sont valables que pour les premières décades. Extrait de [113].

Néanmoins, de nombreuses critiques peuvent être formulées :

1. La critique la plus sévère est que la MCT prévoit une brisure d'ergodicité qui n'est pas observée expérimentalement (voir la figure 5). Le temps de relaxation des verres augmente brutalement mais reste fini aux valeurs de T_d obtenues sur les systèmes

réels. La valeur elle-même de T_d est discutable : dans le cas des mélanges binaires de Lennard-Jones de la figure 1.2, les équations de couplage de modes prévoient $T_d = 0.92$ quand les simulations permettent d'extraire $T_d \simeq 0.435$. Quelle est l'origine physique de cette absence de brisure d'ergodicité ?

2. Le temps de relaxation d'un verre structural comme d'un colloïde ne suit une loi de puissance que sur les toutes premières décades. Par exemple, la figure 1.2 (bas) montre le résultat dans le cas d'un mélange binaire de Lennard-Jones.
3. La théorie est incapable de faire des prédictions sur la phase de basse température.
4. Le calcul approché de la fonction mémoire est pour le moins obscur, et ne permet pas de générer des corrections systématiques pour améliorer la théorie.

1.3 Une extension de la M.C.T. ?

Si l'on reprend l'équation 1.14, le courant de densité $j(\mathbf{q}, t)$ est une variable lente parce qu'il est lié par une équation de conservation aux fluctuations de densité. Cet argument s'applique à toute quantité reliée aux fluctuations de densité. Cette approche a été développée initialement par Das & Mazenko [59] dans un formalisme de théorie des champs utilisant une représentation à la Martin-De Siggia-Rose [127] des équations d'hydrodynamique fluctuante non-linéaire, puis reformulée dans le formalisme de Mori-Zwanzig par Götze & Sjögren [88]. Cette théorie est connue comme la théorie de couplage de modes étendue (e-MCT).

Pour tenir compte de l'ensemble des lois de conservation, on a intérêt à introduire la densité d'espace des phases d'une particule se déplaçant avec une impulsion $\mathbf{p}$ le long d'une trajectoire $\mathbf{r}(t)$, ainsi que sa transformée de Fourier :

$$\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_j(t)) \quad (1.33)$$

$$\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_j(t)) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j(t)} \quad (1.34)$$

Afin d'exprimer facilement les relations de conservation, (1.34) est projetée sur les polynômes d'Hermite :

$$\phi_{\mathbf{p}}^{\nu}(\mathbf{q}, t) \equiv \sum_{\mathbf{p}} H_{\nu}(\mathbf{p}) \phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}, t) \quad (1.35)$$

$$\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{(2\rho\pi mT)^{d/2}} \sum_{\nu} H_{\nu}(\mathbf{p}) \phi_{\mathbf{p}}^{\nu}(\mathbf{q}, t) e^{-\frac{\mathbf{p}^2}{2mT}} \quad (1.36)$$

Par exemple, $H_0 = \sqrt{\rho}$ et $\phi_{\mathbf{p}}^0(\mathbf{q}, t) = \rho(\mathbf{q}, t)$, les courants sont associés aux indices 1, 2 et 3 ($H_{1,2,3} = p_{1,2,3} \sqrt{\rho/mT}$ et $\phi_{\mathbf{p}}^1(\mathbf{q}, t) = j(q, t)$, 2, 3 donnant les courants transverses), etc. Cette construction amène à s'intéresser à des corrélateurs du type :

$$C_{\nu\mu}(\mathbf{q}, t) = \langle \phi_{\mathbf{p}}^{\nu}(-\mathbf{q}) \phi_{\mathbf{p}}^{\mu}(\mathbf{q}, t) \rangle, \quad (1.37)$$

régis par des équations généralisant celles de la MCT standard. En prenant toujours une fonction mémoire quadratique :

$$\partial_t C_{\nu\mu}(\mathbf{q}, t) = \sum_{\alpha} \Omega_{\nu\alpha}(\mathbf{q}) C_{\alpha\mu}(\mathbf{q}, t) - \int_0^t M_{\nu\alpha}(\mathbf{q}, u) \partial_u C_{\alpha\mu}(\mathbf{q}, t-u) \quad (1.38)$$

$$M_{\nu\alpha}(\mathbf{q}, t) = \sum_{\nu_1 \alpha_1 \nu_2 \alpha_2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} V_{\nu\alpha}^{\nu_1 \alpha_1 \nu_2 \alpha_2}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, t) C_{\nu_1 \alpha_1}(\mathbf{k}_1, t) C_{\nu_2 \alpha_2}(\mathbf{k}_2, t) \quad (1.39)$$

Ces équations montrent bien le couplage entre les différentes variables conservées. Par exemple, la prise en compte des courants transverses permet de montrer que pour le corrélateur densité-densité (C_{00}), l'équation (1.23) devient :

$$\frac{T\hat{C}_{00}(\mathbf{q}, z)}{C_{00}(\mathbf{q}, 0) - (z + \Delta(\mathbf{q}))\hat{C}_{00}(\mathbf{q}, z)} = \frac{\rho C_{00}(\mathbf{q}, 0)}{16\pi^3 q^2} \hat{M}(\mathbf{q}, z) \quad (1.40)$$

On peut alors démontrer que si $\Delta(\mathbf{q})$ est non-nul, le paramètre non-ergodique $f_{\mathbf{q}}$ est nul. La brisure d'ergodicité disparaît. De plus, une nouvelle échelle de temps $1/\Delta(\mathbf{q})$ apparaît, discriminant un régime de MCT pur aux petits temps, d'un régime de couplage aux courants transverses entraînant la sortie du plateau.

La MCT étendue a été critiquée à plusieurs reprises [5, 41, 129]. Une attention particulière a été portée sur le fait que la MCT étendue viole les relations de fluctuation-dissipation [5, 129]. Ces critiques n'ont pas manqué de noter également que ce scénario fait une prédiction forte : la restauration de l'ergodicité à temps long est due à l'effet des variables conservées. Ainsi, dans le cas de la dynamique brownienne, elle serait due à la conservation de la densité alors que dans la dynamique newtonienne, elle résulterait de la conservation de l'impulsion et de l'énergie. Cependant aucune simulation numérique [13, 84, 156] ne montre une sensibilité au type de dynamique utilisée. L'origine physique de l'évitement de la transition ergodique/non-ergodique dans les systèmes physiques réels est à chercher ailleurs.

2 L'apport des systèmes désordonnés.

Quelque soit l'approche utilisée (formalisme de Mori-Zwanzig ou théorie des champs), la MCT reste une théorie très générale reposant sur des approximations parfois obscures. L'étude de modèles analytiquement solubles exhibant une dynamique similaire a permis un progrès sensible dans la compréhension de cette théorie, et surtout de lui donner une interprétation simple en termes de paysages d'énergie.

Nous présentons dans cette section le lien précis entre la MCT et les modèles de verre de spins généralisés (ici le modèle à p spins) [40], qui vérifient de manière exacte les équations de couplage de modes, au moins dans leur version schématique. Ce lien étant établi, nous montrons comment l'analyse détaillée au sein de l'approche TAP de ces modèles donne une image physique simple de la brisure d'ergodicité, et permet de réconcilier approche thermodynamique de la transition vitreuse et MCT. Enfin, nous discutons l'universalité surprenante de la MCT en faisant le lien avec la théorie des répliques de Parisi.

2.1 Lien avec la théorie des liquides : MCT schématique.

Le modèle à p spins est défini par [68, 69] :

$$\mathcal{H} = - \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} , \quad (1.41)$$

Les couplages $J_{i_1 \dots i_p}$ sont des variables aléatoires gaussiennes indépendantes de moyenne nulle et de variance $p!/2N^{p-1}$. Dans le cas où les spins sont des variables continues vérifiant une contrainte sphérique [54], il est possible d'étudier la dynamique de ce modèle grâce au formalisme de Janssen-de Dominicis [61, 96]. Ce modèle montre une analogie surprenante avec la théorie de couplage de modes. En effet, si l'on considère les équations de Langevin, en introduisant la contrainte sphérique $\mu(t)$ [51, 108] :

$$\partial_t S_i(t) = - \frac{\delta}{\delta S_i} \mathcal{H} - \mu(t) S_i(t) + \eta_i(t) \quad (1.42)$$

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2T \delta_{ij} \delta(t - t') \equiv D_0(t, t') \quad (1.43)$$

Cette équation peut se récrire, en prenant par exemple la prescription d'Itô (le déterminant est alors constant et absorbé dans la mesure) [62, 65] :

$$1 = \overline{\langle 1 \rangle} = \overline{\int \mathcal{D}S_i(t) \mathcal{D}\eta_i(t) \mathbb{P}(\eta_i) \delta\left(\partial_t S_i(t) + \frac{\delta}{\delta S_i} \mathcal{H} + \mu(t) S_i(t) - \eta_i(t)\right)} \quad (1.44)$$

$$\mathbb{P}(\eta) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \int dt dt' \eta(t) D_0^{-1}(t, t') \eta(t')\right) \quad (1.45)$$

où comme d'habitude $\langle . \rangle$ représente la valeur moyenne sur le bruit et $\overline{(\cdot)}$ la moyenne sur le désordre. L'introduction des champs auxiliaires $\hat{S}_i$, et la moyenne sur le bruit thermique, conduisent à :

$$1 = \int \mathcal{D}S_i(t) \mathcal{D}\hat{S}_i(t) e^{-\frac{1}{2} \sum_i \int dt dt' \hat{S}_i(t) D_0(t, t') \hat{S}_i(t') + i \hat{S}_i(t) (\partial_{t'} S_i(t') \mu(t') S_i(t'))} \overline{e^{i \hat{S}_i \frac{\delta}{\delta S_i} \mathcal{H}}} \quad (1.46)$$

Pour finir, on effectue la moyenne sur le désordre :

$$\begin{aligned} \overline{e^{i \hat{S}_i \frac{\delta}{\delta S_i} \mathcal{H}}} &= \exp\left(\frac{pN}{4} \int dt dt' Q_{i\hat{S}_i\hat{S}}(t, t') Q_{SS}^{p-1}(t, t')\right) \\ &\quad \exp\left((p-1) Q_{i\hat{S}_i\hat{S}}(t, t') Q_{S\hat{S}\hat{S}}(t, t') Q_{SS}^{p-2}(t, t')\right) \end{aligned} \quad (1.47)$$

$$Q_{A,B}(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N A_j(t) B_j(t') \quad (1.48)$$

L'interprétation physique de ces paramètres est assez claire, ce ne sont autres que les fonctions de corrélation et de réponse : $\langle Q_{i\hat{S}_i\hat{S}}(t, t') \rangle = R(t', t)$, $\langle Q_{S\hat{S}\hat{S}}(t, t') \rangle = R(t, t')$ et $\langle Q_{SS}(t, t') \rangle = C(t, t')$, la dernière quantité (d'interprétation difficile) étant nulle : $Q_{i\hat{S}_i\hat{S}} = 0$ [155]. L'évaluation de l'intégrale 1.46 au point col conduit à l'équation de Langevin effective :

$$\partial_t S(t) = -\mu(t) S(t) + \frac{1}{2} p(p-1) \int dt' R(t, t') C^{p-2}(t, t') S(t') + \zeta(t) \quad (1.49)$$

$$\langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = 2T \delta(t, t') + \frac{p}{2} C^{p-1}(t, t') \equiv D(t, t') \quad (1.50)$$

Et, en utilisant le fait que pour un bruit gaussien : $\langle \zeta(t) S(t') \rangle = \int du D(t, u) R(t', u)$, la fonction de corrélation vérifie :

$$\partial_t C(t, t') = -\mu(t) C(t, t') + \frac{p(p-1)}{2} \int_{-\infty}^t du R(t, u) C^{p-2}(t, u) C(u, t') \quad (1.51)$$

$$+ 2T R(t', t) + \frac{p}{2} \int_{-\infty}^t du C^{p-1}(t, u) R(t', u) \quad (1.52)$$

En outre, la contrainte sphérique, fixée en différenciant $C(t, t) = 1$ s'écrit :

$$\mu(t) = T + \frac{1}{2} p^2 \int_{-\infty}^t du R(t, u) C^{p-1}(t, u) \quad (1.53)$$

De manière générale, il conviendrait d'écrire l'évolution de la fonction de réponse, et de résoudre ce jeu d'équations couplées. Si l'on ne s'intéresse qu'à la dynamique d'équilibre, deux simplifications majeures arrivent : 1. les fonctions de corrélation et de réponse deviennent invariantes par translation dans le temps, 2. ces deux fonctions sont liées par un théorème de fluctuation-dissipation :

$$R(\tau) = -\frac{1}{T} \frac{d}{d\tau} C(\tau). \quad (1.54)$$

L'équation finale pour la fonction de corrélation est ainsi :

$$d_\tau C(\tau) = -TC(\tau) - \frac{p}{2T} \int_0^\tau du C^{p-1}(\tau - u) d_u C(u) \quad (1.55)$$

Cette équation est à comparer aux équations (1.15) et (1.21) dérivées au sein du formalisme de Mori-Zwanzig [107, 112]. Si l'on considère le régime sur-amorti dans l'équation (1.15), et que l'on suppose que $C(\mathbf{q}, 0)$ est concentré sur son premier pic $C(\mathbf{q}, 0) = 1 + C_0 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)$, en se plaçant dans le régime sur-amorti, (1.15) et (1.21) deviennent en enlevant la dépendance spatiale :

$$d_t C(t) + \Omega^2 C(t) + \kappa \int_0^t du C^2(t - u) d_u C(u) = 0 \quad (1.56)$$

qui est exactement l'équation de la fonction de corrélation $C(\tau) \equiv 1/N \sum_i S_i(0) S_i(\tau)$ du modèle à p spins pour $p=3$. Dans le contexte des liquides surfondus, l'équation (1.56) est connu sous le nom de modèle schématique. Introduit par Bengtzelius et Götze [9] comme une simplification de la théorie de couplage de modes, il permet d'en retrouver les principales prédictions, dont bien évidemment, la transition ergodique/non-ergodique.

En effet, la fonction de corrélation est une fonction décroissante de la température : $d_t C(t) \leq 0$. Cela se traduit, en utilisant (1.55), par :

$$C^{p-2}(t)(1 - C(t)) \leq \frac{2T^2}{p} \quad (1.57)$$

Le membre de gauche de cette inégalité est maximal pour $C \equiv q_d = (p - 2)/(p - 1)$, et s'annule pour $C(t = 0) = 1$ et $C = 0$. Quand la température est suffisamment élevée, l'inégalité est toujours vérifiée quelque soit la valeur prise par la fonction de corrélation au cours du temps. Si l'on regarde de plus près l'inégalité (1.57), la différence entre les deux membres est donnée par la dérivée temporelle de $C(t)^2$. Celle-ci est grande quand $C(t) \simeq 1$ (*i.e.* $t \simeq 0$), et $C(t) \simeq 0$ (*i.e.* $t \gg 1$ quand le système est ergodique), et diminue quand $C(t) \simeq q_d$, ce qui signifie que lorsque le système est ergodique, il se développe un plateau. En diminuant la température, la borne est atteinte pour :

$$T_d = \sqrt{\frac{p(p - 2)^{p-2}}{2(p - 1)^{p-1}}} \quad (1.58)$$

Comme l'évolution de la fonction de corrélation est monotone en fonction du temps, pour $T = T_d$, une fois la valeur q_d atteinte, la relaxation est bloquée à cette valeur : il apparaît un plateau infini.

Au-delà de cet exemple, ce calcul clarifie plusieurs points restés obscurs dans le formalisme de couplage de modes :

1. La dynamique MCT apparaît ici dans un modèle de champ moyen, ouvrant de nouvelles possibilités d'améliorations de la théorie. On conçoit notamment l'intérêt d'une reformulation de la théorie dans un formalisme de théorie des champs respectant ordre par ordre les symétries du système.
2. Le rôle de l'équilibre est ici particulièrement transparent. Les équations de couplage de modes sont des équations valables à l'équilibre, par inclusion du théorème de fluctuation-dissipation. Cela donne une indication sur les symétries fondamentales de ce problème.

2. Dans la limite $t \gg 1$, $\int_0^t du C^{p-1}(t - u) d_u C(u) \simeq C^{p-1}(t)(C(t) - 1) + \alpha d_t C(t)$ avec α une constante positive

3. Le fait de disposer d'un modèle microscopique ouvre toute une classe de modèles suivant une dynamique MCT. Cela pose la question de l'universalité d'une telle transition et de son lien avec les propriétés thermodynamiques des liquides surfondus, ce qui est l'objet des sections suivantes.
4. Ces mêmes modèles permettent une reformulation de la transition ergodique/non-ergodique en termes d'états métastables (voir ci-dessous).

2.2 L'approche T.A.P.

La transition ergodique/non-ergodique dans le modèle à p spins trouve son origine dans la thermodynamique complexe de ce modèle. Il connaît deux transitions : une transition dynamique avec brisure d'ergodicité à une température T_d (donnée par (1.58)), et une transition thermodynamique à une température $T_s < T_d$ d'une phase paramagnétique vers une phase désordonnée de type 1-RSB (pour $p \geq 3$). C'est l'existence de cette deuxième transition qui conditionne dans ces modèles l'existence de la transition dynamique. En effet, à T_d apparaissent des états métastables de durée de vie infinie qui deviennent les états stables à T_s . L'approche T.A.P. (Thouless, Palmer et Anderson [159]) donne un cadre naturel à cette discussion.

Considérons l'énergie libre Γ_{TAP} :

$$-\beta\Gamma_{TAP}(m_i, \beta, h_i) = \ln \int dS_1 \dots dS_N e^{-\beta\mathcal{H}(S_1 \dots S_N) - \sum_i h_i(S_i - m_i)} \quad (1.59)$$

Les champs h_i sont introduits pour imposer $\langle S_i \rangle = m_i$. La valeur moyenne thermodynamique est celle donnée par le hamiltonien $\mathcal{H}$ de l'équation (1.41). En utilisant la propriété d'auto-moyennage des couplages du modèle à p spins (voir fig. 1.3), un développement de haute-température [83] de (1.59) donne :

$$\begin{aligned} -\beta\Gamma_{TAP}(m_i, \beta, q) &= \frac{N}{2} \ln(1 - q) + \frac{\beta}{N} \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} m_{i_1} \dots m_{i_p} \\ &\quad + \beta^2 \left[(p-1)q^p - pq^{p-1} + 1 \right] \end{aligned} \quad (1.60)$$

où l'on a introduit le recouvrement $q \equiv \frac{1}{N} \sum_i m_i^2$ [115]. Les équations de champ-moyen

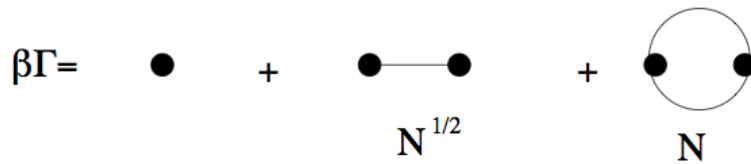


FIGURE 1.3 – Diagrammes contribuant à la fonctionnelle TAP dans la limite thermodynamique (ici $p=2$). Chaque ligne représente le propagateur βJ_{ij} , les vertex portant comme sources les aimantations m_i .

sont données par les minima de cette fonctionnelle : $\partial_{m_i} \Gamma = 0$. En changeant de variables : $m_i \equiv \sqrt{q} \sigma_i$ et $\sum_i \sigma_i^2 = N$, on note que les équations de minimisation par rapport aux σ_i sont indépendantes des valeurs de q :

$$-\sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p} - \frac{1}{N} H(\sigma) \sigma_{i_1} = 0 \quad (1.61)$$

Bien qu'il ne soit pas question de résoudre (1.61), il est possible de compter ses solutions à densité d'énergie $E = H(\sigma)/N$ donnée. On montre ainsi que [149] :

$$\mathcal{N}(E) \equiv \int D\sigma \prod_{i_1} \delta \left(\sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p} + E \sigma_{i_1} \right) \left| \det \left((p-1) \sum_{i_3 < \dots < i_p} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_3} \dots \sigma_{i_p} - E \delta_{i_1 i_2} \right) \right| \quad (1.62)$$

$$\propto e^{N\Sigma(E)} \quad (1.63)$$

$\Sigma(E)$ n'est autre que la complexité. Elle est donnée par [44, 55] :

$$\Sigma(E) = -\frac{1}{2} \ln \frac{p}{2} + \frac{1}{2} - E^2 + \frac{N}{p(p-1)} x^2 + \ln(x - pE) \quad (1.64)$$

$$x = \frac{p}{2} \left(E + \sqrt{E^2 - 2 \frac{p-1}{p}} \right) \quad (1.65)$$

On peut noter que $E_{th} \equiv -\sqrt{2 \frac{p-1}{p}}$ joue un rôle particulier. La complexité reste réelle (et donc garde un sens) tant que $E \leq E_{th}$. Par ailleurs, on note également que la complexité est positive seulement pour des valeurs supérieures à un certain E_0 . En deçà, elle devient négative, le calcul de la complexité n'est plus guère valable. E_0 joue le rôle d'état fondamental. La complexité n'est donc définie que dans une bande $[E_0, E_{th}]$, et ce indépendamment de la température. Il faut choisir parmi ces états ceux qui contribuent le plus à l'énergie libre.

Plus formellement, la fonction de partition du système Z peut se décomposer sur les états purs (TAP) α du système comme :

$$Z = \int \mathcal{D}\sigma e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)} = \sum_{\alpha} \int_{\sigma \in \alpha} \mathcal{D}\sigma e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)} \quad (1.66)$$

$$= \sum_{\alpha} e^{-N\beta f_{\alpha}} \quad (1.67)$$

où $f_{\alpha} \equiv \Gamma(E_{\alpha}, T)/N$. En introduisant les énergies E_{α} , la fonction de partition d'équilibre s'écrit donc :

$$Z = \int dE \mathcal{N}(E) \exp(-\beta N f(E, T)) \quad (1.68)$$

$$= \int dE \exp(-\beta N [f(E, T) - T\Sigma(E)]) \quad (1.69)$$

De cette dernière expression, on lit que :

$$f_{eq}(T) \equiv -\frac{1}{\beta N} \ln Z = \min_E \left(f(E, T) - T\Sigma(E) \right) \quad (1.70)$$

mais aussi que :

$$\left. \frac{d}{df} \Sigma \right|_{f(E^*)} = \frac{1}{T} \quad (1.71)$$

Le calcul de $f(E, T) \equiv \Gamma(E, T)/N$ demande de résoudre l'équation TAP pour le recouvrement q donné par $\partial_q \Gamma(E_{\alpha}, T) = 0$ [57] :

$$q^{\frac{p-2}{2}} (1-q) = T \frac{-E \pm \sqrt{E^2 - E_{th}^2}}{p-1} \quad (1.72)$$

Le membre de droite passe par un maximum pour $0 < q^* = 2/(p-2) < 1$, ($p \geq 3$).

L'étude des équations de col (1.70) montre trois régimes de températures intéressants (voir la fig. 1.4) [77] :

1. Pour $T > T^* = T_d$, la solution paramagnétique a une densité d'énergie inférieure à $f(E, T) - T\Sigma(E, T)$ pour tout $E \in [E_0, E_{th}]$.
2. Pour $T_s \leq T \leq T_d$, la solution d'équilibre (paramagnétique) est obtenue comme la superposition d'un nombre exponentiel d'états purs d'énergie libre $f(E^*(T), T)$. Notamment, à T_d , ces solutions ont un recouvrement donné par la valeur du plateau q_d trouvé par l'approche dynamique. La brisure d'ergodicité vient du fait que le système est piégé dans des états métastables séparés par des barrières d'énergie qui deviennent infinies dans la limite thermodynamique.
3. Pour $T = T_s$, où T_s est la température de brisure de symétrie des répliques, la complexité s'annule, le nombre de solutions des équations TAP devient sous-exponentiel. Le système passe par une transition de phase.

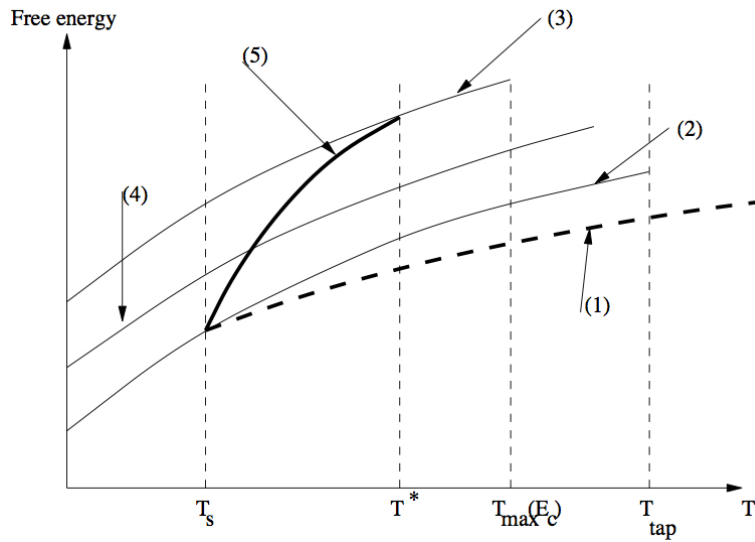


FIGURE 1.4 – Représentation de l'énergie libre des solutions des équations TAP. (1) Solution d'équilibre $f_{eq}(T) = f(E^*(T), T) - T\Sigma(E^*(T))$, (2) $f(E_0, T)$, (3) $f(E_{th}, T)$, (4) Solution typique $f(E, T)$, (5) Etats métastables contribuant à l'énergie libre. T_{tap} et T_{max} sont les températures à partir desquelles, les équations TAP ont des solutions exponentiellement nombreuses. T^* correspond à la température de brisure d'ergodicité T_d . Figure extraite de [77].

Que retenir de l'étude détaillée de ce modèle ? Le modèle à p spins fait le lien entre la dynamique MCT et le paysage d'énergie heurté. Il donne et complète une théorie de champ moyen de la transition vitreuse (voir fig. (1.5)). Entre T_d et T_s , l'espace des phases de ce modèle est éclaté en un nombre exponentiel d'états disjoints, donnant une contribution $\Sigma(f^*)$ à l'entropie globale. Cela signifie que l'entropie totale du système $S(T)$ [85] peut s'écrire :

$$S(T) = \Sigma(T) + S_{intra} \quad (1.73)$$

où S_{intra} est l'entropie associée à chaque état individuel d'énergie libre $f^* \equiv f(E^*(T))$. La complexité Σ joue pour le modèle à p spins un rôle analogue à celui de l'entropie configurationnelle pour un liquide surfondu. Par exemple, le saut de chaleur spécifique à la

transition vitreuse s'interprète facilement. Au cours du refroidissement, le système tombe hors d'équilibre en restant piégé dans un état métastable, perdant la contribution de la complexité : $\Delta C \simeq -Td\Sigma(T)/dT$. Dans les verres structuraux, en dimension finie, les barrières entre états sont finies, le système va relaxer vers l'équilibre en-dessous de T_d en sautant d'un état à l'autre. Cette suite de sauts activés donne naissance à un temps de relaxation sur-exponentiel (VFT).

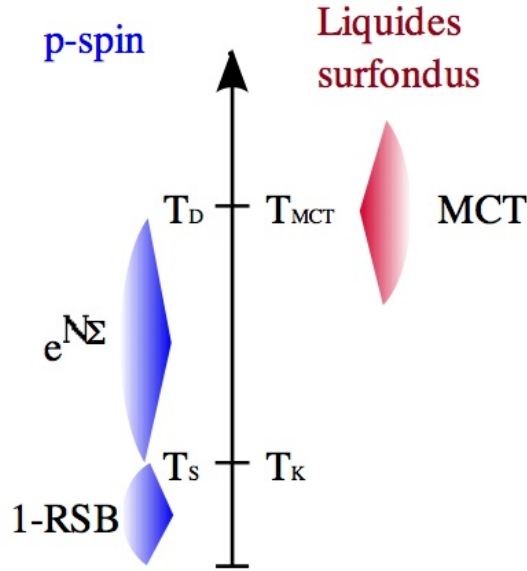


FIGURE 1.5 – Scénario de champ moyen de la transition vitreuse : l'analogie entre le modèle à p spins et les liquides surfondus.

L'étude des points stationnaires du paysage d'énergie libre dans le cas d'un mélange binaire de Lennard-Jones a permis de confirmer au moins qualitativement ce scénario [89].

2.3 Au-delà du modèle à p spins :

Il existe une certaine universalité de la transition p-spin/MCT, reposant sur la thermodynamique des modèles 1-RSB. Nous allons ici illustrer ce lien au moyen de la méthode des répliques réelles [130, 134, 136]. L'idée de cette méthode est comparable à la description d'un point spinodal. Dans l'intervalle $[T_s; T_d]$, la solution stable est la solution paramagnétique. Pour tenir compte de la présence d'états métastables, il faut prolonger la solution de basse température en ajoutant un champ de piégeage qui la stabilise.

On considère, donc, m répliques identiques du système couplées entre elles par un champ ϵ que l'on annule une fois la limite thermodynamique prise. La fonction de partition d'un tel système est donnée par :

$$Z^m = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_m} e^{-\beta(f_{\alpha_1} + \dots + f_{\alpha_m}) + \epsilon \sum_{ab} g(q_{\alpha_a \alpha_b})}, \quad (1.74)$$

α_i désignant les états de la copie i . La compétition entre le champ de piégeage ϵ et l'entropie (*i.e.* le nombre d'états α_i) donne lieu à une transition entre une région de l'espace des phases (en ϵ) où les répliques sont découplées et une phase où leur recouvrement devient non-nul.

Dans le cas où les répliques sont découplées, on peut ainsi écrire :

$$Z^m = \left(\sum_{\alpha} e^{-\beta f_{\alpha}} \right)^m = \left(\int df e^{-\beta N(f - T\Sigma(f))} \right)^m \quad (1.75)$$

Et donc, l'énergie libre par spin et par réplique est donnée par :

$$f \equiv -\frac{T}{mN} \ln Z^m = f_u - T\Sigma(f_u) \quad (1.76)$$

où f_u est déterminée au point col :

$$\left. \frac{\partial}{\partial f} \Sigma \right|_{f_u} = \frac{1}{T} \quad (1.77)$$

Cette équation est indépendante de m . La température fixe de manière univoque l'état thermodynamique.

Maintenant, si l'on considère que le cas de répliques couplées, c'est-à-dire le cas valable pour $T < T_d$:

$$Z^m = \sum_{\alpha} e^{-m\beta f_{\alpha}} = \int df e^{-\beta N(mf - T\Sigma(f))} \quad (1.78)$$

La condition de col s'écrit :

$$m\beta = \left. \frac{\partial}{\partial f} \Sigma \right|_{f_c} \quad (1.79)$$

Et l'énergie libre est donnée par :

$$f \equiv -\frac{T}{mN} \ln Z^m = f_c - \frac{T}{m} \Sigma(f_c) \quad (1.80)$$

Soit encore :

$$\frac{\partial}{\partial m} \frac{\ln Z^m}{mN} = -\Sigma(f_c) \quad (1.81)$$

Le résultat peut se lire naïvement comme pour une transition de phase du premier ordre : il y a coexistence entre la solution paramagnétique et les multiples états métastables. Suivant la température, il y a une "fraction" $m^*(T)$ optimale d'états métastables.

Si l'on compare maintenant à la théorie de brisure des répliques de Parisi, l'énergie libre par spin est donnée par :

$$\frac{1}{N} \overline{\ln Z} = \frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z_P^n}}{n} \quad (1.82)$$

Dans le cas du modèle à p spins,

$$\overline{Z_P^n} = \int \mathcal{D}Q_{ab} e^{\frac{\beta^2}{4} \sum_{ab} Q_{ab}^p + \frac{1}{2} \text{Tr} \ln Q} \quad (1.83)$$

La matrice Q doit être paramétrée afin de procéder à la continuation analytique $n \rightarrow 0$. Dans le cas du modèle à p spins, on a recours à un paramétrage à un pas de brisure de la symétrie de permutation des répliques (ici $n = 9$, $m = 3$) :

$$\left(\begin{array}{ccc} \begin{pmatrix} 1 & q & q \\ q & 1 & q \\ q & q & 1 \end{pmatrix} & 0 & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 1 & q & q \\ q & 1 & q \\ q & q & 1 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & 0 & \begin{pmatrix} 1 & q & q \\ q & 1 & q \\ q & q & 1 \end{pmatrix} \end{array} \right) \quad (1.84)$$

L'énergie libre dépend ici à la fois de q et de m . Si la condition de stationnarité par rapport à q est simple à comprendre, celle par rapport à m est longtemps restée obscure. Si l'on compare avec la méthode des répliques réelles, on voit que :

$$\partial_m \frac{\overline{Z^m}}{m} = \lim_{n \rightarrow 0} \partial_n \overline{Z_P^{mn}} \quad (1.85)$$

Si l'on impose avant de prendre la limite $n \rightarrow 0$ que :

$$\partial_m \overline{Z_P^{mn}} = 0 \quad (1.86)$$

Cela revient à imposer $\Sigma(f^*) = 0$. La valeur de m qui maximise l'énergie libre de l'Ansatz 1-RSB est précisément celle qui annule la complexité. Il y a une brisure spontanée de symétrie. Cette méthode a été utilisée pour faire des calculs approchés de complexité en dimension finie (*small cage expansion*, approximation HNC,...) [132, 133, 141, 166].

3 La M.C.T. revisitée :

L'étude détaillée du modèle à p spins fait donc émerger une vision physique simple reliant la brisure d'ergodicité à l'apparition d'états métastables dus à la présence d'une transition de phase. Il donne une route (les processus de relaxation activés) pour comprendre l'évitement de la transition ergodique/non-ergodique. Ce modèle a aussi permis de grandement clarifier le statut de la MCT, et de son contenu physique.

Par exemple, les considérations de paysages d'énergie peuvent être reliées (par le biais de théorèmes de fluctuation-dissipation) à l'espace réel. La divergence du temps de relaxation à l'approche de T_d a ainsi pu être reliée à la divergence d'une longueur de corrélation, lien que nous détaillons dans le paragraphe suivant.

La divergence de cette échelle spatiale est réminiscente des phénomènes critiques usuels. Elle repose dans un cadre plus général que celui des systèmes 1-RSB (voir section précédente) la question de l'universalité de la *transition* MCT. Celle-ci constitue en fait une véritable théorie de Landau de la transition vitreuse. Cela sera l'objet du deuxième paragraphe de cette section.

3.1 Temps et longueurs :

La résolution des équations de couplage de modes montre une divergence du temps de relaxation $\tau_\alpha \propto \epsilon^{-\gamma}$. Dans le cas d'un système à courte portée, cela s'accompagne de la divergence d'une échelle de longueur. Un argument simple est le suivant : si l'on découpe le système en boîtes indépendantes de taille L (*i.e.* de très grande taille devant sa plus grande longueur de relaxation), le temps de relaxation est au pire de l'ordre de grandeur du temps nécessaire pour réarranger toutes les particules au sein d'une boîte : $\ln \tau \propto L^d$, ce qui montre que si τ diverge, L aussi [137]. Dans le cas du modèle à p spins, cet argument devient faux. Néanmoins, l'étude de la stabilité des états TAP permet de retrouver un résultat similaire. En effet, on peut montrer que le spectre des valeurs propres de la hessienne [43, 45] suit une loi du demi-cercle dont l'évolution est résumée à la figure 1.6. A T_d , les états TAP dominants sont ceux d'énergie E_{th} . Il apparaît à T_d des directions plates dans la hessienne. Or, à l'équilibre :

$$\frac{\delta^2}{\delta m_i \delta m_j} \Gamma = \frac{\delta}{\delta m_i} h_j = [< S_i S_j >_c]^{-1} \quad (1.87)$$

Il doit donc exister des corrélations à longue portée. Le caractère très oscillant de la fonction de corrélation $< S_i(0) S_j(t) >$ amène plutôt à considérer, un objet comme [70, 78] :

$$G_4 = < S_i(0) S_j(0) S_i(t) S_j(t) >_c \quad (1.88)$$

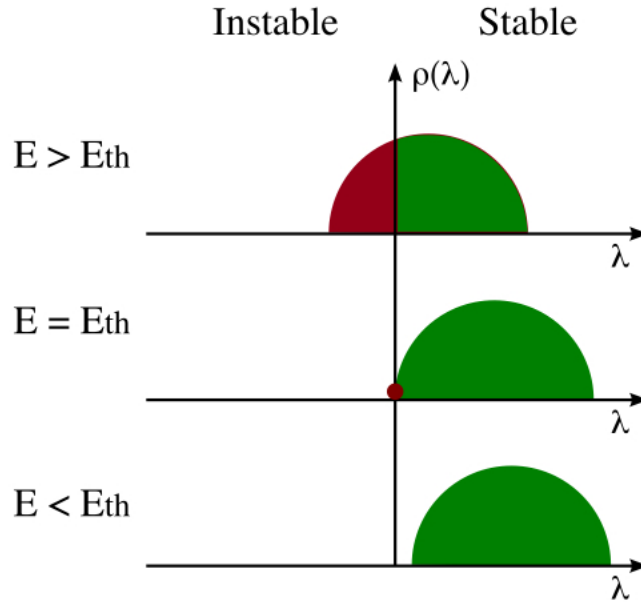


FIGURE 1.6 – Evolution de la densité de valeurs propres de la hessienne des états TAP en fonction de leur énergie.

Si l'on se place à une température légèrement supérieure à T_d , on peut considérer que le système reste piégé dans un état donné ($t \gg 1$), c'est-à-dire :

$$G_4 \simeq \langle S_i(0)S_j(0) \rangle \langle S_i(t)S_j(t) \rangle \simeq \overline{\langle S_i S_j \rangle_\alpha^2}^\alpha \quad (1.89)$$

Cela montre bien que cet objet doit être sensible à l'existence d'un ordre à grande portée, de même que la susceptibilité associée :

$$\chi_4(t) = \rho \int d^d \mathbf{r} G_4(\mathbf{r}, t) \quad (1.90)$$

Par exemple, si l'on fait une analogie un peu rapide avec les phénomènes critiques habituels, on s'attend à ce que $G_4(\mathbf{r}, t) \sim \exp(-r/\xi)$ et donc $\chi_4(t) \sim \xi^d$ [19, 162].

De nombreux objets ont été proposés pour mettre en évidence une longueur croissante et les liens entre eux longuement discutés ainsi que leur dépendance aux ensembles thermodynamiques considérés [11, 12]. Il est néanmoins possible de remettre un peu d'ordre dans cette discussion, si l'on accepte, l'argument simple suivant : pour observer une longueur de corrélation, il faut s'intéresser aux fluctuations du paramètre d'ordre. Or, dans le cadre de la transition vitreuse, le paramètre d'ordre est donné par un corrélateur (des fluctuations de densité pour un liquide surfondu, des spins pour un modèle 1-RSB) [78].

Pour déterminer les fluctuations d'un tel objet, il faut pouvoir construire une théorie associée aux corrélations. La double transformée de Legendre permet de construire une telle théorie. En effet, dès lors qu'une dérivation rigoureuse de la MCT par une théorie de champ est possible, par exemple par l'utilisation du formalisme de Martin-Siggia-Rose (voire la section précédente pour une application au modèle à p spins), on peut toujours considérer

la fonctionnelle génératrice des diagrammes à deux particules irréductibles [50, 63, 64, 91] :

$$\begin{aligned} \Lambda(\Phi_a, G_{ab},) \equiv & -\ln \int \mathcal{D}\phi_a \exp \left(-S\{\phi_a\} - \sum_{a=1}^{2m} h_a(\phi_a - \Phi_a) \right. \\ & \left. - \sum_{a,b=1}^{2m} K_{ab}(\phi_a \phi_b - \Phi_a \Phi_b - G_{ab}) \right) \end{aligned} \quad (1.91)$$

où les champs $\phi_a(x, t)$ ($a = 1, \dots, m$) sont les champs considérés (par exemple un champ de densité, ou un champ de spin), les champs $\phi_a(x, t)$ ($a = m + 1 \dots 2m$) les champs de réponse associés, et les $\Phi_a(x, t) = \langle \phi_a(x, t) \rangle$. Les champs (non-physiques) $h_a(x, t)$ et les potentiels (non-physiques) $K_{ab}(x, x', t, t')$ sont introduits pour imposer les contraintes : $\langle \phi_a \rangle = \Phi_a$ et $\langle \phi_a \phi_b \rangle_c = G_{ab}$. Cette fonctionnelle peut se récrire :

$$\Lambda(\Phi, G) = -\frac{1}{2} \text{Tr} \ln G + \frac{1}{2} \text{Tr} G_0^{-1} (G + \Phi \Phi) + \mathcal{K}_2(\Phi, G) \quad (1.92)$$

où $\mathcal{K}_2(\Phi, G)$ est la somme de tous les diagrammes à deux particules irréductibles construits avec les vertex prenant les propagateurs G comme lignes et les aimantations Φ comme sources. Bien évidemment, il faut annuler champs et potentiels non-physiques pour retrouver le système vrai : Φ et G sont évalués au point de stationnarité de Λ par rapport à Φ et G :

$$\frac{\delta}{\delta G_{ab}} \Lambda = K_{ab} = 0 \quad (1.93)$$

$$\frac{\delta}{\delta \Phi_a} \Lambda = h_a = 0 \quad (1.94)$$

Par exemple, (1.93) donne une équation de Dyson auto-consistante sur G :

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \mathcal{M}(G) \quad \text{où} \quad \mathcal{M}(G) \equiv \frac{\delta}{\delta G} \mathcal{K}_2(\Phi, G) \quad (1.95)$$

Pour les fluctuations des corrélateurs (et des fonctions de réponse) il faut s'intéresser à : $\delta^2 \Lambda / \delta G \delta G$ et l'évaluer au point de stationnarité :

$$\begin{aligned} \left[\frac{\delta^2 \Lambda}{\delta G_{ab} \delta G_{cd}} \right]^{-1} &= \langle (\phi_a(x, t) \phi_b(x', t') - \Phi_a(x, t) \Phi_b(x', t')) \\ &\quad \times (\phi_c(x, t) \phi_d(x', t') - \Phi_c(x, t) \Phi_d(x', t')) \rangle_c \end{aligned} \quad (1.96)$$

Dans le cas de la MCT, on peut montrer que cet opérateur devient critique à T_d : il faut pour cela resommer les diagrammes en anneaux dans la fonctionnelle à deux particules irréductibles [19]. L'analyse détaillée de cet opérateur montre que :

1. Dans le régime β ,

$$\chi_4(t) \sim \epsilon^{-1/2} f_1(t\epsilon^{1/2a}) \quad (1.97)$$

2. Dans le régime α ,

$$\chi_4(t) \sim \epsilon^{-1} f_2(t\epsilon^{1/2a+1/2b}) \quad (1.98)$$

Comme la dépendance en ϵ doit disparaître quand $t\epsilon^{1/2a} \ll 1$, $f_1(x) \sim x^a$ pour $x \ll 1$. le même argument appliqué à f_2 en imposant le raccordement entre les deux régimes conduit à $f_2(x) \sim x^b$ pour $x \ll 1$. En outre, on peut montrer que $\chi_4(t)$ atteint son maximum à un temps τ_4 proportionnel à τ_α [19, 162].

Ainsi, on comprend que, dès lors qu'une susceptibilité est liée à $\delta^2\Lambda/\delta G\delta G$, celle-ci connaîtra un comportement critique. Prenons un exemple. Ajoutons un potentiel extérieur V_{ext} de faible amplitude, disons $V_{ext} < kT$. En écrivant que [11, 12] :

$$\frac{\delta^2}{\delta G\delta V_{ext}}\Lambda = \frac{\delta^2}{\delta G\delta G}\Lambda\frac{\delta G}{V_{ext}} + \frac{\delta^2}{\delta G\delta\Phi}\Lambda\frac{\delta\Phi}{V_{ext}} \quad (1.99)$$

on obtient :

$$\frac{\delta G}{V_{ext}} = -\left[\frac{\delta^2}{\delta G\delta G}\Lambda\right]^{-1}\left(\frac{\delta^2}{\delta G\delta V_{ext}}\Lambda + \frac{\delta^2}{\delta G\delta\Phi}\Lambda\right) \quad (1.100)$$

On vient ainsi de montrer que la fonction de réponse des corrélations densité-densité (G_{aa}) à un potentiel extérieur devait avoir un comportement critique à T_d . Plus précisément, on peut montrer en utilisant un formalisme de Mori-Zwanzig (IMCT) [21] que $\chi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{k}, t)$ défini comme :

$$\chi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{k}, t) = \frac{\delta}{\delta V_{ext}(\mathbf{q}_0)}C(\mathbf{k}, \mathbf{q}_0 + \mathbf{k}, t)\Big|_{V_{ext}\rightarrow 0} \quad (1.101)$$

$$C(\mathbf{k}, \mathbf{q}_0 + \mathbf{k}, t) = \frac{1}{N} < \delta\rho_{\mathbf{k}}(t)\delta\rho_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}}(0) > \quad (1.102)$$

se comporte comme

1. dans le régime β

$$\chi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{k}, t) \propto A(\mathbf{k})\frac{1}{Bq_0^2 + \sqrt{\epsilon}}g_\beta\left(\frac{q_0^2}{\sqrt{\epsilon}}, t\epsilon^{1/2a}\right)$$

2. dans le régime α

$$\chi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{k}, t) \propto C\left(\frac{Bq_0^2}{\sqrt{\epsilon}}\right)\frac{\epsilon^{-1/2}}{Bq_0^2 + \sqrt{\epsilon}}g_\alpha\left(\mathbf{k}, t\epsilon^\gamma\right)$$

Ce qui établit l'existence d'une longueur divergente $\xi \propto \sqrt{B}\epsilon^{-1/4}$. Ce résultat est intéressant à plusieurs titres : 1. il donne une dérivation rigoureuse d'un argument simple (voir simpliste) issu de la physique des modèles 1-RSB, 2. il illustre comment les fluctuations du paramètre d'ordre affectent d'autres susceptibilités non-trivialement reliées et 3. il prouve que même dans le régime β , suffisamment proche de T_d , la relaxation devient coopérative et non plus locale.

Au-delà ce formalisme permet de comprendre les dépendances de χ_4 aux ensembles thermodynamiques et de les lier entre elles.

3.2 Une théorie de Landau de la transition vitreuse.

L'existence d'une longueur divergente, et l'analyse de la MCT comme une véritable transition dynamique caractérisée par des exposants critiques, pose avec acuité la question de son universalité. Il est possible de reformuler la MCT comme une théorie de Landau de la transition vitreuse [4], c'est-à-dire que certaines des prédictions de cette théorie sont génériques et ne reposent pas sur un modèle particulier. Nous avons par exemple vu que les modèles 1-RSB sont une classe de modèles tombant dans cette description.

La théorie de Landau est une approche phénoménologique des transitions de phase reposant sur des arguments de symétrie, de régularité [116]. Dans le cas, des systèmes ferromagnétiques, ces arguments s'appliquent à la construction d'une énergie libre générique exprimée comme fonction de l'aimantation m :

$$\mathcal{F}\{m\} = \mathcal{F}_0 - mh + \frac{b}{2}(T - T_c)m^2 + \frac{g}{4!}m^4 + \dots \quad (1.103)$$

Cette description, dans le cas inhomogène, peut-être complétée par l'adjonction d'un développement en gradient, permettant de montrer que près de T_c la divergence de la susceptibilité uniforme $\chi(q=0)$ résulte de la divergence d'une longueur de corrélation. Cette construction peut-être mise en défaut dans trois cas :

1. L'ordre du développement de $\mathcal{F}$ affecte les prédictions qualitatives de la théorie : c'est le cas des points multicritiques. Ainsi, l'annulation du coefficient de l'ordre 4 d'un point tricritique change radicalement le diagramme de phase.
2. Le couplage (fortement non-linéaire) entre les fluctuations spatiales change les exposants pour une dimension $d < d_u$, où d_u est la dimension critique supérieure ($d_u = 6$ pour le modèle à p spins, 4 pour le modèle d'Ising). Au-delà de d_u , les exposants sont ceux de la théorie de Landau.
3. Des effets non-perturbatifs peuvent masquer la transition. Par exemple, des processus activés (nucléation) peuvent empêcher d'atteindre le point critique, comme dans le cas d'une transition spinodale, et sans doute dans les verres structuraux.

Si les deux derniers points restent des questions ouvertes, il a été récemment prouvé que la MCT avait une certaine régularité structurale.

Paramètre d'ordre et fonctionnelle :

Dans le cas de la transition vitreuse, on constate que le facteur de structure dynamique $C(\mathbf{k}, t)$ présente une relaxation en deux temps avec l'apparition d'un plateau de hauteur $f_{\mathbf{k}}$. Suffisamment près de T_d , on est fondé à écrire :

$$C(\mathbf{k}, t) = f_{\mathbf{k}}C(\mathbf{k}, 0) + \delta C(\mathbf{k}, t) \quad \text{où} \quad \delta C(\mathbf{k}, t) \ll 1 \quad (1.104)$$

Ici, $\delta C(\mathbf{k}, t)$ tient le rôle d'un paramètre d'ordre.

Il a été établi que les équations dynamiques de la MCT pouvaient être dérivées dans plusieurs contextes : formalisme de Janssen-de Dominicis pour les modèles de verres de spins généralisés (modèles 1-RSB), en utilisant le formalisme de l'hydrodynamique fluctuante (Fluctuating Hydrodynamics) [60], ou bien l'équation de Dean [66],... Dans toutes ces descriptions, on aboutit dans la phase de haute température (ergodique) à :

$$\partial_t C(\mathbf{k}, t) + TC(\mathbf{k}, t) + \int_0^t du \mathcal{M}\{C, R\}(\mathbf{k}, t-u) \partial_u C(\mathbf{k}, u) = 0 \quad (1.105)$$

où la fonctionnelle $\mathcal{M}\{C, R\}$ n'est autre que la *self-energy* (*i.e.* dans le langage du paragraphe précédent $\delta \mathcal{K}_2(\Phi, G)/\delta G$). Dans la phase ergodique, le problème est fermé par l'adjonction ordre par ordre du développement du théorème de fluctuation-dissipation (résultant de l'équilibre) :

$$R(\mathbf{k}, t) = -\frac{1}{T} \partial_t C(\mathbf{k}, t) \quad (1.106)$$

Cette description reste très générale. La MCT standard est obtenue comme une approximation auto-cohérente à une boucle de $\mathcal{M}$ (*i.e.* comme une fonction quadratique de C). On remarquera que $\mathcal{M}\{C, R\}$ est l'analogue de la fonctionnelle de Landau. En effet, dans la théorie de Landau standard les considérations de symétries définissant $\mathcal{F}$ reviennent à sélectionner des classes de diagrammes dans la fonctionnelle génératrice des diagrammes à une particule irréductible. Dans le cas de la MCT, le paramètre d'ordre étant un corrélateur, la discussion se déplace sur la fonctionnelle génératrice des diagrammes à deux particules irréductibles.

"Symétries" :

La brisure de symétrie est ici l'arrêt structural. En dessous d'un certain T_d ,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C(\mathbf{k}, t) = f_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, 0) \quad \text{où } f_{\mathbf{k}} > 0 \quad (1.107)$$

Les "symétries" associées à $\delta C(\mathbf{k}, t)$ sont celles de la transition vitreuse idéale (voir la section 1.2). Ainsi, supposera-t-on quand $\epsilon \ll 1$ qu'il existe :

1. deux échelles de temps séparées $\tau_\beta(\epsilon)$ et $\tau_\alpha(\epsilon)$:

$$\tau_\beta(\epsilon) \ll \tau_\alpha(\epsilon) \quad (1.108)$$

2. un régime de temps courts, $t \sim \tau_0$, où :

$$C(\mathbf{k}, t) \equiv C_0(\mathbf{k}, t) \quad (1.109)$$

$$C_0(\mathbf{k}, t \gg 1) \rightarrow f_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, 0) \quad (1.110)$$

3. un régime β , $t = s\tau_\beta(\epsilon)$, $s = \mathcal{O}(1)$, où :

$$\delta C(\mathbf{k}, s\tau_\beta(\epsilon)) = r(\epsilon) C(\mathbf{k}, 0) (1 - f_{\mathbf{k}})^2 G(\mathbf{k}, s) \quad (1.111)$$

4. un régime α , $t = s'\tau_\alpha(\epsilon)$, $s' = \mathcal{O}(1)$, où $C(\mathbf{k}, s'\tau_\alpha(\epsilon)) \equiv C_\alpha(\mathbf{k}, s')$ qui décrit la relaxation finale.

Finalement, le développement de Landau est obtenu en développant $G(\mathbf{k}, s) = \sum r^{n-1} G_n(\mathbf{k}, s)$ en puissance de $r(\epsilon)$, ce qui se traduit pas un développement de $\mathcal{M}(\mathbf{k}, s) = \sum r^{n-1} \mathcal{M}_n(\mathbf{k}, s)$ en puissance $r(\epsilon)$.

Propriétés universelles

Sous ces hypothèses, on peut alors démontrer que [4] :

1. Comme dans la MCT standard, le paramètre non-ergodique est donné par :

$$T_d \frac{f_{\mathbf{k}}}{1 - f_{\mathbf{k}}} = \mathcal{M}_0(\mathbf{k}) \quad (1.112)$$

Cependant, la valeur précise de T_d dépend de l'ordre du développement considéré. Bien qu'elle existe toujours, elle n'est pas universelle. Il est rare qu'une température de transition le soit.

2. La singularité de $r(\epsilon)$ est en $\sqrt{\epsilon}$
3. La fonction de scaling g définie par $G(t) = \epsilon^{1/2} g\left(\frac{t}{\tau_\beta(\epsilon)}\right)$ est toujours donnée par :

$$\mp z^{-1} + z g_\pm^2(z) + i\lambda \int_0^\infty e^{izt} g_\pm^2(t) dt = 0 \quad (1.113)$$

λ étant une constante incluant désormais des contributions non-locales. La conséquence de cette dernière équation est que les temps de relaxation suivent toujours les mêmes lois de puissance : $\tau_\beta(\epsilon) \sim \epsilon^{-1/2a}$ et $\tau_\alpha(\epsilon) \sim \epsilon^{-\gamma}$ avec $\gamma = 1/2a + 1/2b$.

4. Les exposants MCT a et b même s'ils sont affectés, et dépendent de la structure exacte des équations MCT, vérifient encore :

$$\frac{\Gamma^2(1+b)}{\Gamma(1+2b)} = \frac{\Gamma^2(1-a)}{\Gamma(1-2a)} = \lambda \quad (1.114)$$

Cette universalité des relations entre exposants (qui repose sur l'universalité de la fonction de scaling g) explique les succès quantitatifs de la MCT pour décrire de nombreux systèmes pourtant très différents. Ce sont ces prédictions universelles que nous appellerons par la suite transition MCT.

Ce résultat démontre de manière claire qu'une amélioration "superficielle" de la MCT en ajoutant des corrections d'ordre supérieur est inutile pour comprendre l'évitement de transition ergodique/non-ergodique. La MCT comme théorie de Landau a un domaine de validité restreint - un critère de Ginzbourg restant à écrire.

4 *The random first order theory (RFOT).*

L'image physique de la transition vitreuse repose sur l'analyse détaillée du modèle à p spins, et l'existence d'états métastables exponentiellement nombreux ayant une énergie libre f^* (intensive) supérieure à celle de l'état fondamental f_{eq} . En champ moyen, ces états ont une durée de vie infinie, et le système reste piégé dans un de ces états à T_d . Que se passe-t-il en dimension finie ?

En dimension finie, dans un modèle d'interactions à courte portée, ces états (s'ils existent) ont un temps de vie fini. La nucléation de la phase stable les rend thermodynamiquement instables. Des états bien définis sont pourtant nécessaires pour maintenir l'analogie entre complexité et entropie configurationnelle. Quel lien existe-t-il entre temps de relaxation et entropie configurationnelle ?

4.1 L'argument d'Adams-Gibbs.

L'augmentation (sur-)exponentielle du temps de relaxation, donnée par exemple par la loi de Vogel-Fulcher-Tamman (VFT) [82, 157, 164] :

$$\tau_\alpha(T) \sim \exp \frac{A}{T - T_K} \quad (1.115)$$

n'est pas du tout décrite par le champ-moyen qui donne une divergence en loi de puissance à T_d^+ et un temps de relaxation infini au-delà. En dimension finie, la nucléation permet au système de sauter d'un état métastable à un autre, et de relaxer vers l'équilibre (pour $T > T_K$) avec un temps typique donné par la hauteur $\Delta F(T)$ de la barrière à franchir :

$$\tau_{nucl.}(T) \sim \exp \frac{\Delta F(T)}{T} \quad (1.116)$$

La loi VFT prévoit que ces barrières doivent diverger comme $(T - T_K)^{-1}$. Plus généralement, l'argument d'Adams-Gibbs relie le temps de relaxation à $S_c(T)$ [1].

Si l'on suppose l'existence de régions coopératives, c'est-à-dire de petits clusters amorphes de taille ξ , le temps de relaxation est alors :

$$\ln \tau \sim \frac{\xi^d}{T} \quad (1.117)$$

Si l'on associe l'entropie d'excès à une entropie configurationnelle qui compte le nombre d'états amorphes préférés :

$$\mathcal{N}_{amorphe} \sim \exp(V S_c(T)) \sim A \frac{V}{\xi^d} \quad (1.118)$$

où A est le nombre de "bonnes" configurations. Et,

$$\ln \tau \sim \frac{\ln A}{T S_c(T)} \quad (1.119)$$

Or, les mesures thermodynamiques montrent que :

$$S_c(T) \sim \frac{T - T_K}{T_K} \quad (1.120)$$

Cet argument donne une dérivation de la loi VFT. Dans cet argument, la taille des clusters amorphes diverge à T_K comme $S_c(T)^{-1/d}$. Cependant, cet argument pose trois questions :

1. il ne donne pas l'origine physique de la longueur divergente. Quelle est la balance de force qui permet de la déterminer ?
2. $\ln \tau \sim \xi^d$ signifie qu'il faut qu'une fraction finie des particules contenues dans les clusters doit relaxer coopérativement, ce qui est le processus le plus lent possible.
3. les mesures expérimentales [148] montrent que la longueur $S_c(T)^{-1/d}$ augmente trop lentement pour expliquer la loi VFT. Comme on peut le voir à la figure 3, $S_c(T)$ diminue à peine de 50% entre T_m et T_g .

4.2 Etats mosaïques : le scénario RFOT.

L'argument d'Adams-Gibbs suppose l'existence d'un nombre fini de "bons" états, ce qui conduit à supposer qu'une fraction finie de cluster doivent coopérer pour faire relaxer le système. On peut au contraire supposer qu'il existe toute une distribution d'états α d'énergie libre f_α caractérisée par une complexité $\Sigma(f)$ comprise entre $[f_m; f_M]$.

Dans la nucléation habituelle, le rayon de nucléation critique résulte de la compétition entre la tension de surface et la différence d'énergie libre entre la phase de basse et haute température. Il a été proposé que la différence d'énergie entre la phase d'équilibre et les états α : $\Delta f = f - f_\alpha$ soit compensée par leur entropie $T\Sigma(f_\alpha)$. Cette idée peut-être mise sur des bases fermes [25].

Considérons l'expérience de pensée suivante : supposons que l'on ait équilibré le système, qui se trouve alors dans un état α . Maintenant, on gèle le système hors d'une boule de rayon R , et on le laisse évoluer à l'intérieur de cette boule. La fonction de partition de la boule s'écrit :

$$\begin{aligned} Z(R) &\simeq \exp(-\beta f_\alpha R^d + \beta \Upsilon R^\theta) + \sum_{\gamma \neq \alpha} \exp(-\beta f_\gamma R^d) \\ &\simeq \int df \exp\left(-(\beta f + \Sigma(f))R^d\right) + \exp\left(\beta f_\alpha R^d - \beta \Upsilon R^\theta\right) \\ &\simeq e^{-\beta f^* R^d} \left[e^{-\Sigma(f^*)R^d} + e^{\beta \Upsilon R^\theta} \right] \end{aligned} \quad (1.121)$$

où le terme ΥR^θ est dû à la discordance entre les états γ et l'état α , avec $d/2 \leq \theta \leq d-1$. On voit clairement sur (1.121) qu'il apparaît une longueur de fracturation de l'état α donnée par :

$$\xi_* = \left(\frac{\Upsilon}{T\Sigma(T)} \right)^{\frac{1}{d-\theta}} \quad (1.122)$$

Si $R < \xi_*$, l'état α est homogène, il y a alors un nombre exponentiel d'états stables. Le système est essentiellement "champ moyen". Si $R > \xi_*$, les processus de relaxation déstabilisent l'état α . Celui-ci se fractionne en clusters de taille $\sim \xi_*$. Dans un liquide surfondu réel, le système n'est pas autoritairement gelé à l'extérieur. Il s'agit d'un gel auto-induit des particules.

En toute généralité, le temps de relaxation peut alors s'écrire :

$$\ln \tau \sim \beta \xi_*^\psi \sim \left(\frac{\Upsilon}{T\Sigma(T)} \right)^{\frac{\psi}{d-\theta}} \quad (1.123)$$

avec $\Sigma(T) \sim (T - T_K)^{-1}$. Cette description ne fait que s'inspirer de la théorie de la nucléation. Par exemple, dans la nucléation, une fois atteint le rayon critique R_c , le système bascule dans un état et l'ordre se développe bien au-delà de R_c . Ici, une fois ξ_* atteint le système se "brise" en plusieurs états, les tessons de la mosaïque. De plus, la tension de surface n'est pas ici liée à une différence d'énergie libre (dans la vision de champ moyen, tous les états ont la même) mais à une "discordance" entre les états : il n'est pas physiquement évident que celle-ci soit liée au coefficient du terme en gradient carré du paramètre d'ordre (comme dans la description de van der Waals).

4.3 D'un scénario à une théorie.

La description précédente introduit un certain nombre d'exposants : θ , ψ , et une "tension de surface" Υ dont les valeurs sont inconnues. Plusieurs arguments et résultats donnent une vision contrastée des jeux d'exposants à choisir.

L'argument de Kirkpatrick, Thirumalai & Wolynes

Ou pourquoi $\theta = \psi = 3/2$

L'argument de Kirkpatrick, Thirumalai et Wolynes [109] a pour but de déterminer les barrières d'énergie ΔF^* que le système doit franchir pour relaxer. Ces barrières résultent de la compétition entre d'un côté la complexité, la force motrice, et de l'autre la discordance entre états, le frein. Nous reprenons ici, le plus clairement possible, les arguments originaux donnés par Kirkpatrick, Thirumalai et Wolynes [109].

- *Force motrice* : L'énergie libre associée à la complexité s'écrit pour un objet de taille ξ :

$$F_{mot} = -T\Sigma(T)\xi^d \sim -\epsilon\xi^d \sim -\epsilon^{1-\nu d} \quad (1.124)$$

si l'on suppose qu'il existe une longueur coopérative divergente à T_K . La question est de fixer la valeur de ν . Le paramètre d'ordre statique est ici donné par la corrélation des fluctuations de densité : $\langle \delta\rho(\mathbf{x})\delta\rho(\mathbf{x}') \rangle$. Le paramètre d'ordre est discontinu à la transition T_K et fait un saut de hauteur q . Couplons tout d'abord un champ h à $\delta\rho(\mathbf{x})$, h n'est autre que le saut de potentiel chimique à la transition. Si l'on fait une hypothèse d'homogénéité de l'énergie libre, la partie singulière de l'énergie libre est alors donnée par :

$$f(h, L) \sim L^{-\zeta} \mathfrak{f}(L/\xi') \sim L^{-\zeta} \mathfrak{F}(hL^{1/\nu'}) \quad (1.125)$$

où par définition $\xi' \sim h^{-\nu'}$. Or,

$$\left(\frac{\partial}{\partial h} f\right)^2 = \frac{1}{L^{2d}} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \delta\rho(\mathbf{x})\delta\rho(\mathbf{x}') \sim L^{-d} q \quad (1.126)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial h} f\right)^2 \sim L^{-2\zeta+2/\nu'} (\mathfrak{F}'(hL^{1/\nu'}))^2 \quad (1.127)$$

D'où :

$$\frac{1}{\nu'} - \zeta = -\frac{d}{2} \quad (1.128)$$

En considérant que la susceptibilité, $\chi = L^{-d} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \langle \delta\rho(\mathbf{x})\delta\rho(\mathbf{x}') \rangle_c$, varie comme $\sim L^0$, les relations d'échelle, $\chi \sim L^{\zeta-2/\nu'} \mathfrak{F}''(hL^{1/\nu'})$ donnent :

$$\zeta = \frac{2}{\nu'} \quad (1.129)$$

On est ainsi conduit à :

$$\nu' = \frac{2}{d} \quad (1.130)$$

$$\zeta = d \quad (1.131)$$

L'argument se termine en identifiant ν et ν' .

- *Frein* : Le coût des inhomogénéités est donné par : $\Upsilon(T)L^\theta$. Le choix naïf $\theta = d - 1$ conduirait en utilisant (1.123) à $\nu = 1$, et donc on ne retrouverait pas la loi de Vogel-Fulcher. Il faut pour cela que $\theta = d/2$. Un argument simple permet de comprendre l'origine possible d'une telle valeur de θ . Il faut accepter pour cela que Υ dépende de L . Considérons l'interface séparant deux états de taille R . Comme il y a un nombre extensif d'états, les fluctuations d'énergie libre entre deux états sont typiquement gaussiennes d'ordre $\pm R^{d/2}$. Ces fluctuations peuvent stabiliser l'apparition d'un troisième état entre les deux états de départ. Disons pour fixer les idées qu'il s'agit un cylindre de taille r et de hauteur h . Il faut donc mettre en balance le gain dû aux fluctuations $\sim r^{d/2}\sqrt{h/r}$ et le coût en tension de surface $\Upsilon r^{d-1}(h/r)^2$. La stabilité des états aux fluctuations d'énergie libre (*i.e.* la minimisation par rapport à h) donne :

$$h \sim \Upsilon^{-2/3} r^{(5-d)/3} \quad (1.132)$$

Et donc le gain d'énergie interfaciale $d\Upsilon(r)$ est donné par :

$$d\Upsilon(r) \sim -A_0 \Upsilon^{-1/3} r^{(-2d+1)/3} dr \quad (1.133)$$

D'où $\Upsilon(r) \sim r^{-(d-2)/2}$, ce qui conduit à $\theta = d/2$.

Un calcul *ab initio*

Où l'on prouve que $\theta = d - 1$

Un modèle récemment introduit [80] a permis un calcul *ab initio* du terme de tension de surface. Ce modèle est défini par :

$$\mathcal{H} = - \sum_{i_1, \dots, i_p} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} \quad (1.134)$$

Les couplages sont des variables aléatoires gaussiennes identiquement distribuées de valeur moyenne nulle et de variance donnée par :

$$\sigma_{i_1 \dots i_p}^2 = \frac{1}{2} \gamma^{pd} \sum_k \phi(\gamma|i_1 - k|) \dots \phi(\gamma|i_p - k|) \quad (1.135)$$

La fonction $\phi(|x|)$ est une fonction non-négative, rapidement décroissante au-delà de γ^{-1} . Ce modèle constitue une réalisation microscopique idéale pour tester les idées de la RFOT : il interpole continûment entre la limite de champ moyen (le modèle à p spins) et la dimension finie.

L'expérience de pensée du paragraphe précédent trouve un contenu opératoire avec le pseudo-potentiel (voir l'annexe A). La configuration de référence σ est figée, et l'on regarde une configuration τ de recouvrement q avec σ . Dans la limite où γ^{-1} est petit, on peut s'intéresser à un recouvrement $q(x)$ moyenné sur un volume γ^{-d} . Le pseudo-potentiel $V[q(x), T]$ permet donc d'avoir accès à la barrière de nucléation.

En prenant la limite thermodynamique, on peut montrer que :

$$V[q(x), T] = -\frac{T\gamma^d}{N} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow 1} \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial m} \overline{Z_{mn}[q(x)]} \quad (1.136)$$

où la fonction de partition Z_{mn} est celle d'un système répliqué $n \times m$ fois. Dans chaque sous bloc de taille $m \times m$, la première réplique a un recouvrement $q(x)$ avec les $(m - 1)$ autres (voir le paramétrage de l'annexe A). La fonction de partition Z_{mn} peut s'écrire [74] :

$$\overline{Z_{mn}[q(x)]} = \int \mathcal{D}Q_{ab}(x) \exp \frac{1}{\gamma^d} \left(\int d^d x f_{MF}(Q(x)) - \frac{\beta}{2} \text{Tr}(\nabla Q(x))^2 \right) \quad (1.137)$$

où $f_{MF}(Q(x))$ est l'action effective du modèle à p spins de portée infinie.

Dans la limite $\gamma \rightarrow \infty$ (limite de Kač), les solutions homogènes $Q(x) = Q$ redonnent les résultats de champ-moyen. L'étude des solutions inhomogènes peut se faire entre T_d et T_s en supposant que $r = q$ en chaque point de l'espace. Il s'agit là du paramétrage le plus simple. On montre alors que [72, 74] :

$$V[q(x), T] = \frac{1}{N} \int d^d x V_{MF}(q(x), T) + \frac{1}{2} \nabla^2 q(x) \quad (1.138)$$

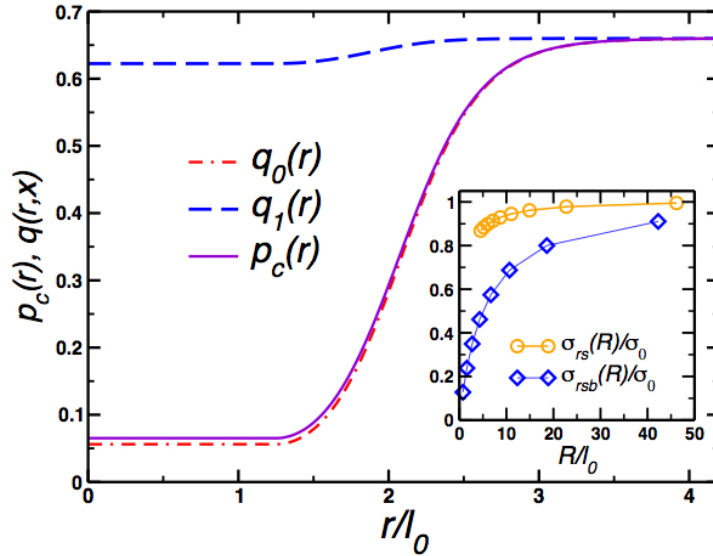


FIGURE 1.7 – Profil des instantons près de T_s . La vignette représente l'évolution de la tension de surface en fonction de la taille de la boule. Le paramètre $p(x)$ correspond au recouvrement local entre une configuration de référence α et la configuration réellement figée à l'extérieur de la boule, $q_1(x)$ et $q_0(x)$ sont les recouvrement entre deux configurations contraintes suivant qu'elles appartiennent ou non aux mêmes états métastables. Le fait que $p(x) \simeq q_0(x)$ permet de simplifier le paramétrage. (Extrait de [72])

L'équation pour q est ainsi donnée par :

$$\nabla^2 q = \frac{d}{dq} V_{MF} \quad (1.139)$$

La résolution de cette équation donne accès aux barrières, et une fois que l'on a retiré la contribution volumique $-TR^d \Sigma(T)$, on a ainsi une estimation de la tension de surface (voir fig. 1.7). Le calcul d'instanton conduit ici à $\theta = d - 1$. Plus précisément, l'étude des solutions à symétrie radiale de l'équation (1.139) a permis de montrer l'existence de deux longueurs croissantes [76] (voir également l'introduction du chapitre 4). Une première $l_d \sim (T - T_d)^{-1/4}$ correspond à celle prédite par la MCT. La seconde est donnée par $l_s \sim 1/\sigma(T) \sim (T - T_s)^{-1}$, ce qui correspond à $\theta = d - 1$.

Et des simulations de sphères molles en dimension 3.

- *Fluctuations de tension de surface* : L'expérience de pensée de la section 4.2 a été récemment simulée [20,46] sur un mélange binaire de sphères molles interagissant via le potentiel :

$$V = \sum_{i < j} v_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \sum_{i < j} \left[\frac{\sigma_{\gamma(i)} \sigma_{\gamma(j)}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right]^{12} \quad (1.140)$$

où $\gamma = 1, 2$. Les diamètres sont choisis de sorte que le mélange soit un liquide fragile. Le système de particules est thermalisé au moyen d'un algorithme Monte-Carlo d'échange. Le système est ensuite figé en-dehors d'une sphère de rayon R , et l'intérieur de la sphère est à nouveau thermalisé.

Afin de sonder l'existence d'états mosaïques, le recouvrement local au centre de la sphère $q_c(R)$ est estimé [20] par :

$$q_c(R) = \frac{1}{l^3 N_c} \sum_{i \in \mathcal{V}} \langle n_i(t_0) n_i(t_0 + \infty) \rangle. \quad (1.141)$$

l est la taille des boîtes élémentaires, n_i le nombre de particules dans la boîtes i , $\mathcal{V}$ est un voisinage du centre de la sphère, et la valeur moyenne canonique $\langle . \rangle$ est obtenue en moyennant sur les états figés. Deux configurations totalement décorrélées ont un recouvrement égal à l^3 , il faut donc retrancher cette contribution triviale. $q_c(R)$ est un exemple de fonction de corrélation d'un "point à un ensemble" (*point-to-set* [137]). Les données obtenues par [20] sont montrées à la figure 1.8. En

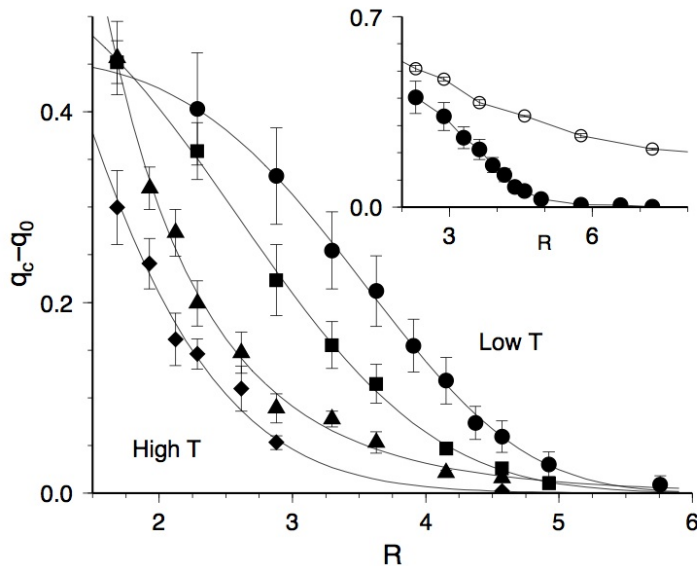


FIGURE 1.8 – Evolution du recouvrement local au centre de la cavité en fonction de la taille de la cavité pour différentes températures ($T = 0.482$ pour les diamants, 0.35 pour les triangle, 0.246 pour les carrés et 0.203 pour les cercles, $T_{MCT} = 0.226$). q_0 désigne la contribution triviale en l^3 . Les lignes pleines sont des ajustements utilisant une exponentielle étirée. L'encart montre la comparaison entre le recouvrement local au centre de la boule et le recouvrement calculé sur l'ensemble de la boule. (Extrait de [20])

premier lieu, il existe clairement une longueur qui augmente quand la température est abaissée. Cela valide sans ambiguïté l'utilité des corrélateurs *point-to set*. Cela

donne un objet thermodynamique, certes complexe, mais qui est sensible à l'arrêt structural. On remarque ensuite que bien que la température la plus basse soit inférieure à T_d , il n'apparaît pas de plateau dans $q_c(R) - l^3$ qui indiquerait la présence d'un état mosaïque qui aurait envahi toute la cavité et qui serait fixé par les bords. Cependant, on constate qu'à basse température, $q_c(R) - l^3$ change de concavité. Une façon de rendre compte de ce changement, et d'ajuster aux données une loi de type exponentielle comprimée :

$$q_c(R) - l^3 = Qe^{-\left(\frac{R}{\xi}\right)^\mu} \quad (1.142)$$

On constate que $\mu = 1$ pour $T > T_d$, ce qui correspond à une simple décroissance exponentielle, et croît pour $T < T_d$.

Pour rendre compte de cette évolution au sein de la RFOT, il faut ajouter le fait que les tensions de surface Υ peuvent fluctuer. En effet, si l'on récrit la fonction de partition de la cavité :

$$Z(R) \simeq \exp(-\beta f_\alpha R^d) + \sum_{\gamma \neq \alpha} \exp(-\beta f_\gamma R^d + \beta \Upsilon_{\alpha\gamma} R^\theta) \quad (1.143)$$

Et en introduisant : $\mathcal{N}_\alpha(f, \Upsilon) = \sum_\gamma \delta(f - f_\alpha) \delta(\Upsilon - \Upsilon_{\alpha\gamma})$,

$$\sum_{\gamma \neq \alpha} e^{-\beta f_\gamma R^d - \beta \Upsilon_{\alpha\gamma} R^\theta} = \int df \int d\Upsilon e^{-\beta f_\gamma R^d - \beta \Upsilon R^\theta} p_\alpha(\Upsilon|f) \quad (1.144)$$

Le comportement de $p_\alpha(\Upsilon|f)$ peut être de deux types : i) soit cette quantité s'annule en-deçà d'une certaine valeur y_α , et donc $\int d\Upsilon \exp(-\beta \Upsilon R^\theta) \sim \exp(-\beta y_\alpha R^\theta)$, ii) soit cette quantité décroît comme $\exp(-c_\alpha v^{-a})$, et à ce moment là $\int d\Upsilon \exp(-\beta \Upsilon R^\theta) \sim \exp(-\beta y'_\alpha R^{\theta'})$, où $\theta' = a\theta/(a+1) < \theta$. En utilisant un θ renormalisé ou non (suivant que l'on se situe dans le cas i) ou ii)), la probabilité de trouver la cavité dans un état différent de celui donné par les conditions au bord est ainsi :

$$p(R) = \sum_\alpha w_\alpha p_\alpha(R) \quad (1.145)$$

où w_α est le poids thermodynamique de chaque état figé α et

$$p_\alpha(R) = \int d\Upsilon e^{\Sigma(f^*)R^d - \beta \Upsilon R^\theta} p_\alpha(\Upsilon|f^*) \left[1 + \int d\Upsilon e^{\Sigma(f^*)R^d - \beta \Upsilon R^\theta} p_\alpha(\Upsilon|f^*) \right]^{-1} \quad (1.146)$$

En introduisant $P(Y) = \sum_\alpha w_\alpha \delta(Y - y_\alpha)$, il vient :

$$\begin{aligned} p(R) &= \int dY P(Y) e^{\beta \Sigma(f^*)R^d - \beta Y R^\theta} \left[1 + e^{\Sigma(f^*)R^d - \beta Y R^\theta} \right]^{-1} \\ &\sim \int_0^{T\Sigma(f^*)R^{d-\theta}} P(Y) dY \end{aligned} \quad (1.147)$$

Et donc, on trouve naturellement

$$q_c(R) - l^3 = (q_1 - q_0) \int_{T\Sigma(f^*)R^{d-\theta}}^\infty P(Y) dY \quad (1.148)$$

où q_0 est le recouvrement entre les configurations à l'intérieur de la cavité différant des conditions aux bords, et q_1 le recouvrement de la cavité avec elle-même.

Pour finir, on note que si l'on prend une distribution de Weibull :

$$P(Y) = -\frac{d}{dY} \exp - \left(\frac{Y}{Y_c} \right)^\nu, \quad (1.149)$$

la relation entre ξ et la complexité Σ est conservée :

$$\xi \sim \left(\frac{Y_c}{T\Sigma(f^*)} \right)^{\frac{1}{d-\theta}} \quad (1.150)$$

Et, l'on a : $\mu = \nu(d - \theta)$.

- *Détermination de la tension de surface* : Des simulations sur le même système de sphères molles ont pour but de déterminer les différents exposants [35, 36], que l'expérience de cavité ne permet pas de fixer. L'expérience de cavité conduit à un mélange d'états qui ne permet pas de sonder la distribution de probabilité des tensions de surface. Il a été proposé l'expérience suivante [36] : prendre deux configurations équilibrées α et β et les échanger au sein d'une cavité de rayon R (voir figure 1.9). Ces configurations sont ensuite à nouveau thermalisées.

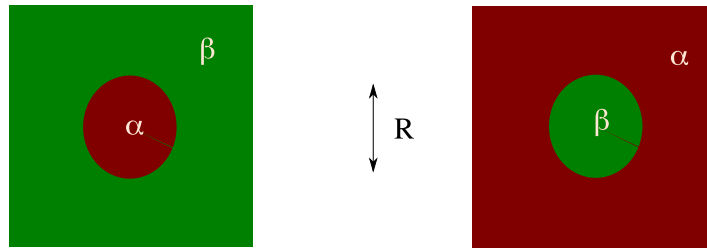


FIGURE 1.9 – Configurations mixtes initiales.

La différence d'énergie :

$$\Delta E_{\alpha\beta} = E_{\alpha\beta} - E_{\alpha}^{in} - E_{\beta}^{out} \quad (1.151)$$

où

$$E^{in} = \sum_{(i,j), \mathbf{r}_i < R} v_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad E^{out} = \sum_{(i,j), \mathbf{r}_i > R} v_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (1.152)$$

On peut penser que : $\langle \Delta E_{\alpha\beta} \rangle \sim R^\theta$, et que la relaxation de $\langle \Delta E(R, t) \rangle$ donne accès à ψ . Les données numériques sont compatibles avec $\theta = 2$, la première correction suivant une loi en $R^{3/2}$, et avec $\psi = 1$. De manière surprenante, ce jeu d'exposant redonne la loi VFT.

Une expérience similaire a été conduite sur les structures inhérentes (*i.e.* les minimas de l'énergie potentielle) de ce système [35]. L'analyse des données arrive aux mêmes conclusions.

Discussion

Que retenir de ces différentes approches ? Que ce soit les simulations de sphères molles ou la résolution du modèle à p spins de dimension finie, les expériences de cavités montrent clairement deux régimes suivant que l'on se situe en-dessous ou au-dessus de la température dynamique. Cela conforte le scénario RFOT.

Néanmoins, des divergences quantitatives apparaissent dans la détermination des exposants. Il n'y a pour l'heure pas d'argument solide permettant de favoriser l'un ou l'autre jeu d'exposants. La détermination des exposants dans les expériences de sphères molles est loin d'être irréfutable. L'analyse des données est délicate. Par ailleurs, prendre deux minima de l'énergie et les interchanger brutalement conduit vraisemblablement à une relaxation "triviale" de l'énergie proportionnelle à la surface. On peut par exemple argumenter qu'il faudrait dans ce cas retirer cette contribution et regarder les fluctuations de la tension de surface qui elles suivent l'exposant prédit par Kirkpatrick, Thirumalai et Wolynes. En effet, l'argument KTW montre que les états mosaïques optimisent leur taille de façon à bien s'adapter les uns aux autres. Dans l'expérience on l'on échange deux états, on force le système à suivre une géométrie qui ne lui est sans doute pas favorable.

Par ailleurs, la résolution du modèle à p spins de dimension finie s'effectue en suivant une géométrie radiale. En $d = 2$, l'argument KTW et ce modèle prédisent le même exposant. En $d = 3$, on peut argumenter que si la surface des états possède une géométrie complexe (fractale,...), les calculs d'instantons ne sont plus valables. Or, l'argument KTW tend à prévoir des excitations si ce n'est non-compactes, ayant au moins une surface complexe. Une façon d'obtenir une conclusion nette sur ce que contient le modèle à p spins serait de pouvoir le simuler numériquement, ce qui n'est malheureusement guère possible avec les moyens de calcul numérique actuels. Ce constat renforce le besoin d'un modèle de même type mais accessible numériquement.

Annexe A : La méthode du pseudo-potentiel.

Cette méthode est une réécriture formelle de la méthode des deux répliques. Elle permet de définir une observable (le pseudo-potentiel) [7, 75, 115] qui contient toute l'information sur la stabilité des états et leur apparition. En effet, on va voir que le pseudo-potentiel a une forme de potentiel du premier ordre. Il est ainsi possible de faire une analogie complète avec la théorie de la nucléation.

Définition

Prenons une configuration d'équilibre σ , et considérons la fonction de partition d'un système τ identique mais couplé à σ par un champ ϵ :

$$Z(\sigma, \epsilon, T) = \int d\tau e^{-\beta\mathcal{H}(\tau) + \beta N \epsilon q(\sigma, \tau)} \quad (1.153)$$

$$q(\sigma, \tau) \equiv \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \tau_i \quad (1.154)$$

Dans la limite thermodynamique, $NF(\sigma, \epsilon, T) = -T \ln Z(\sigma, \epsilon, T)$ ne doit pas dépendre d'un choix spécifique de la configuration d'équilibre σ , on est donc fondé à moyenner $F(\sigma, \epsilon, T)$ sur la distribution des états d'équilibre σ :

$$F(\sigma, \epsilon, T) = -\frac{T}{N} \int d\sigma \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{Z(\beta)} \ln Z(\sigma, \epsilon, T) \quad (1.155)$$

Introduisons, le pseudo-potentiel $V(q, T)$ défini comme la transformée de Legendre de l'énergie libre $F(\epsilon, T)$:

$$V(q, T) = \max_{\epsilon} [F(\epsilon, T) + \epsilon q] \quad (1.156)$$

$$q(\epsilon) = -\frac{\partial}{\partial \epsilon} F(\epsilon, T) = \langle q(\sigma, \tau) \rangle_{\epsilon} \quad (1.157)$$

Par définition, le pseudo-potentiel est l'énergie libre du système τ contraint à garder le recouvrement q avec la configuration σ :

$$V(q, T) = -\frac{T}{N} \int d\sigma \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{Z(\beta)} \ln Z(\sigma, q, T) \quad (1.158)$$

$$Z(\sigma, \epsilon, T) = \int d\tau e^{-\beta\mathcal{H}(\tau)} \delta(q - q(\sigma, \tau)) \quad (1.159)$$

Dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$, l'équation de stationnarité pour q , donne les extrema de $V(q, T)$, et donc les minima de $V(q, T)$ indique les phases possibles.

Théorie des répliques : cas du modèle à p spins

Pour tenir compte des états métastables, il faut introduire des configurations de référence équilibrées à d'autres températures. On peut alors exprimer le pseudo-potentiel en introduisant les répliques :

$$V(q, T, T') = -\lim_{n \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow 1} \frac{T}{Nn} \partial_m \left(\int d\sigma e^{-\beta' \mathcal{H}(\sigma)} Z(\sigma, q, T)^{m-1} \right)^n \quad (1.160)$$

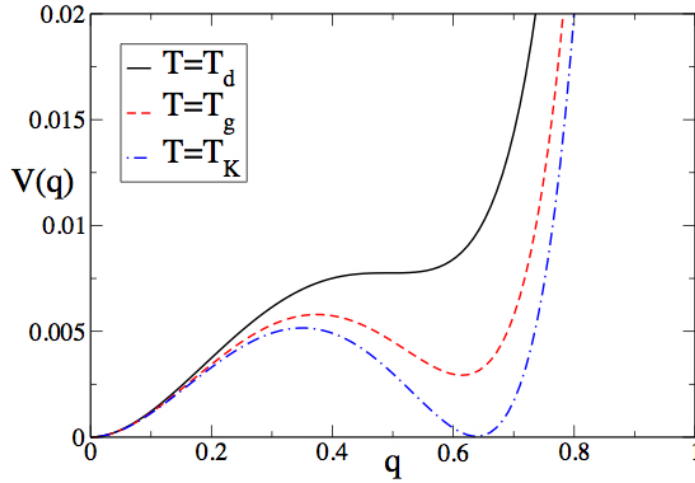


FIGURE 1.10 – Le pseudo-potentiel du p-spin (extrait de [166])

Une fois la moyenne sur le désordre effectuée, le pseudo-potentiel pris au point-col s'écrit :

$$V(q, T, T') = - \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow 1} \frac{T}{n} \partial_m f(Q) \quad (1.161)$$

$$f(Q) = \frac{1}{4} \sum_{a\alpha, a'\alpha'} \beta_\alpha \beta'_{\alpha'} Q_{a\alpha, a'\alpha'} + \frac{1}{2} \text{Tr} \ln Q \quad (1.162)$$

La structure du problème montre le rôle dissymétrique entre τ et σ . Plus précisément, les configurations σ sont *a priori* indépendantes, et dans le cas du modèle à p spins, les configurations d'équilibre sont données par un Ansatz à un pas de brisure. Les $(m-1)$ configurations τ couplées à chaque configuration σ ont avec elles un recouvrement q , mais peuvent avoir entre elles un recouvrement $r \neq q$. Le paramétrage de Q est ainsi donné par :

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & q & q & q \\ q & 1 & r & r \\ q & r & 1 & r \\ q & r & r & 1 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 1 & q & q & q \\ q & 1 & r & r \\ q & r & 1 & r \\ q & r & r & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (1.163)$$

Au final, on trouve :

$$V(q, T, T') = -\frac{T}{2} \left(\beta \beta' q^p - \frac{\beta^2}{2} r^p + \frac{\beta^2}{2} + \ln(1-r) + \frac{r-q^2}{1-r} \right) \quad (1.164)$$

$$(1.165)$$

où $r(q)$ est déterminé par $\partial_r V = 0$.

Pour la région de températures qui nous intéresse, $T = T' \geq T_s$, la stationnarité de $V(q, T)$ par rapport à r et q donne $r(q) = q$. Cette condition est équivalente à : $df/dQ = 0$, la matrice Q a une structure de type 1-RSB. On a alors :

$$\frac{f(Q)}{nm} = f_{Parisi}(m, q, T) \equiv -\frac{T}{Nn} \ln \overline{Z_p^n} \quad (1.166)$$

Et donc,

$$V(q, T, T') = - \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow 1} \partial_m (m f_{Parisi}(m, q, T)) \quad (1.167)$$

Pseudo-potentiel et complexité

Le lien entre $V(q, T)$ et les états TAP est assez simple. La figure 1.10 montre que pour $T > T_d$, il n'y a qu'un seul minimum, celui de la solution paramagnétique. A partir de T_d apparaît un minimum secondaire à une valeur finie $0 < q^* < 1$, correspondant au recouvrement des états TAP d'équilibre :

$$V(q^*(T), T) - V(0, T) = T \Sigma(f^*(T)) \quad (1.168)$$

On obtient ainsi le recouvrement, l'énergie-libre et la complexité des états TAP d'équilibre.

On peut également avoir accès aux états TAP métastables. Pour cela, on considère une configuration de référence σ à une autre température T' . Cette configuration est un état TAP d'équilibre à T' , et la configuration τ proche de σ est contrainte à évoluer à une température T . Et donc,

$$V(q^*(T, T'), T, T') = f_{TAP}(E(T'), T) \quad (1.169)$$

On a ainsi accès à tous les états TAP.

Chapitre 2

R.O.M. : Thermodynamique

Malgré l'importance du lien entre théorie de couplage de modes (MCT) et modèles 1-RSB, peu de travail numérique a été consacré à ce sujet. Cependant, une compréhension précise de ces systèmes en taille finie s'avère d'une grande utilité pour discriminer les effets provenant de la taille ou de la dimension finie. Plusieurs raisons viennent expliquer l'absence de tels travaux.

La principale explication tient à la lenteur de la dynamique de ces modèles. Plus encore que dans les autres modèles de verres de spins, un bon échantillonnage de la dynamique requiert un nombre d'itérations Monte-Carlo augmentant rapidement avec la taille du système, et ce même en utilisant des algorithmes efficaces comme le *parallel tempering*. Cela exige d'importants moyens de calculs. Par exemple, chaque itération Monte-Carlo du modèle à p spins demande N^p opérations. Or, ce modèle ne connaît une transition 1-RSB (et donc suit une dynamique MCT) que pour $p \geq 3$. Cela conduit à des simulations numériques particulièrement lourdes.

Une autre difficulté vient de l'interprétation des résultats. Des modèles 1-*RSB* ayant des interactions à deux corps existent, comme le modèle de Potts à q états (pour $q > 4$), ou le modèle R.O.M.. Une étude détaillée du modèle de Potts à 10 états a conduit à des résultats surprenants : pas d'effets de cage, exposants de *finite-size scaling* inhabituels... [27–30].

La dynamique comme la thermodynamique du ROM ont été peu étudiées numériquement, les rares simulations existantes tombant hors d'équilibre pour des tailles modestes ($N \simeq 50$) [48, 49, 52, 53, 126, 146]. Pourtant, ce modèle présente l'intérêt d'avoir une forte séparation entre température dynamique et statique.

Nous allons montrer comment la thermodynamique complexe du ROM influe sur sa dynamique, et sur la difficulté de le simuler numériquement. Ce chapitre est organisé de la manière suivante : dans la première partie, nous détaillons la solution analytique de la thermodynamique du ROM (paramétrage à un pas de brisure des répliques, calcul du pseudo-potentiel). Le lien avec les modèles sphériques permet de relier l'existence d'une transition 1-RSB aux propriétés du spectre des matrices de couplage. Dans la deuxième partie, nous montrons la difficulté des simulations numériques sur le ROM, et la faible efficacité des algorithmes habituels. La troisième partie est consacrée à l'étude numérique de la thermodynamique du ROM. Celle-ci confirme l'existence d'une transition 1-RSB.

1 Présentation du modèle.

Le modèle ROM est défini par [126] :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j \quad (2.1)$$

Les variables S_i sont des spins d'Ising $S_i = \pm 1$. La matrice de couplage J est donnée par :

$$J \equiv {}^t \mathcal{O} \Lambda \mathcal{O} \quad (2.2)$$

où la matrice $\mathcal{O}$ est une matrice aléatoire du groupe orthogonal $\mathcal{O}(N)$ distribuée suivant la mesure invariante de Haar et la matrice Λ est une matrice diagonale dont les éléments λ sont tirés suivant la distribution $\rho(\lambda) = (1-\alpha)\delta(\lambda+1) + \alpha\delta(\lambda-1)$. Le modèle originalement introduit dans [126] correspond au cas $\alpha = 1/2$, puis a été généralisé au cas α quelconque dans [48, 49].

La thermodynamique de ce modèle est résolue par l'utilisation de la méthode des répliques. La fonction de partition répliquée du ROM s'écrit :

$$\overline{Z^n} = \int d\mathcal{O} \sum_{\{S_i^a\}} \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{ij} \sum_{a=1}^n S_i^a S_j^a \mathcal{O}_{ij} \right) \quad (2.3)$$

Et en adaptant les résultats d'Itzykson et Zuber [95] aux matrices orthogonales, on montre que, dans la limite $N \rightarrow \infty$:

$$\int d\mathcal{O} \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{ij} \sum_a S_i^a S_j^a \mathcal{O}_{ij} \right) = \exp \left(N \text{Tr} G \left(\frac{\beta}{N} \sum_a S_i^a S_j^a \right) \right) \quad (2.4)$$

La fonction $G(z)$ est donnée par :

$$G(z) = \int_0^1 dt \frac{\psi(zt) - 1}{t} \quad (2.5)$$

où

$$\psi(z) = \int d\lambda \rho(\lambda) \frac{1}{1 - j(z)\lambda} \quad (2.6)$$

$j(z)$ vérifiant :

$$z = j(z) \int d\lambda \rho(\lambda) \frac{1}{1 - j(z)\lambda} \quad (2.7)$$

ce qui conduit ici à [49] :

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 + 4z(t+z)} + t \ln(t + 2z + \sqrt{1 + 4z(t+z)}) \right] \\ &- \frac{1}{2} \left[\ln(1 + 2tz + \sqrt{1 + 4z(t+z)}) - t \ln(t+1) - 1 - \ln 2 \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

avec $t = \text{Tr} J = 2\alpha - 1$. En remarquant que, $\forall k \in \mathbb{N}^*$,

$$\text{Tr} \left(\frac{\beta}{N} \sum_a S_i^a S_j^a \right)^k = \text{Tr} (\beta Q_{ab})^k \quad (2.9)$$

où la matrice $Q_{ab} \equiv N^{-1} \sum_i S_i^a S_i^b$. Pour effectuer la trace sur les variables de spin, il suffit d'insérer $1 = \int \mathcal{D}Q_{ab} \delta(NQ_{ab} - \sum_i S_i^a S_i^b)$ dans la fonction de répartition répliquée :

$$\overline{Z^n} = \int \mathcal{D}Q_{ab} \exp \left(N \text{Tr} G(\beta Q_{ab}) \right) \sum_{\{S_i^a\}} \delta \left(NQ_{ab} - \sum_i S_i^a S_i^b \right) \quad (2.10)$$

Le calcul du point col de cette intégrale conduit à rendre extrémale la fonctionnelle suivante :

$$\frac{\ln \overline{Z^n}}{N} = \frac{1}{2} \text{Tr} G(\beta Q) - \frac{\beta}{2} \text{Tr} Q G'(\beta Q) + \ln \sum_{S^a} \exp \left(\sum_{ab} [G'(\beta Q)]_{ab} S^a S^b \right) \quad (2.11)$$

Enfin, il faut paramétrer la matrice Q_{ab} afin d'effectuer le prolongement analytique $n \rightarrow 0$. Différents paramétrages sont possibles. Leur choix est en général guidé par des considérations physiques. En effet, l'étude précise de l'existence et de la stabilité de tels paramétrages s'avèrent très délicates et n'a été conduite que dans de rares cas (modèle à p spins).

Les modèles désordonnés de spins habituels sont décrits par trois types de paramétrage : un paramétrage invariant par permutation des répliques, généralisant la solution recuite, un paramétrage à un pas de brisure donnant lieu à une transition souvent discontinue et un paramétrage dit complètement brisé donnant lieu à une transition continue. Ces différents paramétrages donnent une structure hiérarchique à l'espace des phases. Ils fixent la probabilité que deux copies indépendantes du même système aient un recouvrement q [135].

1.1 Solution invariante par permutation des répliques (RS)

La solution la plus naïve consiste à prendre la moyenne de la fonction de partition. Il s'agit de la solution recuite. Dans le cas du ROM, celle-ci conduit à :

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{1}{2\beta} G(\beta) \quad (2.12)$$

$$s = \ln 2 + \frac{1}{2} G(\beta) - \frac{\beta}{2} G'(\beta) \quad (2.13)$$

L'entropie du modèle recuit s'annule à une température T_A non-nulle signalant une transition de phase (voire fig. 2.1).

Un paramétrage de la matrice des répliques généralisant la solution recuite est le paramétrage symétrique des répliques ($Q_{ab} = \delta_{ab} + q$). Deux copies indépendantes du système ont un recouvrement égal à q avec probabilité 1. La solution recuite correspond à prendre $q = 0$. Le paramétrage RS conduit à une action :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln \overline{Z^n}}{nN} &= \frac{1}{2} [G(\beta(1-q)) + \beta q G'(\beta(1-q)) - \beta^2 q(1-q) G''(\beta(1-q))] \\ &\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \ln \left(2 \cosh(\beta z \sqrt{q G''(\beta(1-q))}) \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \tanh^2(\beta z \sqrt{q G''(\beta(1-q))}) \quad (2.15)$$

Une transition de phase continue caractérisée par une valeur non-nulle de q apparaît à T_c tel que : $\beta_c^2 G''(\beta_c) = 1$. Là encore, l'entropie s'annule à une valeur finie de la température, signalant une brisure de symétrie de l'invariance par permutation des répliques.

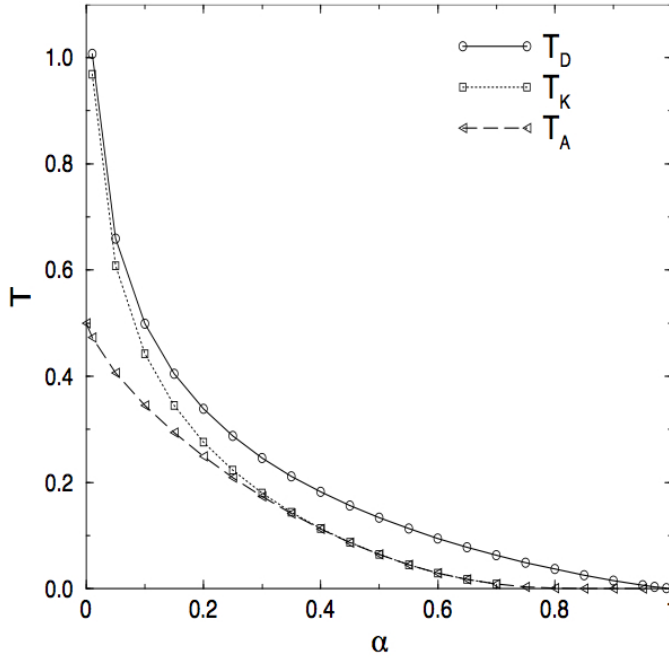


FIGURE 2.1 – Evolution du diagramme de phase en fonction de α . T_A désigne la température à laquelle l'entropie du modèle recuit s'annule, T_K est la température de brisure de la symétrie de permutation des répliques, T_d est la température dynamique déterminée par l'apparition d'un minima secondaire dans le pseudo-potentiel (Extrait de [48]).

1.2 Solution à un pas de brisure.

Un paramétrage à un pas de brisure (voir l'équation (1.84)) exprime que deux copies indépendantes ont une probabilité $1 - m$ d'avoir un recouvrement nul, et m d'avoir un recouvrement q . Le paramétrage 1-RSB conduit à [48] :

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln \overline{Z^n}}{nN} = \frac{m-1}{2m} G(\beta(1-q)) + \frac{1}{2m} G(\beta(1-q+mq)) - \frac{\lambda}{2} (1-q+mq) + \frac{1}{m} \ln \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \cosh^m(\beta z \sqrt{\lambda z}) \right) \quad (2.16)$$

$$\lambda = \frac{\beta}{m} (G'(\beta(1-q+mq)) - G'(\beta(1-q))) \quad (2.17)$$

Nous avons montré au chapitre 1 et à l'annexe A que l'existence d'une transition 1-RSB pouvait être complètement caractérisée par l'étude du pseudo-potentiel. Dans le cas d'une transition 1-RSB, celui-ci a une forme de potentiel du premier ordre. Il peut y avoir également une seconde transition vers une phase complètement brisée pour $T < T_s$, comme dans le cas du modèle à p spins d'Ising, il faudrait étudier pour cela la stabilité de la solution à un pas. Dans la région de température $T > T_s$, en reprenant les notations de l'annexe A, $r = q$. Le pseudo-potentiel $V(q)$ est ainsi donné par :

$$V(q) \equiv - \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow 1} \frac{\ln \overline{Z^n}}{nN} \quad (2.18)$$

$$= -\frac{1}{2} G(\beta(1-q)) - G(\beta) + \beta q G'(\beta) + \frac{1}{2} (1+q) \lambda - e^{-\frac{\lambda}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \cosh(\beta z \sqrt{\lambda z}) \ln \cosh(\beta z \sqrt{\lambda z}) \quad (2.19)$$

L'étude des minima de $V(q)$ montre l'existence de deux températures T_d et T_s . A T_d apparaît un minimum secondaire, qui devient le minimum absolu à T_s (voir fig 2.1). Cette structure donne de fortes présomptions que le ROM passe par une transition 1-RSB.

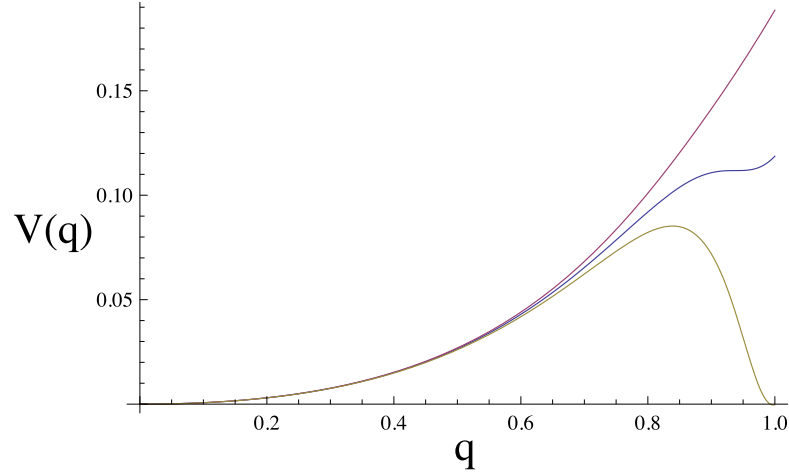


FIGURE 2.2 – Le pseudo-potentiel du ROM pour $\alpha = 0.4$, ici $T_d = 0.177$ et $T_s = 0.11$.

1.3 Lien avec les modèles sphériques [48].

Le ROM appartient à une classe de modèles dont les matrices de couplage sont invariantes sous l'action du groupe orthogonal $\mathcal{O}(N)$ [48]. De manière générale, ceux-ci sont définis par :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j \quad (2.20)$$

$$J = {}^t O \Lambda O \quad O \in \mathcal{O}(N) \quad (2.21)$$

où les matrices orthogonales O sont distribuées suivant la mesure de Haar du groupe $\mathcal{O}(N)$, et les éléments de la matrice diagonale Λ sont tirés au hasard suivant une distribution $\rho(\lambda)$. Par exemple, $\rho(\lambda) = (1-\alpha)\delta(\lambda+1) + \alpha\delta(\lambda-1)$ pour le ROM, ou $\rho(\lambda) = \sqrt{1-\lambda^2}/(2\pi)$ pour le modèle de Sherington-Kirkpatrick. Dans le cas des modèles sphériques, on peut relier l'existence d'une transition continue ou discontinue au bord du spectre des matrices J , *i.e.* au comportement de $\rho(\lambda)$, en comparant la résolution exacte du modèle et la méthode des répliques.

Dans le cas du modèle sphérique, la fonction de partition s'écrit, en posant par commodité $\beta = 1$:

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dS_i \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \frac{\mu}{2} \sum_i S_i^2 \right) \quad (2.22)$$

où μ est un paramètre de Lagrange introduit pour imposer la contrainte sphérique $\sum_i S_i^2 = N$. En passant dans la base qui diagonalise J , il vient :

$$Z = (2\pi)^{\frac{N}{2}} \prod_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{\mu - \lambda}} \quad (2.23)$$

Et donc, l'action de ce modèle est donnée par :

$$\frac{1}{N} \ln Z = \frac{1}{2} \ln 2\pi - \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \ln(\mu - \lambda) \quad (2.24)$$

Après avoir pris la moyenne sur le désordre :

$$g \equiv \frac{1}{N} \overline{\ln Z} = \frac{1}{2} \ln 2\pi - \frac{1}{2} \int \ln(\mu - \lambda) \rho(\lambda) d\lambda \quad (2.25)$$

Par ailleurs, on aurait pu tout aussi bien effectuer le calcul par la méthode des répliques. Dans ce cas,

$$\frac{\ln \overline{Z^n}}{N} = \frac{1}{2} \text{Tr} G(Q) - \frac{\mu}{2} \text{Tr} Q + \frac{1}{2} \text{Tr} \ln Q + \frac{n}{2} + \frac{n}{2} \ln 2\pi \quad (2.26)$$

Il est raisonnable de penser pour ce genre de modèles que le système minimise son énergie et se condense donc près de la valeur maximale de la matrice J . Sous cet argument, la matrice Q a donc un paramétrage invariant par permutation des répliques : $Q_{ab} = q_0 \delta_{ab} + q$. Ainsi,

$$g = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN} \ln \overline{Z^n} \quad (2.27)$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\mu(q_0 + q) - G(q_0) - qG'(q) - \ln q_0 - \frac{q}{q_0} \right) + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln 2\pi \quad (2.28)$$

La stationnarité de g par rapport à q conduit à :

$$G'(q_0) + \frac{1}{q_0} = \mu \quad (2.29)$$

Cette relation est valable quelle que soit la valeur de μ . En faisant varier μ ¹, on peut donc obtenir G . En comparant (2.25) et (2.28), et en utilisant la stationnarité de g par rapport à q_0 et q ,

$$\min_{q_0} (\mu q_0 - G(q_0) - \ln q_0) = 1 + \int \ln(\mu - \lambda) \rho(\lambda) d\lambda \quad (2.30)$$

Tant que $\mu > \sup_{\lambda} \rho(\lambda)$, le membre de droite est concave, la fonction G peut ainsi s'exprimer comme une transformée de Legendre :

$$G(z) = z\mu(z) - \int \ln(\mu(z) - \lambda) \rho(\lambda) d\lambda - \ln z - 1 \quad (2.31)$$

G étant stationnaire par rapport à z , $\mu(z)$ doit satisfaire :

$$z = \int \frac{1}{\mu - \lambda} \rho(\lambda) d\lambda \quad (2.32)$$

Et, l'on obtient pour finir :

$$G'(z) = \mu(z) - \frac{1}{z} \quad (2.33)$$

Dans le modèle sphérique la température critique est atteinte lorsque le système se condense sur la plus haute valeur propre, pour $\mu_c = \beta_c \lambda_M$. On peut montrer par un développement de Landau, que la température critique du modèle d'Ising et du modèle sphérique sont identiques. On a ainsi :

$$\int \frac{1}{\lambda_M - \lambda} \rho(\lambda) d\lambda = \beta_c \quad (2.34)$$

Le comportement de $\rho(\lambda)$ près du bord détermine donc la possibilité d'une transition continue. Si l'on revient au ROM, l'entropie s'annulant, il doit y avoir une transition. Or, $\rho(\lambda)/(\lambda_M - \lambda)$ n'est pas intégrable : $T_c = 0$, il n'y a pas de transition continue. On a donc une transition discontinue, ce que confirme le calcul du pseudo-potentiel.

1. Notons que la contrainte sphérique ne vaut alors plus 1.

2 Simulations numériques

La thermodynamique du ROM donne l'image d'un modèle connaissant une transition très discontinue, à des températures faibles ($T_s \simeq 0.1$, voir la section 2.2 pour le choix des paramètres). Dans la même normalisation, la température critique du modèle SK est $T_c = 1$. Il faut donc un algorithme efficace pour espérer obtenir des simulations équilibrées. Pour simuler les modèles de verre de spin habituels (SK), on a recours au *parallel tempering*. Cet algorithme s'est révélé particulièrement efficace sur ces systèmes ainsi que sur certains modèles 1-RSB (q -Potts, p-spin). Le ROM fait exception.

2.1 Parallel Tempering.

Le *parallel tempering* [92] est un algorithme Monte-Carlo simulant en parallèle l'évolution de plusieurs clones du système ($\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_M$) à différentes températures ($(\beta_1, \dots, \beta_M)$). Les températures des clones sont régulièrement échangées entre eux. Entre deux échanges, ils évoluent de manière indépendante. La fonction de partition de ces M copies s'écrit donc :

$$Z = \text{Tr} \exp \left(- \sum_{m=1}^M \beta_m \mathcal{H}(\mathcal{C}_m) \right) = \prod_{m=1}^M Z(\beta_m) \quad (2.35)$$

L'échange est proposé entre deux clones au bout d'un certain nombre de pas Monte-Carlo. Afin que les chaînes Monte-Carlo échantillonnent correctement la probabilité de Boltzmann, on impose la condition de bilan détaillé :

$$P(\dots, \mathcal{C}_m, \beta_m, \dots, \mathcal{C}_n, \beta_n) W(\mathcal{C}_m, \beta_m, \mathcal{C}_n, \beta_n) \quad (2.36)$$

$$= P(\dots, \mathcal{C}_n, \beta_m, \dots, \mathcal{C}_m, \beta_n) W(\mathcal{C}_n, \beta_m, \mathcal{C}_m, \beta_n) \quad (2.37)$$

où $W(\mathcal{C}_m, \beta_m, \mathcal{C}_n, \beta_n)$ est la probabilité d'échanger la configuration m avec la configuration n , et P désigne ici la probabilité de Boltzman :

$$P(\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_M) = \prod_{m=1}^M \frac{1}{Z(\beta_m)} \exp(-\beta_m \mathcal{H}(\mathcal{C}_m)) \quad (2.38)$$

La condition de bilan détaillé impose donc :

$$\frac{W(\mathcal{C}_m, \beta_m, \mathcal{C}_n, \beta_n)}{W(\mathcal{C}_n, \beta_m, \mathcal{C}_m, \beta_n)} = \exp \left(- (\beta_n - \beta_m) (\mathcal{H}(\mathcal{C}_m) - \mathcal{H}(\mathcal{C}_n)) \right) \quad (2.39)$$

On peut par exemple choisir la règle de Metropolis :

$$W(\mathcal{C}_m, \beta_m, \mathcal{C}_n, \beta_n) = \min \left(1, e^{-(\beta_n - \beta_m) (\mathcal{H}(\mathcal{C}_m) - \mathcal{H}(\mathcal{C}_n))} \right) \quad (2.40)$$

A température fixée, la valeur moyenne d'une observable $\mathcal{O}$ est estimée au moyen de :

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\beta = \frac{1}{N_{MCS}} \sum_{t=1}^{N_{MCS}} \sum_{m=1}^M \mathcal{O}(\mathcal{C}_m(t)) \delta_{\beta, \beta_m(t)} \quad (2.41)$$

2.2 Paramètres de simulation

Les simulations ont été effectuées sur le modèle ROM avec $\alpha = 0.4$. Ce choix permet d'avoir des températures dynamique et statique plus hautes que dans la version $\alpha = 0.5$ originellement étudiée (voir fig. 2.1). Ici, $T_d = 0.177$ et $T_s = 0.11$.

En pratique, l'algorithme que nous avons utilisé est le suivant : (i) chaque clone est simulé indépendamment pendant un balayage Metropolis, (ii) pour chaque paire de températures voisines, l'échange est proposé suivant la règle (2.40). Nous avons vérifié qu'augmenter ou diminuer le nombre de balayages Monte-Carlo n'influencerait pas l'atteinte de l'équilibre.

Nous avons simulé des systèmes de taille $N = 32, 64, 128$ et 256 pour 500 réalisations du désordre. Le système est thermalisé en utilisant un jeu de 100 températures comprises entre 0.078 et 0.352 par pas de 0.002 pour $N = 32, 64$ et 128 , et un jeu de 20 températures entre 0.13 et 0.282 par pas de 0.008 pour la plus grande taille afin d'économiser du temps de calcul. Ces paramètres ont été choisis de manière empirique. Nous avons effectué 15.10^6 itérations de *parallel tempering* pour équilibrer les systèmes, seule la deuxième moitié de la simulation sert à mesurer les observables thermodynamiques.

Le paramètre d'ordre statique de la transition 1-RSB est le recouvrement q entre deux répliques, c'est-à-dire entre deux configurations d'équilibre $\{\sigma\}$ et $\{\tau\}$ caractérisées par le même désordre gelé. Sa probabilité de distribution peut s'écrire :

$$P(q) = \left\langle \delta \left(q - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \tau_i \right) \right\rangle \quad (2.42)$$

Pour une réalisation donnée du désordre, le programme simule donc l'évolution simultanée de deux copies indépendantes [16].

2.3 Tests d'équilibration.

Les résultats des tests d'équilibration sont rassemblés dans les figures 2.3.

Le test (heuristique) est de mesurer les violations du théorème de fluctuation-dissipation reliant la chaleur spécifique aux fluctuations de l'énergie interne. Ce test est connu pour être exigeant [152]. Nous avons donc étudié le rapport $R(T)$ défini par

$$R(T) = \left(\frac{d\langle e \rangle}{dT} - N \frac{\overline{\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2}}{T^2} \right) \left(\frac{d\langle e \rangle}{dT} \right)^{-1} \quad (2.43)$$

où e est la densité d'énergie interne. $R(T)$ s'annule quand le système est bien thermalisé. La figure 2.3 montre que les systèmes sont bien équilibrés pour toutes les températures à l'exception de la plus grande taille. Pour cette dernière, il a été impossible de réussir à la thermaliser en-dessous de T_d malgré un effort numérique important.

La modeste efficacité du *parallel tempering* peut s'observer directement en étudiant la relaxation des principales observables thermodynamiques vers leurs valeurs d'équilibre. Partant d'une configuration initiale aléatoire, ici $\forall i, S_i = 1$, nous avons tracé la valeur instantanée de l'observable moyennée sur le désordre pour diminuer les fluctuations. Le résultat pour l'énergie interne $\bar{e}(t)$ et pour la valeur absolue du recouvrement $|\bar{q}|(t)$ sont portés sur la figure 2.4 pour $T = 0.178 \simeq T_d$. Cette figure suggère une loi de puissance : $\bar{e}(t) - e_\infty \sim t^{-0.3}$ pour les temps initiaux.

Un argument dû à A.Lefèvre donne une image éclairant ce résultat. Pour le modèle à p spins sphériques, on peut montrer en reprenant les notations du chapitre précédent que (voir eq. (1.53)) :

$$\mu(t) = T + \frac{p^2}{2} \int_{-\infty}^t du R(t, u) C^{p-1}(t, u) \quad (2.44)$$

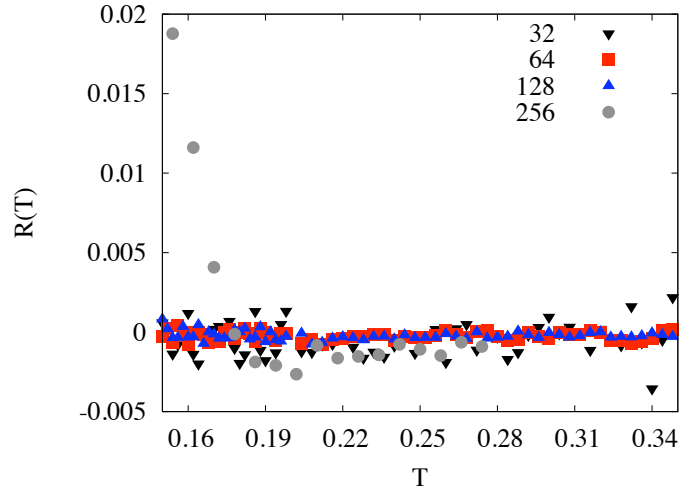


FIGURE 2.3 – Rapport fluctuation-dissipation $R(T)$ (voir l'équation (2.43) pour une définition précise) en fonction de la température, pour des tailles N allant de 32 à 256. A l'exception de la plus grande taille pour $T < T_d \simeq 0.177$, ce rapport oscille autour de zéro en accord avec une bonne équilibration des systèmes considérés.

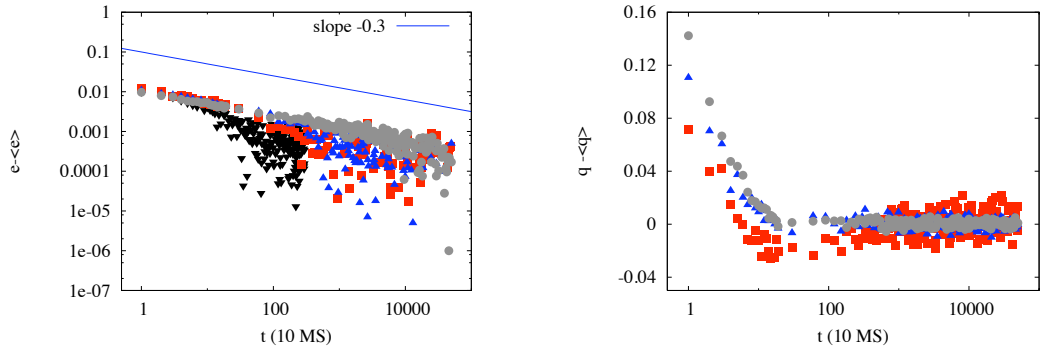


FIGURE 2.4 – *A gauche* : Relaxation de l'énergie interne instantanée moyennée sur le désordre depuis une configuration initiale aléatoire à l'aide du *parallel tempering* pour $N = 64, 128$, et 256 . Seule la température $T = 0.178$ est représentée en fonction du temps Monte-Carlo. La loi de puissance apparente : $\bar{e} - e_\infty \sim t^{-0.3}$ n'est valable que pour les temps courts. Même pour une température légèrement supérieure à T_d , la relaxation est extrêmement lente, et donc l'équilibration difficile (il faut quelques centaines de milliers d'itérations Monte-Carlo pour parvenir à équilibrer l'énergie interne pour $N = 256$). *A droite* : Relaxation de la valeur absolue du recouvrement instantané moyenné sur le désordre depuis deux configurations initiales aléatoires pour $N = 64, 128$ et 256 à $T = 0.178$. La relaxation est ici bien plus rapide (quelques centaines de pas Monte-Carlo).

Dans ce modèle, l'énergie d'équilibre est reliée au paramètre sphérique par : $\mu(t) = -pE(t) + T$ [56]. D'où,

$$E(t) = -\frac{p}{2} \int_{-\infty}^t du R(t, u) C^{p-1}(t, u) \quad (2.45)$$

Quand $T = T_d + \epsilon$, la fonction de corrélation s'écrit à l'approche du plateau : $C(t, u) = q_{EA} + \sqrt{\epsilon} g_+(|t - s|/\tau_\beta(\epsilon))$ où $g_+(x) \sim x^{-a}$. A l'équilibre, la fonction de réponse est quant à elle liée à $C(t, u)$ par le théorème de fluctuation-dissipation. Cela conduit à :

$$E(t) = E(t = \infty) + \frac{p(p-1)q^{p-2}}{2T} \sqrt{\epsilon} g_+\left(\frac{|t - s|}{\tau_\beta(\epsilon)}\right) \quad (2.46)$$

On anticipe donc pour $T = 0.178 = T_d^+$: $\bar{e}(t) - e_\infty \sim t^{-a}$ où a est l'exposant MCT. Cependant, cet argument utilise des relations n'étant valables qu'à l'équilibre, il n'est donc pas valable aux temps courts de la simulation. Nous montrerons au chapitre suivant que pour le ROM, $a \simeq 0.35$, ce qui donne un accord d'ensemble.

La relaxation de $|\bar{q}|(t)$ est bien plus rapide. On peut avancer l'idée suivante : les deux clones servant à calculer $|\bar{q}|(t)$ partent d'un sommet d'un paysage d'énergie particulièrement accidenté. Après quelques itérations, ils commencent à suivre des directions dont les puits ont un recouvrement nul. Au contraire, pour équilibrer l'énergie interne, il faut visiter plusieurs puits pour obtenir un bon échantillonnage du paysage d'énergie. En principe, le paysage d'énergie n'acquiert de structure qu'en dessous de T_d . Néanmoins, en taille finie la séparation est moins nette (voir les effets de taille finie sur la distribution de recouvrement $P(q)$ à la figure 2.9).

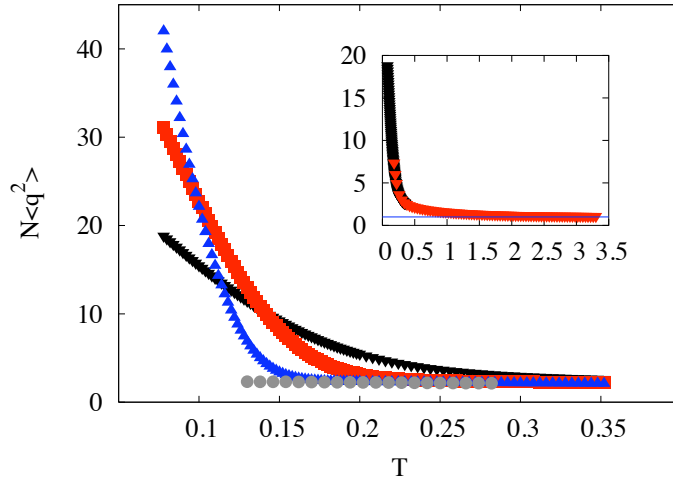


FIGURE 2.5 – Susceptibilité verre de spin en fonction de la température pour $N = 32$ à 256 . On peut noter (a) un fort effet de taille finie en-dessous de T_d et (b) une convergence particulièrement lente vers la valeur asymptotique $T \rightarrow \infty$. La vignette montre $\chi_{SG}^{N=32}$ pour des températures allant jusqu'à $35T_s$ et l'asymptote $\chi_{SG}^{T=\infty} = 1$. Cela illustre à quel point la phase désordonnée est "froide". Le code couleur est identique à celui de la figure 2.4.

Plusieurs raisons peuvent être invoquées pour expliquer les performances limitées du *parallel tempering* appliqué au ROM. La plus simple est de constater que les températures

dynamique et statique sont basses, ce qui limite le taux d'acceptance Monte-Carlo. Une façon de jauger la faiblesse de ces températures est d'observer la susceptibilité verre de spin $\chi_{SG} = N \langle q^2 \rangle$ (voir la figure 2.4). A température infinie, $\chi_{SG} = 1$. Même à $T = 10T_s$, de fortes corrections sont encore présentes. Ceci ne doit pas surprendre : la première correction non-triviale à χ_{SG} du ROM est la même que celle de SK. Dans les mêmes normalisations, $T_c^{SK} = 1$, c'est-à-dire 10 fois plus que la température T_s du ROM.

Une seconde explication repose sur la physique du ROM. A la différence du modèle à p spins ou du modèle de Potts où T_d et T_s sont très proches, le ROM a une bonne séparation entre ces deux régimes $T_d = 1.7T_s$. L'existence d'une complexité non-nulle en-dessous de T_d ralentit considérablement la dynamique dans cette région. La complexité dans le cas du volume infini montre un saut à T_d depuis 0 à une valeur finie. Ce saut est d'autant plus abrupt que T_d est éloignée de T_s . Au-dessus de T_d , en taille finie, on peut concevoir que le système soit déjà très sensible à l'apparition de ces états particulièrement étroits (q_{EA} n'est pas éloigné de 1).

Enfin, l'étroitesse de ces états contribue aux difficultés d'échantillonnage. Il faut réussir à sonder des minima profonds et étroits. Il est ainsi particulièrement difficile de s'évader de certaines portions de l'espace des configurations.

2.4 Faster than the clock.

La partie locale du *parallel tempering* peut être changée. Dans le cas des dynamiques lentes, l'algorithme *faster than the clock* [24] a montré une plus grande efficacité que la règle Metropolis simple [26, 131].

Quand un système a un taux d'acceptance Metropolis faible, la plupart des mouvements proposés sont refusés, la majeure partie du temps de calcul est inutile. La probabilité de s'échapper de la configuration $\mathcal{C} = \{S_1 \dots S_j \dots S_N\}$ vers la configuration $\mathcal{C}_j = \{S_1 \dots S_j \dots S_N\}$ est donnée par

$$p_{\text{esc}}(j) = \frac{\Delta\tau}{N} \min \left(1, \exp \left(- \frac{\mathcal{H}(\{\sigma\}) - \mathcal{H}(\{\sigma_j\})}{T} \right) \right) \quad (2.47)$$

où $\Delta\tau$ est le pas de temps de l'algorithme (que l'on peut très bien prendre égal à 1). Et donc la probabilité de s'en échapper en retournant un quelconque spin est donnée par :

$$p_{\text{esc}} = \frac{\Delta\tau}{N} \sum_{j=1}^N \min \left(1, \exp \left(- \frac{\mathcal{H}(\mathcal{C}) - \mathcal{H}(\mathcal{C}_j)}{T} \right) \right) \quad (2.48)$$

Et la probabilité d'avoir quitté $\{\sigma\}$ au bout d'un temps τ par :

$$P_{\text{esc}}(\mathcal{C}) = p_{\text{esc}}(1 - p_{\text{esc}})^{\tau-1} \rightarrow p_{\text{esc}} e^{-\tau p_{\text{esc}}} \quad \text{quand } \Delta\tau \rightarrow 0. \quad (2.49)$$

Un algorithme équivalent à celui de Metropolis est ainsi de calculer p_{esc} pour chaque spin, et de retourner le spin S_i avec la probabilité $p_{\text{esc}}(i)/p_{\text{esc}}$ en lui associant un temps $\tau(\mathcal{C}_i)$. Cet algorithme n'est utile que si $\tau(\mathcal{C}_i) \gg N$. Le calcul de la valeur moyenne thermodynamique d'une observable $\mathcal{O}$ est alors :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{t=1}^{N_{FTC}} \mathcal{O}(\mathcal{C}_t) \tau(\mathcal{C}_t) / \sum_{t=1}^{N_{FTC}} \tau(\mathcal{C}_t) \quad (2.50)$$

Tant que l'on n'est intéressé que par les valeurs moyennes thermodynamiques, on peut remplacer $\tau(\mathcal{C}_t)$ par sa valeur moyenne $\overline{\tau(\mathcal{C}_t)} = 1/p_{\text{esc}}(\mathcal{C}_t)$, ce qui permet d'accélérer légèrement une itération.

Maintenant, si l'on désire écrire un algorithme de *parallel tempering* en y associant *faster than the clock*, il faut écrire la règle d'échange de deux clones. Avec les notations précédentes :

$$\frac{W(\mathcal{C}_m, \beta_m, \mathcal{C}_n, \beta_n)}{W(\mathcal{C}_n, \beta_m, \mathcal{C}_m, \beta_n)} = e^{-(\beta_n - \beta_m)(\mathcal{H}(\mathcal{C}_m) - \mathcal{H}(\mathcal{C}_n))} \frac{\tau(\mathcal{C}_m, \beta_m) \tau(\mathcal{C}_n, \beta_n)}{\tau(\mathcal{C}_m, \beta_n) \tau(\mathcal{C}_n, \beta_m)} \quad (2.51)$$

Une itération du programme est alors la suivante :

1. Calculer les probabilités $p_{\text{esc}}(i)$ pour chaque spin, et le retourner avec probabilité $p_{\text{esc}}(i)/p_{\text{esc}}$.
2. Proposer chaque paire de températures voisines à l'échange de températures, et échanger les configurations sous la condition de bilan détaillé (2.51).

Afin de juger de l'efficacité de cet algorithme, nous avons conduit les mêmes tests d'équilibration que pour le *parallel tempering* usuel mais en réduisant la statistique sur le désordre à 64 échantillons. Les résultats sont présentés à la figure 2.6. Le nombre d'itérations a été choisi de telle sorte que le temps physique des simulations soit identique. L'énergie interne relaxe rapidement dans les temps initiaux puis plus lentement avec une décroissance très lente. L'utilisation des temps moyens explique que l'exposant de la dynamique soit différent de 0.3. Les violations du théorème de fluctuation-dissipation montrent que l'utilisation de *faster than the clock* ne permet pas d'accélérer la dynamique.

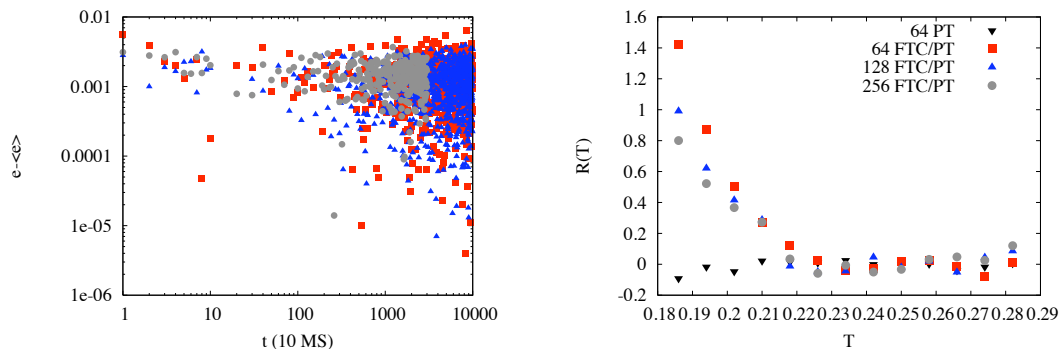


FIGURE 2.6 – *A gauche* : Relaxation de l'énergie interne instantanée moyennée sur le désordre depuis une configuration initiale aléatoire pour $N = 64, 128$, et 256 . Les simulations ont été effectuées en utilisant 15 températures également distribuées entre $T = 0.178$ et 0.29 et 64 réalisations du désordre. Seule la température $T = 0.178$ est représentée en fonction du temps Monte-Carlo. *A droite* : Violations du théorème de fluctuation-dissipation de l'énergie interne. Les systèmes sont mal équilibrés quand on approche de T_d . Par comparaison, dans le même temps physique de simulation, le *parallel tempering* usuel a permis d'équilibrer $N = 64$.

3 Thermodynamique.

Nous présentons ici les résultats obtenus pour la thermodynamique du ROM. La figure 2.7 montre le résultat des simulations pour l'énergie interne $u(T) \equiv \langle \mathcal{H} \rangle / N$ ainsi que sa

prédiction analytique dans la limite thermodynamique. Pour notre choix de α ,

$$u(T) = \frac{1}{4} \left(T - \sqrt{T^2 - \frac{3}{4}T + 4} \right), \quad T \geq T_s, \quad (2.52)$$

$$u(T) = -0.47, \quad T < T_s. \quad (2.53)$$

Les données sont en bon accord avec la courbe théorique aux effets de taille finie près, à l'exception de $N = 256$ en dessous de T_d . Cela confirme que pour cette taille, les systèmes tombent hors d'équilibre en-dessous de T_d , ce que montre également la figure 2.3. Pour les autres tailles de systèmes, les données montrent un effet de taille finie notable en-dessous de la température dynamique. A $T = 0.08$, cet effet est compatible avec une loi en $1/N$. Une observation similaire a été faite pour le modèle à p spins [15].

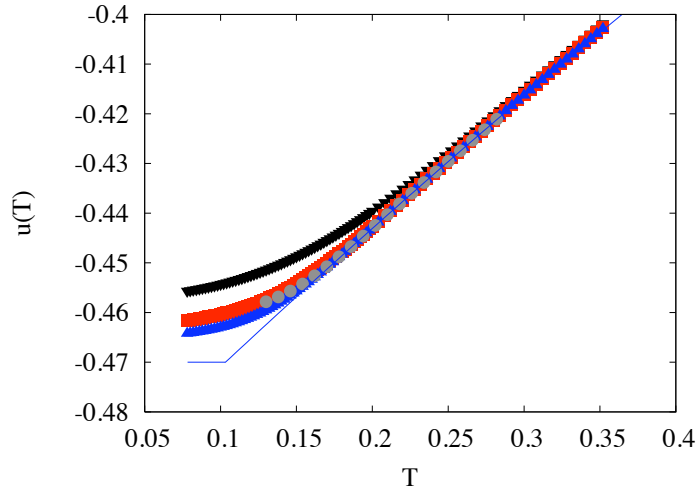


FIGURE 2.7 – La densité d'énergie interne $u(T)$ en fonction de la température de $N = 32$ jusqu'à $N = 256$ et sa prédiction analytique de volume infini.

Afin de mettre en évidence la transition 1-RSB [145], nous avons calculé le paramètre :

$$A(T) = \frac{\overline{\langle q^2 \rangle^2} - \overline{\langle q^2 \rangle}^2}{\overline{\langle q^2 \rangle}^2}, \quad (2.54)$$

qui signale la perte de la propriété d'auto-moyennage de q^2 [125], et, l'habituel paramètre de Binder

$$B(T) = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\overline{\langle q^4 \rangle}}{\overline{\langle q^2 \rangle}^2} \right). \quad (2.55)$$

Pour une transition 1-RSB discontinue générique, on peut facilement montrer que ces deux paramètres sont non-nuls pour $T < T_s$, nuls au-delà, et divergent à la transition, il suffit pour cela de considérer l'évolution de la distribution de q en fonction de la température.

Dans une transition 1-RSB, le paramétrage de la matrice des répliques à un pas de brisure impose le scénario suivant : $P(q)$ a un unique pic à $q = 0$ pour $T > T_s$. A $T = T_s$

apparaît un pic supplémentaire à q non-nul, et très proche de 1 dans le cas du ROM. Dans la limite de volume infini :

$$P(q) = (1 - m)\delta(q) + m\delta(q) \quad (2.56)$$

où $0 \leq m(T) \leq 1$, m s'annule à $T \geq T_s$ et croît lorsque l'on abaisse la température. Prenons

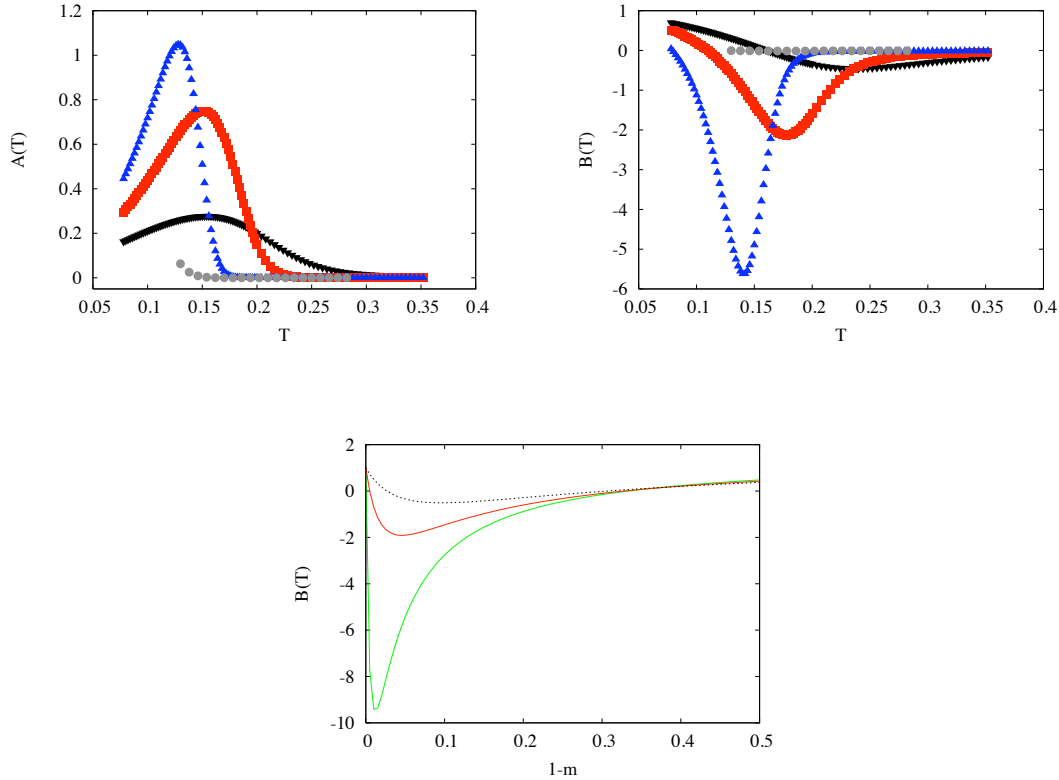


FIGURE 2.8 – *En haut à gauche* : Le paramètre $A(T)$. *En haut à droite* : le paramètre de Binder. Le code couleur est identique à celui de la figure 2.4. *En bas à droite* : Le paramètre de Binder dans le cas où $P(q)$ se compose de deux pics gaussiens centrés en 0 et 0.9 de même écart-type (0.1 en vert, 0.2 en rouge et 0.3 en pointillé) en fonction de m .

le cas du paramètre de Binder. Dans le cas de taille infinie, $B(T) = 1/2(1 - 1/m)$, ce qui montre que $B(T)$ est positif dans la phase 1-RSB. De manière simplement illustrative, pour tenir compte des effets de taille finie, on peut écrire :

$$P(q) = \frac{m}{\sqrt{2\pi}b(N, T)} e^{-\frac{q^2}{2b(N, T)^2}} + \frac{1 - m}{\sqrt{2\pi}c(N, T)} e^{-\frac{(q - q_1)^2}{2c(N, T)^2}} \quad (2.57)$$

Le paramètre de Binder est alors donné par :

$$B(T) = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{b^4 - 3mb^4 + m(q_1^4 + 6q_1^2c^2 + 3c^2)}{(b^2 - mb^2 + m(q_1^2 + c^2))^2} \right) \quad (2.58)$$

En supposant, pour simplifier, que $b = c$, et que $q_1 \simeq 0.9$ on obtient le tracé du bas de la figure 2.8. La comparaison (qualitative) avec les données obtenues pour le paramètre de Binder explique le développement du pic : naïvement la largeur de celui est d'ordre $1/\sqrt{N}$.

Son déplacement vers la gauche quand N croît s'explique par le fait que la température statique effective augmente quand N diminue, ce que l'on peut voir clairement sur les données de $P(q)$ où le deuxième pic apparaît à une température supérieure à la température statique.

La forme de la distribution $P(q)$ est de même réminiscente d'une transition 1-RSB, voir la figure 2.9, avec un pic autour de $q = 0$, et pour $T < T_s$ un pic autour de $q = q_1 \simeq 1$, chacun ayant une largeur non-nulle en taille finie. La figure 2.9 montre également un autre effet de taille finie : le deuxième pic apparaît au-dessus de T_s . Il correspond à une phase thermodynamique instable et décroît très rapidement avec la taille du système. En-dessous de T_s , ce pic devient très fin et proche de 1.

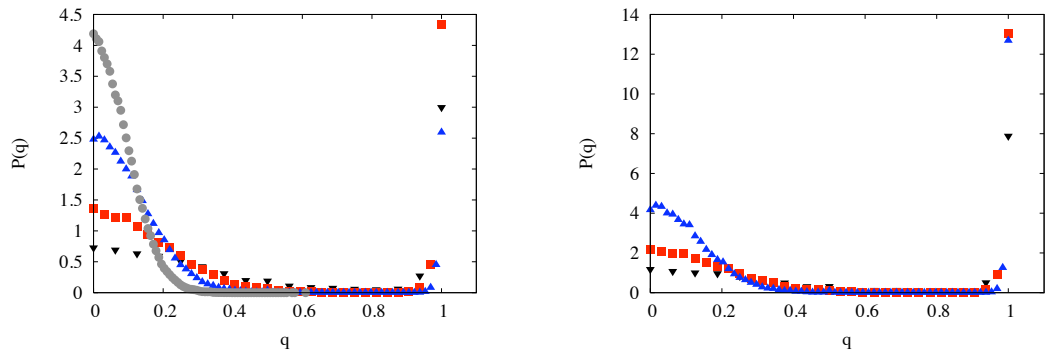


FIGURE 2.9 – *A gauche* : $P(q)$ pour $T_s < T = 0.154 < T_d$. *A droite* : $P(q)$ pour $T = 0.078 < T_s$. Le code couleur est identique à celui de la figure 2.4.

L'ensemble de ces données confirme l'existence d'une transition 1-RSB prédite par la méthode des répliques. L'énergie devient constante dans la phase 1-RSB. Il y a un saut de chaleur spécifique, et le paramètre d'ordre saute abruptement à 1, indiquant une transition très discontinue.

4 Conclusion

L'étude de la thermodynamique du ROM permet de dégager deux grandes conclusions. La première d'ordre pratique est que ce modèle est notablement difficile à simuler. L'origine de cette difficulté est intrinsèque : le ROM que nous avons étudié est un modèle où les effets de taille finie sont particulièrement marqués. Ils trouvent leur origine dans la thermodynamique complexe d'une transition 1-RSB fortement discontinue : forte séparation entre températures dynamique et statique, saut de complexité, étroitesse des états ($q_{EA} \simeq 1$). Cela limite le champ d'étude possible de la dynamique d'équilibre et la taille des systèmes accessibles.

La seconde concerne l'étude analytique de ces modèles. Le lien profond existant entre le type de transition et le bord du spectre des matrices de couplage donne un contrôle analytique complet de ces modèles. Cette remarque s'avèrera d'une grande utilité au chapitre 4 pour la définition d'un modèle de dimension finie utilisant le ROM comme modèle de référence.

Chapitre 3

R.O.M. : Dynamique & Corrections de taille finie

Le ROM est un exemple de système 1-RSB présentant une transition fortement discontinue. Cela rend son étude numériquement difficile, mais en fait un bon candidat pour une analyse détaillée de sa dynamique d'équilibre dans la phase ergodique. En effet, même si les équations dynamiques exactes du ROM restent à dériver, les arguments généraux liant dynamique MCT et système 1-RSB restent valables. Dans le cas du ROM, les prédictions universelles de la MCT (superposition temps-température, relations entre exposants...) doivent être exactes. Il s'agit là d'un test utile, il permet d'évaluer le caractère quantitatif de ces prédictions.

Par ailleurs, en raison de la taille modeste des systèmes étudiés, une étude détaillée des effets de taille finie est particulièrement utile en raison de la transition entre le régime de dynamique activée ($T < T_d$) et le régime MCT ($T > T_d$). En taille finie, ces deux régimes ne sont pas abruptement séparés. Il y a là un important travail de clarification afin de disposer d'un modèle de référence.

Pour répondre à ces questions le chapitre suivant est organisé comme suit. Dans une première partie, nous faisons une synthèse de la théorie de *finite-size scaling* dans les milieux désordonnés. Nous montrons comment cette théorie doit s'adapter aux spécificités des modèles complètement connectés, et notamment comment le critère de Harris doit être réécrit, en l'illustrant sur un modèle simple. Dans une deuxième partie, nous effectuons le test à proprement parler des prédictions MCT : si certaines prédictions sont bien vérifiées (superposition temps-température), d'autres semblent violées (comportement des susceptibilités dynamiques). La troisième partie, en proposant une étude échantillon par échantillon inspirée des points critiques désordonnés permet de clarifier ce qui est l'effet des fluctuations de désordre des effets pré-asymptotiques.

1 Théorie de *finite-size scaling* dans les milieux désordonnés.

Des corrections de taille finie importantes peuvent apparaître dans des cas simples : si l'on s'approche suffisamment près d'un point critique, la longueur de corrélation $\xi(L)$ peut atteindre les dimensions d'un système de taille finie L : $\xi(L) \sim L$. La théorie de *finite-size scaling* permet de relier les propriétés de ce système aux propriétés critiques du système de taille infinie, caractérisé par un point fixe des transformations du groupe de renormalisation.

Par exemple, dans le cas d'un modèle ferromagnétique [38,39], la susceptibilité magnétique à champ nul χ diverge comme $\xi^{\gamma/\nu}$ dans le système infini. En taille finie, l'hypothèse de *finite-size scaling* consiste à chercher χ sous la forme :

$$\chi = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \hat{\chi}\left(\frac{\xi}{L}\right) \quad (3.1)$$

où $\hat{\chi}$ est une fonction d'échelle indépendante de L , telle que $\hat{\chi}(x) \rightarrow cste$ pour $x \rightarrow 0$. Cette forme exprime le fait que les effets de taille finie sont une fonction de la longueur de corrélation $\xi(L)$. En utilisant le fait que $\xi \sim \epsilon^{-\nu}$,

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (3.2)$$

où $\tilde{\chi}$ est une autre fonction d'échelle et $\epsilon \equiv |T - T_c|/T_c$. On voit donc qu'en taille finie, au lieu de diverger, χ a un pic d'amplitude finie $\sim L^{\gamma/\nu}$, de largeur $L^{-1/\nu}$. Le maximum du pic est atteint à une température T^* , telle que $T_c - T^* \sim L^{-1/\nu}$ (voir fig 3.1).

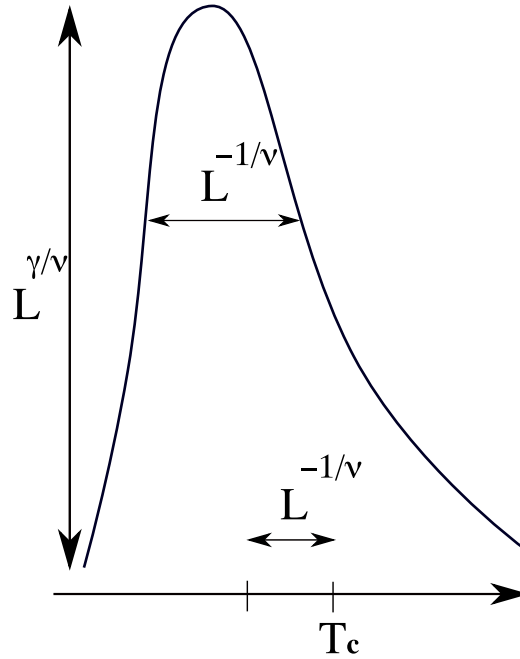


FIGURE 3.1 – Effet de la taille finie sur une observable présentant un pic à T_c et divergeant comme $\epsilon^{-\gamma}$, par exemple, la susceptibilité magnétique à champ nul pour le modèle d'Ising.

La forme (3.1) trouve son origine dans l'existence d'un point fixe attractif. Prenons le cas d'un point fixe isotrope, et introduisons la variable sans dimension : $\hat{L} = L/a$, où a est par exemple le pas du réseau. La transformation de renormalisation $a \rightarrow ba$, L étant fixé, transforme $\hat{L}$ en $b^{-1}\hat{L}$. La partie singulière de l'énergie libre f_s quant à elle devient :

$$f_s(\{K\}, \hat{L}^{-1}) = b^{-d} f_s(\{K'\}, b\hat{L}^{-1}) \quad (3.3)$$

Dans cette équation, $\hat{L}^{-1}$ joue le rôle d'une variable pertinente (associée à la dimension d'échelle 1) au même titre que les interactions $\{K\}$. Pour dériver (3.3), il faut supposer que $\hat{L}^{-1}$ n'intervient pas dans la renormalisation de $\{K\}$. Cette dernière hypothèse n'est

pas valable au-delà de la dimension critique supérieure ou pour un modèle complètement connecté.

En utilisant les relations thermodynamiques : $\chi \sim \partial^2 f_s / \partial h^2$, et en itérant n fois le groupe de renormalisation jusqu'au point où $\epsilon b^{ny_\epsilon} = \mathcal{O}(1)$,

$$\chi = \epsilon^{-\gamma} \hat{\chi} \left(\epsilon^{-\nu} \hat{L}^{-1} \right) \quad (3.4)$$

qui est une forme équivalente à (3.1).

Au-delà de la dimension critique supérieure, le *finite-size scaling* est différent. En résumé, on peut démontrer par un traitement rigoureux de théorie des champs que la forme (3.1) reste valable mais qu'il faut utiliser les exposants critiques du champ moyen [17, 32, 33, 38]. Pour la susceptibilité χ , cela donne :

$$\chi = \epsilon^{-\gamma_{up}} \tilde{\chi} \left(\epsilon N^{-d_{up}\nu_{up}} \right) \quad (3.5)$$

L'ajout du désordre rajoute une difficulté supplémentaire. Comme le montre l'argument développé ci-dessus, la question est triple : 1. il faut déterminer si le désordre est une variable pertinente ou non, 2. le cas échéant, déterminer les propriétés critiques du nouveau point fixe, 3. sans oublier de tenir compte de la spécificité des modèles complètement connectés. De manière surprenante, le dernier point n'a jamais été directement traité.

1.1 Critère de Harris.

La stabilité d'un point critique vis-à-vis de l'ajout d'un désordre de lien faible est gouvernée par le critère de Harris [90] :

$$\nu_0 \geq \frac{2}{d} \quad (3.6)$$

ν_0 désignant l'exposant de la longueur de corrélation du système sans désordre, système dit *pur*. Ce critère peut se comprendre simplement. Supposons que le désordre n'affecte pas les propriétés critiques. Le système peut se décomposer comme des boîtes indépendantes de longueur ξ , où ξ est la longueur de cohérence du système pur (sans désordre). Dans chacune de ces boîtes, les corrections de taille finie se traduisent par un décalage de la température critique ΔT_c^{ther} d'ordre $\xi^{-1/\nu}$, ν étant l'exposant du système sans désordre. Par ailleurs, l'existence du désordre se traduit également par des fluctuations de la température critique ΔT_c^{dis} d'ordre $\xi^{-d/2}$. Le désordre n'est donc pas pertinent si $\Delta T_c^{ther} \gg \Delta T_c^{dis}$ ce qui conduit au critère de Harris : $-1/\nu > -d/2$.

Cet argument sommaire peut-être reformulé en utilisant le langage du groupe de renormalisation [39]. Le critère de Harris s'applique à des systèmes faiblement désordonnés. Une façon de rendre compte de ce type de désordre est d'ajouter une terme (de perturbation) se couplant à la densité locale d'énergie :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^* + \sum_r m(r) E(r) \quad (3.7)$$

où $\mathcal{H}^*$ désigne le hamiltonien du système pur près du point fixe critique. La fonction de partition répliquée s'écrit :

$$\overline{Z^n} = \text{Tr}_{S_a} \text{Tr}_m P(\{m\}) \exp \left(- \sum_{a=1}^n \mathcal{H}_a^* - \sum_{a=1}^n \sum_r m(r) E_a(r) \right) \quad (3.8)$$

Si l'on ne s'intéresse qu'aux variations de la température critique, un développement en cumulants à l'ordre deux suffit :

$$\overline{\exp\left(-\sum_{ar} m(r)E_a(r)\right)}^m = \exp\left(-\sum_{ar} \overline{m}E_a(r) - \frac{1}{2}\sum_{abbr'} \overline{m(r)m(r')^c} E_a(r)E_b(r')\right) \quad (3.9)$$

En supposant que les corrélations entre impuretés sont à courte-portée, $E_a(r)E_b(r')$ peut se calculer comme une somme de termes locaux en utilisant le développement de produit d'opérateurs. Le terme diagonal $a = b$ est à l'ordre dominant donné par la densité d'énergie elle-même, cela conduit à une correction d'ordre supérieur. La dimension des termes $a \neq b$ s'évalue à partir de leur corrélation à deux points :

$$\left\langle \sum_{a \neq b} E_a(r)E_b(r) \sum_{a' \neq b'} E_{a'}(r')E_{b'}(r') \right\rangle = 2n(n-1) \langle E_a(r)E_a(r') \rangle^2 \quad (3.10)$$

$$\sim \frac{2n(n-1)}{|r-r'|^{4x_E}} \quad (3.11)$$

où x_E est donnée par la dimension d'échelle de l'énergie $y_E : x_E = d - y_E = d - 1/\nu_0$. La perturbation due au désordre a donc pour dimension d'échelle $y : y = d - 2x_E = d - 2/\nu_0$. Cette perturbation est pertinente si $\nu_0 \geq 2/d$.

1.2 Point fixe désordonné

Outre le calcul des nouveaux exposants critiques, l'introduction du désordre ouvre d'autres questions comme celle de la propriété d'auto-moyennage. Etant donnée une observable $\mathcal{O}$ dépendant d'une réalisation $\{\omega\}$ du désordre, on peut se demander comment cette observable converge (si elle converge) vers sa moyenne quand la taille du système devient grande. Une façon habituelle de caractériser cette propriété est d'étudier le rapport [2] :

$$R_{\mathcal{O}} = \frac{\overline{\mathcal{O}^2} - \overline{\mathcal{O}}^2}{\overline{\mathcal{O}^2}}. \quad (3.12)$$

Deux comportements sont possibles quand $L \rightarrow \infty$: 1. $R_{\mathcal{O}} \rightarrow 0$ ce qui correspond à une observable auto-moyennante, 2. $R_{\mathcal{O}} \rightarrow \text{cstte} \neq 0$ ce qui indique une observable qui n'est plus auto-moyennante. L'énergie-libre est un exemple d'observable auto-moyennante, la fonction de partition d'observable non auto-moyennante.

Une borne sur les exposants.

Il est possible de donner une borne rigoureuse sur les exposants quand le désordre est dominant [47]. Considérons une observable $\mathcal{O}(L, \lambda)$ dépendant à la fois de la taille du système et du désordre dont l'intensité est donnée par $0 \leq \lambda \leq 1$ (concentration d'impuretés,...), et dont la valeur typique est donnée par :

$$\mathcal{O}^*(L) \sim L^{-u} \tilde{\mathcal{O}}\left(\frac{L}{\xi(\lambda)}\right) \quad (3.13)$$

On peut penser, par exemple, à un modèle ferromagnétique du type :

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (3.14)$$

où la somme ne porte que sur des proches voisins, et les spins sont des spins d'Ising. Les couplages J_{ij} sont aléatoires. Un choix possible est de prendre $J_{ij} = J_a > 0$ avec probabilité λ et $J_{ij} = J_b > J_a$ avec probabilité $1 - \lambda$.

Introduisons l'événement : $Y_L(a, u) = [\mathcal{O}(L, \lambda)L^u > a]$, $a > 0$. L'événement Y_L doit mimer le comportement d'une observable critique habituelle :

1. $\forall(a, u)$, on suppose qu'il existe une constante b , telle que quand $L \rightarrow \infty$, $\mathbb{P}_{\lambda_c}[Y_L(a, u)] \geq 2b$ (λ_c repère le point de transition)
2. $\forall \epsilon > 0, \forall \lambda < \lambda_c$, $\mathbb{P}_\lambda[Y_L(\epsilon, u)]$ s'annule exponentiellement vite.

On peut alors définir la longueur de corrélation comme :

$$\xi(\lambda) = \max(L \mid \mathbb{P}_\lambda[Y_L(a, u)] \geq c). \quad (3.15)$$

Considérons un évènement quelconque Y , dépendant d'une réalisation $\{\omega\}$ du désordre. On voit que :

$$\mathbb{P}_\lambda[Y] = \sum \mathbb{P}_\lambda[\{\omega\}] I_Y \quad (3.16)$$

I_Y vaut 1 si Y arrive lors de la réalisation $\{\omega\}$ et 0 sinon. Par ailleurs, en notant $n(\{\omega\})$ le nombre de liens générés par la réalisation $\{\omega\}$

$$\mathbb{P}_\lambda[\{\omega\}] = \lambda^{n(\{\omega\})} (1 - \lambda)^{N - n(\{\omega\})} \quad (3.17)$$

En remarquant que : $\langle n \rangle = \lambda L^d$, et en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient :

$$\left| \frac{d}{d\lambda} \mathbb{P}_\lambda[Y] \right| \leq \frac{L^{d/2}}{\sqrt{\lambda(1-\lambda)}} \quad (3.18)$$

Maintenant, la condition 1. et la borne précédente conduisent à :

$$\mathbb{P}_\lambda[Y_L] \geq 2b + 2(\arccos(\sqrt{\lambda}) - \arccos(\sqrt{\lambda_c})) L^{d/2} \quad (3.19)$$

$$\geq 2\left(b - \frac{\lambda_c - \lambda}{\sqrt{1 - \lambda_c^2}} L^{d/2} + \mathcal{O}(\lambda_c - \lambda)^2\right) \quad \lambda \rightarrow \lambda_c^- \quad (3.20)$$

Dans cette borne, il ne faut pas oublier que les valeurs de λ et L sont liées (typiquement, $\lambda - \lambda_c^{-1/d\nu}$). En posant $\lambda_k = \lambda_c - (b\sqrt{1 - \lambda_c^2}) L^{d/2}$, il vient :

$$\xi(\lambda) \geq (b\sqrt{1 - \lambda_c^2})^{2/d} (\lambda_c - \lambda)^{-2/d} \quad (3.21)$$

D'où :

$$\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_c^-} \frac{\ln \xi(\lambda)}{|\ln(\lambda - \lambda_c)|} \geq \frac{2}{d} \quad (3.22)$$

On vient ainsi de montrer que : $\nu \geq 2/d$. Il s'agit ici de l'exposant de la longueur de corrélation du système désordonné et non pur, comme dans le critère de Harris. Cette borne montre que si un point critique désordonné existe, $\nu \neq \nu_0$. Cette démonstration bien que très générale n'est valable qu'en dimension finie. En effet, pour un modèle complètement connecté, comme le ROM, la borne (3.18) n'est plus vérifiée.

Théorie de finite-size scaling pour un point critique désordonné.

Une analyse très générale des points critiques désordonnés peut être menée en utilisant des arguments du groupe de renormalisation [2]. Il faut pour cela introduire une température critique $T_c(\{\omega\})$ dépendant de la réalisation du désordre. Si l'on considère comme précédemment des systèmes donnés par un hamiltonien du type (3.14), l'énergie libre d'un tel modèle peut s'écrire sous la forme d'une fonctionnelle de Landau-Ginzburg :

$$\begin{aligned} -F &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} (r + q^2) \hat{S}_{\mathbf{q}} \hat{S}_{-\mathbf{q}} + \frac{g}{N^3} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_3} \hat{S}_{\mathbf{q}_1} \hat{S}_{\mathbf{q}_2} \hat{S}_{\mathbf{q}_3} \hat{S}_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3} \\ &+ \frac{1}{2N^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} \delta \hat{r}_{\mathbf{q}_1} \hat{S}_{\mathbf{q}_2} \hat{S}_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2} \end{aligned} \quad (3.23)$$

où l'on a introduit,

$$\hat{S}_{\mathbf{q}} = \sum_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) S_i \quad (3.24)$$

$$r \sim T - \overline{T}_c \quad (3.25)$$

Le troisième terme est lié à l'effet du désordre :

$$w \equiv \overline{\delta r^2} \sim \overline{(J_{ij} - \overline{J}_{ij})^2} \quad (3.26)$$

Ce dernier terme peut également s'interpréter comme les corrections à la température critique moyenne dues au désordre $w \sim \overline{(T_c - \overline{T}_c)^2}$. En l'absence de désordre, $\delta r = 0$, on retrouve la théorie ϕ^4 , et à un facteur près, $r = \epsilon$. (3.23) généralise (3.7).

Comme dans le cas pur, intéressons-nous à la susceptibilité à champ nul :

$$\chi = \frac{1}{N} \langle \hat{S}_{q=0} \hat{S}_{q=0} \rangle \quad (3.27)$$

La notation $\langle . \rangle$ désigne la valeur moyenne canonique associée à l'énergie libre (3.23). L'itération du groupe de renormalisation s'effectue en intégrant sur les grands vecteurs d'onde $\mathbf{q}$, suivie d'une remise à l'échelle e^{-l} des longueurs et $\sigma(l) = \exp[(d+2-\eta)l/2]$ des spins. Après l itérations de la transformation de renormalisation, le nombre de spins est renormalisé par $\tilde{N}(l) = Ne^{-dl}$. La susceptibilité χ est donc renormalisée suivant : $\chi = \sigma(l)^2 e^{-dl} \tilde{\chi}(l)$ où la valeur moyenne thermodynamique dans $\tilde{\chi}(l)$ doit être prise respectivement à l'énergie libre renormalisée $\tilde{F}(l)$.

Pour étudier l'influence du désordre, on forme le rapport d'auto-moyennage :

$$R_\chi = \frac{\overline{\chi^2} - \overline{\chi}^2}{\overline{\chi}^2}, \quad (3.28)$$

L'itération des transformations de renormalisation laisse R_χ invariant : $R_\chi = \tilde{R}_\chi(l)$. Ce résultat sur les rapports $R_{(.)}$ est en fait valable pour n'importe quelle observable s'exprimant comme la valeur moyenne d'un opérateur à $\mathbf{q} = 0$.

Cette stabilité structurale permet de calculer ces objets par itération de la transformation de renormalisation. En effet, celle-ci prend fin soit lorsque la longueur de corrélation renormalisée $\tilde{\xi}(l)$ vaut 1, le système est alors une collection de spins renormalisés indépendants, soit lorsque le nombre renormalisé de spins $\tilde{N}(l)$ vaut 1, auquel cas le système est décrit par la physique d'un seul spin renormalisé. Il faut donc distinguer deux cas : $\xi < L$ ou $L < \xi$.

Dans le premier cas, notons l_f , l'itération telle que $\tilde{\xi}(l_f) = 1$. L'itération de l_f transformations de renormalisation conduit à $\tilde{R}_\chi(l_f) = R_\chi^1 / \tilde{N}(l_f)$, où R_χ^1 est le rapport d'auto-moyennage de la susceptibilité d'un spin renormalisé, et le nombre renormalisé de spin étant donné par $\tilde{N}(l_f) = (L/\xi)^d$. Le rapport R_χ^1 se calcule facilement. En effet, $\tilde{\chi}(l_f) = 1/\tilde{r}(l_f) = 1$ et $\overline{\chi^2} - \overline{\chi}^2 = \tilde{w}(l_f)$.

On peut faire une analyse identique dans le cas où $L < \xi$. On peut résumer ces deux cas, en introduisant $x = \min(L, \xi)$:

$$R_\chi = \tilde{w}(\ln x) \left(\frac{x}{L} \right)^d \quad (3.29)$$

et rappelons que $w \sim \overline{(T_c - \overline{T}_c)^2}$. Le comportement de $\tilde{w}$ doit être distingué suivant que le désordre domine ou non.

Si l'on veut retrouver le point fixe ordinaire, il faut que l'itération du groupe de renormalisation conduise à un point fixe $w^* = 0$. Dans ce cas, on peut montrer que l'approche de ce point s'effectue selon $\tilde{w}(l) = w \exp(l\alpha_0/\nu_0)$ où $\alpha_0 = 2 - \nu_0 d$ est l'exposant de la chaleur spécifique [3]. L'indice 0 signale ici que ce sont les exposants du système pur. Dans le cas où le désordre n'est pas pertinent, on a donc :

$$R_\chi \sim w \xi^{2/\nu_0} L^{-d} \quad \text{si } L > \xi \quad (3.30)$$

$$R_\chi \sim w L^{\alpha_0/\nu_0} \quad \text{si } L < \xi \quad (3.31)$$

Quand le désordre n'est pas pertinent, le critère de Harris donne $\nu \leq 2/d$, c'est-à-dire $\alpha < 0$. Dans les deux cas χ est auto-moyennante. Néanmoins, dans la zone critique, on note une convergence plus lente vers la valeur moyenne à cause des fluctuations critiques.

Dans le cas où le désordre est pertinent, $\tilde{w}(l)$ atteint un nouveau point fixe $w_R^* \neq 0$ dont l'approche est caractérisée par un nouvel exposant $\phi_R < 0$: $\tilde{w}(l) - w_R^* \propto \exp(l\phi_R/\nu_R)$. Cette fois l'indice R signale que les exposants sont ceux du point désordonné. Le rapport d'auto-moyennage s'exprime donc :

$$R_\chi \sim w_R^* \left(\frac{\xi}{L} \right)^d \quad \text{si } L > \xi \quad (3.32)$$

$$R_\chi \sim w_R^* \quad \text{si } L < \xi \quad (3.33)$$

Dans la zone critique d'un point fixe désordonné $\xi > L$, la susceptibilité χ n'est plus auto-moyennante.

Plus généralement on peut montrer que si le système est auto-moyennant, la distribution de $\chi/\bar{\chi}$ suit une distribution gaussienne de variance proportionnelle à R_χ . Dans le régime critique du point fixe désordonné, on peut de même montrer que les cumulants d'ordre $p \geq 3$ sont d'ordre $(w_R^*)^{p-1}$ [2].

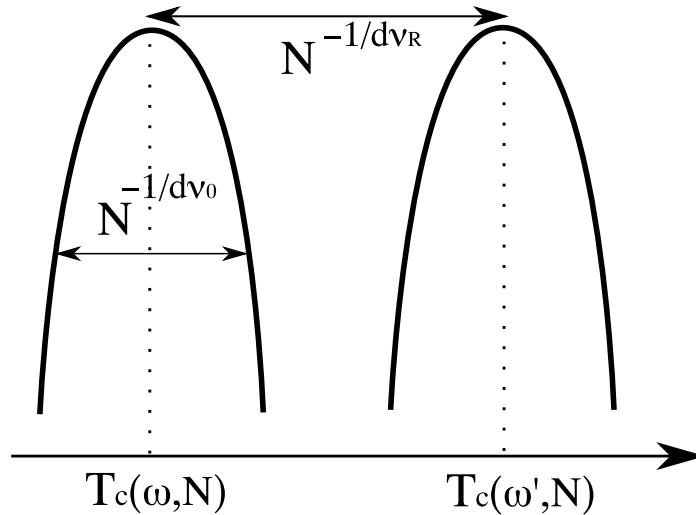


FIGURE 3.2 – Illustration de la compétition entre fluctuations de désordre et fluctuations thermiques.

Pour résumer, la renormalisation de r et de w revient à introduire une pseudo-température critique $T_c(L, \{\omega\})$ dépendant de la taille et du tirage des couplages aléatoires (voir figure 3.2) [138, 165]. Cette température correspond par exemple au maximum de la susceptibilité χ . On a ainsi montré que la température critique est déplacée de :

1. $\delta T = \overline{T_c(L, \{\omega\})} - T_c \sim L^{-1/\nu_0}$, si le désordre n'est pas pertinent,
2. et de $\delta T = \overline{T_c(L, \{\omega\})} - T_c \sim L^{-1/\nu_R}$, si le désordre est pertinent.

Les fluctuations autour de la température critique moyenne sont quant à elles données par :

1. $\delta^2 T = \overline{T_c(L, \{\omega\})^2} - \overline{T_c(L, \{\omega\})}^2 \sim L^{-d}$, si le désordre n'est pas pertinent,
2. et par $\delta^2 T = \overline{T_c(L, \{\omega\})^2} - \overline{T_c(L, \{\omega\})}^2 \sim L^{-2/\nu_R}$ sinon.

Dans le cas du désordre pertinent, on constate que si l'on effectuait la moyenne sur le désordre des observables en fixant l'écart à $T_c(L, \{\omega\})$ et non à T_c , on pourrait rétablir les propriétés d'auto-moyennage des observables.

1.3 Et au-dessus de la dimension critique supérieure ?

Au-delà de la dimension critique supérieure d_u , les propriétés de *finite-size scaling* sont modifiées. Dans le cas d'un système pur, il faut remplacer les exposants critiques par ceux du champ moyen [32, 33]. L'origine de ce changement vient du fait que la taille du système ne peut plus être considérée comme un opérateur indépendant des couplages. Si l'on pense par exemple à la théorie ϕ^4 , la constante de couplage g vient à s'annuler sous les transformations du groupe de renormalisation quand $L \rightarrow \infty$, cela montre que g et L ne sont pas des opérateurs indépendants. De manière très schématique, et très peu rigoureuse, l'annulation de la constante renormalisée fait que le système renormalisé ressemble au système de champ moyen, ce qui explique qu'il faille utiliser les exposants de champ moyen pour écrire les propriétés de *finite-size scaling*. Quel est l'effet du désordre ?

Propriétés critiques

Si l'on reprend la dérivation du critère de Harris (voir section 1.1), le fait que l'on se situe en $d < d_u$, n'est utilisé que pour calculer la dimension d'échelle x_E . La densité locale d'énergie est cependant un opérateur composite, il dépend de la valeur des spins, on ne peut donc pas renormaliser E indépendamment des spins. Il faut tenir compte des opérateurs dangereusement non-pertinents. Reprenons la dérivation de la section 1.1.

Considérons, par exemple, un système ferromagnétique décrit par la théorie ϕ^4 [167]. Dans ce cas la densité locale d'énergie $E(r)$ n'est autre que $\langle \phi(r)^2 \rangle$. La masse fluctuante $m(r)$ traduit ici l'effet de couplages aléatoires J_r . L'introduction de ce désordre se traduit par une perturbation :

$$\delta E(r) = \int dl \frac{\delta}{\delta m(r+l)} E(r) m(r+l) \quad (3.34)$$

E est devenue une variable aléatoire dont la valeur typique est donnée par :

$$\sqrt{\overline{\delta E(r)^2}} = \sqrt{\int dl \left(\frac{\delta}{\delta m(r+l)} E(r) \right)^2 A} \quad (3.35)$$

où $\overline{m(r)m(r')} = A\delta(r, r')$. Dans la théorie ϕ^4 , la fonction de réponse $\delta E(r)/\delta m(r+l) = \partial \langle \phi(r)^2 \rangle / \partial J_{r+l}$ s'écrit en-dessous de T_c :

$$\frac{c}{l^{2d-4}} + \epsilon \frac{c'}{l^{d-2}} \quad (3.36)$$

A l fixé, en approchant T_c , la deuxième contribution bien que sous-dominante dans l'expression de la fonction de réponse, est dominante dans l'intégrale 3.35. Dans la théorie de champ-moyen, $\langle \phi(x)^2 \rangle$ s'annule linéairement avec la température. Ainsi, le désordre affecte les propriétés critiques si : $d\nu_u < 2$, où ν_u est l'exposant de champ moyen, et d

la vraie dimension du système. Lorsque la dimension d'espace est suffisante, $d > 2/\nu_u$, le point critique ne sera pas déstabilisé par la présence d'un faible désordre .

Plus formellement, si l'on reprend l'analyse du point critique désordonné de la section 1.2, la renormalisation du nombre de spins fait intervenir la vraie dimension d'espace : $\tilde{N}(l) = e^{-dl}N$. La condition pour que R_χ soit auto-moyennant quand $L > \xi$, à l'instar du système pur, s'écrit ainsi : $d\nu_u < 2$.

Finite-size scaling

Si le désordre n'est pas pertinent, χ est auto-moyennant dans la zone critique. Pour retrouver cette propriété malgré l'ajout d'un désordre non-nul, *i.e.* $w \neq 0$, il faut imposer : $d_u\nu_u > 2$. En effet, si l'on néglige l'effet du désordre sur le *finite-size scaling*, au-delà de la dimension critique supérieure : $w(l) \sim w \exp(l[2/\nu_u - d_u])$. L'auto-moyennage de R_χ dans la zone critique $L \ll \xi$ impose alors $d_u\nu_u > 2$.

On peut donner une image physique plus simple. Les propriétés d'un système de taille finie diffèrent de celles du système thermodynamique dans la zone critique, c'est-à-dire dans une fenêtre de températures telle que $\epsilon N^{-1/d_u\nu_u} \sim \mathcal{O}(1)$. Les fluctuations dues au désordre entraînent quant à elles des fluctuations de la température critique d'ordre $N^{-1/2}$. Cela conduit donc au critère suivant : le désordre est pertinent si $d_u\nu_u < 2$.

Il y a donc deux critères différents. L'un valable pour les propriétés critiques, toujours valable si la dimension d'espace d est suffisamment haute, le second affectant le *finite-size scaling* dépend des exposants de champ-moyen. Ce résultat est pour le moins inattendu.

Un modèle simple

L'existence au-delà de la dimension critique supérieure de deux critères de Harris différents pour les propriétés critiques et les corrections de taille finie peut surprendre. On peut illustrer cette situation sur un exemple concret. Considérons le modèle suivant :

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} \xi_i \xi_j S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2 - h \sum_i h_i S_i \quad (3.37)$$

où les spins S_i peuvent prendre les valeurs $\{-1, 0, 1\}$ et les variables $\xi_i = 1 - \delta + \sqrt{\delta} G_i$ sont des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées. Les variables G_i sont des variables gaussiennes indépendantes, normalisées de telle façon que le second et le quatrième moment des ξ_i soient égaux à 1. Il s'agit d'un exemple de modèle faiblement désordonné, où l'invariance de jauge du désordre permet une résolution pour chaque réalisation du désordre.

Le paramètre δ contrôle l'intensité du désordre. Dans le cas pur, $\delta = 0$, ce modèle est simplement la version complètement connectée du modèle de Blume-Capel [23]. Ce modèle a un point tricritique caractérisé par un exposant $\nu_u = 1/2$ et une dimension critique supérieure $d_u = 3$. Si l'on applique les critères précédents, comme la dimension du système est infinie, les propriétés critiques sont celles du système pur, mais le *finite-size scaling* lui est affecté par le désordre : $\nu_u d_u = 3/2 < 2$.

La fonction de partition de ce modèle est donnée par :

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int dm \exp \left[-N\beta \left(-\frac{1}{2}m^2 + \frac{1}{N\beta} \sum_i \ln (1 + 2e^{-\beta\Delta} \cosh \beta(m + h)\xi_i) \right) \right] \quad (3.38)$$

Pour étudier le diagramme de phase, il suffit d'effectuer un développement de Landau de

l'énergie libre. A l'ordre six, on trouve :

$$\begin{aligned} f(\beta) &= -\frac{1}{\beta} \ln(1 + 2e^{-\beta\Delta}) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{a(\beta)}{N} \sum_i \xi_i^2\right) m^2 \\ &+ \frac{b(\beta)}{4!N} \sum_i \xi_i^4 m^4 + \frac{c(\beta)}{6!N} \sum_i \xi_i^6 m^6 + \mathcal{O}(m^7) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Dans ce développement, les coefficients : $1 - a(\beta)$, $b(\beta)$ et $c(\beta)$ sont ceux du développement du modèle pur :

$$a(\beta) = 2\beta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + 2e^{-\beta\Delta}} \quad (3.40)$$

$$b(\beta) = -2\beta^3 \frac{e^{-\beta\Delta} - 4e^{-2\beta\Delta}}{(1 + 2e^{-\beta\Delta})^2} \quad (3.41)$$

$$c(\beta) = -2\beta^5 \frac{e^{-\beta\Delta} - 26e^{-2\beta\Delta} + 64e^{-3\beta\Delta}}{(1 + 2e^{-\beta\Delta})^3} \quad (3.42)$$

Dans le modèle pur, à la fois $1 - a(\beta)$ et $b(\beta)$ peuvent s'annuler. L'annulation de $1 - a(\beta)$

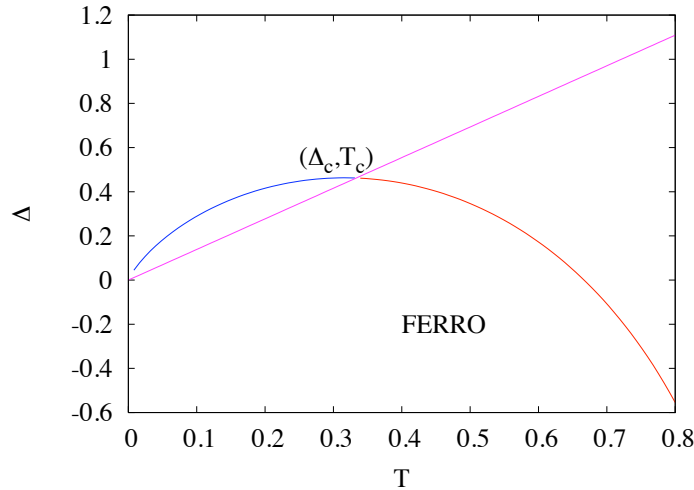


FIGURE 3.3 – Diagramme de phase du modèle pur.

donne la valeur de la température critique et le signe de $b(\beta)$ l'ordre de la transition (voir la figure 3.3). Le point tricritique est défini par l'annulation simultanée de $1 - a(\beta)$ et de $b(\beta)$, c'est-à-dire $(T_c, \Delta_c) = (1/3, 2 \ln 2/3)$. Une rapide analyse de l'énergie libre (3.39) montre que le point tricritique n'est pas supprimé par le désordre. Pour une réalisation donnée du désordre, $b(\beta)$ s'annule toujours sur la ligne $\beta\Delta = \ln 4$: le point tricritique se situe nécessairement sur cette ligne. Plus précisément son lieu est donné par :

$$(T_c(N), \Delta_c(N)) = \left(\frac{1}{3N} \sum_i \xi_i^2, \frac{2 \ln 2}{3N} \sum_i \xi_i^2 \right) \quad (3.43)$$

Dans la limite thermodynamique, on retrouve le point tricritique du modèle pur : $\overline{T_c(N)} = T_c(\infty) = T_c$. Un autre choix de normalisation des G_i modifierait la position du point critique mais ne changerait en aucun cas les propriétés critiques ou de *finite-size scaling*.

Pour N grand, $\frac{1}{N} \sum_i \xi_i^2$ est distribué suivant une loi gaussienne de largeur $\sim N^{-1/2}$, ce qui conduit à des fluctuations de T_c de même ordre, et à cause de la relation $\beta\Delta = \ln 4$, à des fluctuations similaires de Δ . Dans le même temps les fluctuations thermiques dues à la taille finie, induisent des variations de T_c d'ordre $N^{-2/3}$. On s'attend donc à ce que le *finite-size scaling* soit affecté par le désordre mais pas les propriétés critiques.

En se plaçant le long de la ligne $\beta\Delta = \ln 4$, l'étude de ce modèle est très simple. Ecrivons $\beta = \beta_c(N) + \lambda N^{-2/3}$, la fonction de partition est alors donnée par :

$$Z(\beta) = \frac{\alpha\pi^2}{\beta_c(N)} \sqrt{\frac{\beta}{2}} \left(\frac{3}{2}\right)^N N^{1/3} \mathcal{F}\left(-\frac{\lambda\alpha}{\beta_c(N)^2}\right) \quad (3.44)$$

où $\alpha = 270/8$ et la fonction d'échelle $\mathcal{F}(x) = Ai^2(x) + Bi^2(x)$. L'asymptotique des fonctions d'Airy est telle que :

$$\mathcal{F}(x) \sim \frac{1}{\pi\sqrt{|x|}} \quad x \leq -1 \quad (3.45)$$

$$\mathcal{F}(x) \sim \frac{e^{-\frac{4}{3}x^{3/2}}}{4\pi\sqrt{|x|}} \quad x \geq 1 \quad (3.46)$$

L'équation (3.44) montre que pour chaque réalisation du désordre, il est possible d'écrire la fonction de partition sous une forme standard de *finite-size scaling*, dont la fonction d'échelle $\mathcal{F}(x)$ ne dépend pas du désordre. Pour obtenir les observables moyennes, il suffit de prendre la moyenne sur la distribution des températures tricritiques :

$$\mathbb{P}[T_c(n) = T] = \sqrt{\frac{N}{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(T - T_c)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.47)$$

Par exemple, pour illustrer l'effet du désordre, calculons les fluctuations du paramètre d'ordre m défini par :

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i S_i \quad (3.48)$$

En utilisant (3.44), à désordre donné :

$$\langle m \rangle = N^{-1/6} \frac{1}{\beta_c(N)} f\left(-\frac{\lambda}{\beta_c(N)^2}\right) + \mathcal{O}(N^{-5/6}) \quad (3.49)$$

où

$$f(x) = \frac{51840^{1/3} \pi Bi(\alpha x) + \frac{45x^2}{2} {}_2F_1(1; 4/3; 15x^3)}{\alpha\pi^{3/2} (Ai^2(\alpha x) + Bi^2(\alpha x))} \quad (3.50)$$

Soit encore, de manière plus transparente :

$$f(x \gg 1) \sim e^{-cst} x^{3/2} x^{1/4} \quad (T > T_c(N)) \quad (3.51)$$

$$f(x \ll 1) \sim |x|^{1/4} \quad (T < T_c(N)) \quad (3.52)$$

Les exposants des queues de la fonction d'échelle ne sont autres que les exposants critiques que l'on aurait trouvé dans le modèle pur, comme on s'y attendait. De même, les fluctuations non-connexes du paramètre d'ordre s'obtiennent :

$$N \langle m^2 \rangle = N^{2/3} \frac{1}{\beta_c^2(N)} g\left(-\frac{\lambda}{\beta_c(N)^2}\right) + \mathcal{O}(1) \quad (3.53)$$

avec,

$$g(x) = 2160^{1/3} \frac{Ai'(\alpha x)Ai(\alpha x) + Bi'(\alpha x)Bi(\alpha x)}{Ai^2(\alpha x) + Bi^2(\alpha x)} \quad (3.54)$$

L'asymptotique est encore très simple :

$$g(x \gg 1) \sim \frac{1}{x} \quad (T > T_c(N)) \quad (3.55)$$

$$g(x \ll 1) \sim \sqrt{|x|} \quad (T < T_c(N)) \quad (3.56)$$

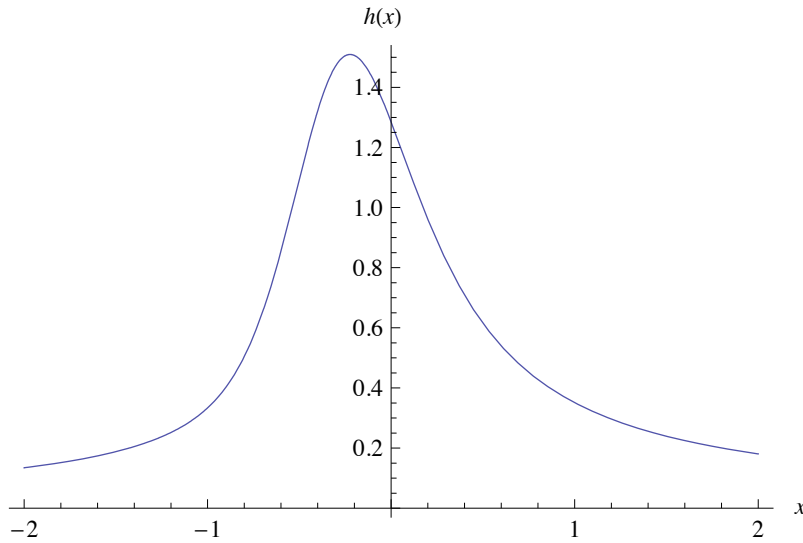


FIGURE 3.4 – Fonction d'échelle des fluctuations connexes $\langle \delta m^2 \rangle$

Pour finir l'exercice, la susceptibilité non-connexe est donnée par :

$$N \langle \delta^2 \rangle = N^{2/3} h\left(-\frac{\lambda}{\beta_c(N)^2}\right) + \mathcal{O}(1) \quad (3.57)$$

$$h(|x| > 1) \sim \frac{1}{x} \quad (3.58)$$

La fonction d'échelle h est tracée à la figure 3.4.

Les observables moyennes sont obtenues en effectuant la moyenne sur le désordre. A cette fin, introduisons $x = \sqrt{N/\sigma^2}(T_c(N) - T_c)$. Considérons une observable générique $\mathcal{O}$ ayant une fonction d'échelle $\mathcal{O}$, dont le comportement est, pour simplifier, symétrique de part et d'autre du point tricritique. On a :

$$\overline{\mathcal{O}}(T) = \frac{N^{2a/3}}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-x^2/2} \mathcal{O}(N^{2/3}\epsilon + N^{1/6}x) \quad (3.59)$$

Comme le montre les expressions explicites des fonctions d'échelle, $\overline{\mathcal{O}}$ a deux parties : une partie régulière correspondant aux petites valeurs de x et une partie singulière donnée par les queues de $\mathcal{O}(|x| \rightarrow \infty) \sim x^{-a}$.

Pour calculer cette partie, il faut collecter toutes les contributions venant d'un domaine de températures telles que $|T - T_c(N)| > cN^{-2/3}$. En définissant : $\sigma x_0 \equiv \sqrt{N}(T - T_c)$,

$$\overline{\mathcal{O}}(T) = \frac{N^{a/2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{\sigma(x+x_0) > cN^{-1/6}} \frac{e^{-x^2/2}}{(x+x_0)^a} \quad (3.60)$$

Cette dernière expression montre que lorsque $N \rightarrow \infty$, le dénominateur s'annule. Deux cas sont donc à considérer suivant que $a < 1$ ou $a > 1$.

1. Quand $a < 1$, à l'ordre dominant en N , on peut récrire (3.60) sous la forme :

$$\overline{O}(T) = \frac{N^{a/2}}{\sqrt{2\pi}} \int dx \hat{\mathcal{O}}(\sqrt{N}\epsilon) \quad (3.61)$$

$$\hat{\mathcal{O}}(u) \sim \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-y^2/2}}{|u+y|^a} \quad (3.62)$$

Ce qui revient à rétablir une forme habituelle de *finite-size scaling* mais en ayant changé la variable de remise à l'échelle.

2. Quand $a > 1$, l'ordre dominant est cette fois donné par :

$$\overline{O}(T) \sim N^{\frac{4a-1}{6}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\sqrt{N}\epsilon)^2\right) \int dy \mathcal{O}(y) \quad (3.63)$$

Cette expression montre un *finite-size scaling* plutôt inhabituel : non seulement la variable de remise à l'échelle est affectée, mais également l'amplitude qui n'est plus donnée par $N^{a/2}$.

En définitive, ce modèle simple illustre les difficultés que l'on peut rencontrer dans l'étude d'un modèle désordonné. Si les fluctuations thermiques sont masquées par les fluctuations de désordre, le *finite-size scaling* risque d'être particulièrement inhabituel.

2 R.O.M. et prédictions M.C.T.

A la différence du modèle à p spins sphériques, les équations dynamiques exactes ne sont pas connues pour le ROM. La dynamique du modèle sphérique associé au ROM peut être étudiée facilement (par exemple en se plaçant dans la base qui diagonalise la matrice de couplage) mais sa dynamique d'équilibre est triviale : le système se condense sur la plus grande valeur propre.

Le modèle ROM utilisant des spins d'Ising passe par une transition 1-RSB, la dynamique de ce modèle doit être décrite par la MCT, ou tout du moins par ses prédictions universelles (voir chapitre 1). Dans le cadre de la MCT, le comportement critique est observé autour de la température dynamique. Celle-ci joue le rôle d'une température critique pour les observables dynamiques. Aussi, même à N fini, les lois de puissance de la MCT doivent également être valides, au moins au sein d'une région dont la taille varie avec N . C'est en tout cas la leçon que l'on peut tirer de la théorie de *finite-size scaling*.

L'étude du critère de Harris au-delà de la dimension critique supérieure incite à une étude en deux temps :

1. Etudier les propriétés critiques. On peut par exemple penser aux relations universelles entre les exposants a , b et γ que prédit la MCT.
2. Etudier le *finite-size scaling* de ce modèle, en tenant compte des fluctuations de température critique induites par le désordre si besoin est.

2.1 Simulations numériques

Le ROM que nous avons simulé numériquement est le même que celui du précédent chapitre. Il est caractérisé par la valeur de la trace de la matrice de couplage ici égale $-1/8$. Avec ces paramètres, la température dynamique $T_d = 0.177$. L'incapacité à équilibrer des systèmes de grande taille à basse température nous a conduit à limiter l'étude de la

dynamique d'équilibre à $T > T_d$. Nous nous sommes également limités à un jeu de 15 températures régulièrement espacées entre 0.178 et 0.29 par pas de $\Delta T = 0.08$ pour les tailles $N = 32, 64, 128$ et 256.

La simulation se déroule en trois étapes :

1. Nous avons tout d'abord généré des configurations thermalisées en effectuant 15.10^6 itérations de *parallel tempering*.
2. Puis, nous avons effectué 5.10^5 itérations de l'algorithme simple de Metropolis. Au cours de cette partie, le recouvrement dynamique $q_d(t)$ entre la configuration initiale et la configuration à l'itération Metropolis t est mesuré :

$$q_d(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i(0) S_i(t) \rangle \quad (3.64)$$

3. 5.10^5 nouvelles itérations de *parallel tempering* permettent de générer une nouvelle configuration parfaitement décorrélée de la dernière configuration générée à l'étape précédente.

Les étapes 2 et 3 sont répétées 100 fois. Afin de pouvoir suivre la thermodynamique, et notamment pouvoir calculer la distribution du recouvrement statique, chaque simulation suit l'évolution de deux copies indépendantes pour chaque réalisation du désordre. Pour chacune d'entre elles, nous avons ainsi $N_{ther} = 200$ estimations du recouvrement dynamique $q_d(t)$, ce qui est suffisant pour avoir une estimation fiable de $\chi_4 \equiv \overline{q_d^2} - \overline{q_d}^2$. Le nombre d'échantillons de désordre ω est $N_{dis} = 500$.

2.2 Propriétés critiques :

Test des prédictions MCT.

Pour commencer l'étude de la phénoménologie MCT, nous nous sommes intéressés au recouvrement dynamique $q_d(t)$. La figure 3.5 montre l'apparition d'un plateau, dont l'extension augmente quand la température est abaissée. La valeur du plateau est proche de la valeur du paramètre d'Edwards-Anderson ($q_{EA}(T_d) = 0.955$) calculé dans la limite $N \rightarrow \infty$. On peut noter qu'après seulement un balayage Monte-Carlo, $q_d(t)$ a déjà atteint le plateau. On ne peut ainsi pas observer le régime β précoce. Il s'agit là d'une particularité de ce modèle. Le régime α est quant à lui pleinement développé. Ces résultats contrastent avec ceux obtenus pour le modèle de Potts complètement connecté [27, 28], où aucun plateau n'est observé même pour des systèmes de taille élevée ($N = 2560$).

Au-delà d'une relaxation en deux temps, la MCT donne des prédictions précises sur l'échelle de temps de la relaxation α . Définissons $\tau_\alpha(T)$ comme le temps nécessaire pour que $q_d(\tau_\alpha) = 1/2$. Si la superposition temps-température tient, la définition précise de τ_α importe peu. Nous avons vérifié (voir fig. 3.5) que $q_d(t, T)$ porté en fonction du rapport t/τ_α suit une courbe maîtresse dans un domaine de températures intermédiaires (*i.e.* pas trop proche de T_d).

Près de T_d , la superposition temps-température est violée : au-lieu d'approcher une courbe maîtresse universelle, $q_d(t)$ est de plus en plus étiré quand la taille du système augmente. Cela peut paraître paradoxal, cette superposition devrait de mieux en mieux s'appliquer à mesure que l'on s'approche de la température de transition de la MCT. Néanmoins, on constate sur les données que les corrections de taille finie sont plus importantes près de T_d . Ce comportement est également observé sur les courbes donnant τ_α en fonction de l'écart normalisé à la température de transition ϵ (voir fig 3.6). Une étude de la survenue des effets de taille finie en fonction de la température dans le cas du ROM standard peut être trouvée dans [34]. Elle montre que ceux-ci surviennent à une température $T_o \simeq 1.35T_d$.

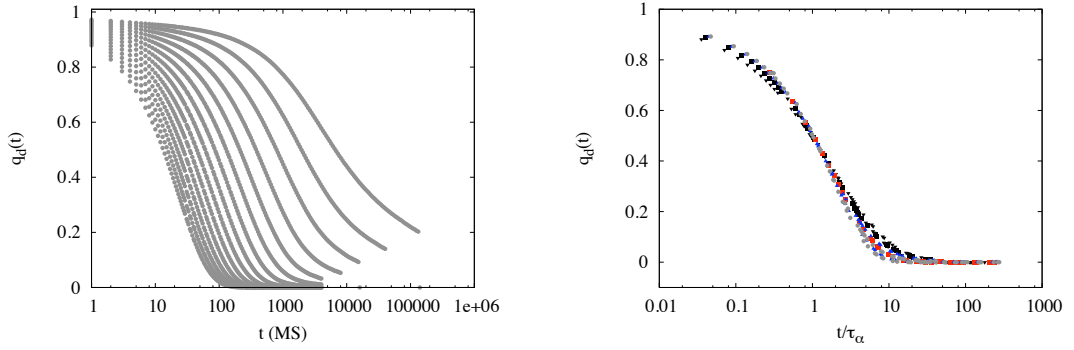


FIGURE 3.5 – *A gauche* : Evolution du recouvrement dynamique $q_d(t)$ en fonction de la température pour le plus grand système ($N = 256$), et pour différentes températures comprises entre $T \simeq T_d$ (courbe du haut) et $T = 1.65T_d$ (courbe du bas) par pas de $\Delta T/T_d = 5\%$. *A droite* : Test de la superposition temps-température de $q_d(t)$ pour toutes les tailles ($N = 256$ en gris, $N = 128$ en bleu, $N = 64$ en rouge et $N = 32$ en bleu) pour différentes températures comprises entre $T = 1.25T_d$ et $T = 1.65T_d$. On peut noter une diminution claire des effets de taille finie et la convergence vers une courbe limite.

Nous constatons que les violations de la superposition temps-température deviennent notables pour $T = 0.226 \simeq 1.3T_d$. Une loi de puissance $\tau_\alpha \sim \epsilon^{-\gamma}$, comme prédit par la MCT, rend compte de manière satisfaisante du régime $\epsilon > 0.2$. Ce régime de ϵ correspond à un régime où l'effet de taille finie est peu sensible sur $q_d(t)$. Le meilleur ajustement pour l'exposant conduit à $\gamma = 2.1 \pm 0.2$. La MCT donne également des prédictions détaillées sur la forme de la courbe maîtresse de $q_d(t)$. Cependant, le régime β est pour l'essentiel inaccessible, à l'exception de sa partie finale correspondant au départ du plateau. Celle-ci doit, en effet, suivre une loi de puissance (dite loi de von Schweidler) : $q_d(t) - q_{EA} \sim ct^{-b}$ lorsque $\tau_\beta \ll t \ll \tau_\alpha$. Une façon de mettre en évidence cette loi, sans être dépendant d'une détermination exacte de q_{EA} , est d'étudier $-dq_d/d\ln t$. La figure 3.6 montre nos données pour $N = 256$, à la plus basse température où les effets de taille finie sont négligeables sur q_d . Un ajustement en loi de puissance dans le régime β tardif donne un exposant $b \simeq 0.62$. Par ailleurs, la MCT relie les exposants b et γ . La valeur de b correspondant à $\gamma = 2.1$ est ainsi $b_{MCT} \simeq 0.75$. Cette valeur est clairement trop grande au vu des données de la figure 3.6. Il s'agit là d'un deuxième résultat surprenant, puisque la MCT est censée rendre compte de la dynamique du ROM.

L'analyse de la susceptibilité dynamique $\chi_4(t)$ conduit également à des résultats pour le moins surprenants. Le maximum χ_4^* de la susceptibilité tracé en fonction de ϵ sur la figure 3.7 pour la plus grande taille montre une loi de puissance compatible avec la prédiction MCT $\chi_4^* \sim 1/\epsilon$ (dans le régime où les effets de taille finie sont négligeables). Toutefois, la figure 3.7 montre également qu'il n'y a pas de superposition de $\chi_4(t)/\chi_4^*$ porté comme fonction de t/τ_4 , où τ_4 est tel que $\chi_4(\tau_4) = \chi_4^*$, ce qui contredit les prédictions MCT. On peut malgré tout vérifier que τ_4 et τ_α sont proportionnels : $\tau_4 \simeq 2\tau_\alpha$. La figure 3.7 montre également que $\chi_4(t)$ croît comme une loi de puissance à l'approche de son pic : $\chi_4(t) \sim t^{b_4}$ où $b_4 \simeq 0.8$. Une telle loi est prévue par la MCT, mais on devrait trouver : $\chi_4(t) \sim -dq_d/d\ln t$, c'est-à-dire $b_4 = b \simeq 0.62$ [19, 21]. La MCT prédit aussi que $\chi_4(t) \sim -dq_d(t)/dT$. Ces différentes quantités sont tracées à la figure 3.8 à une température où les effets de taille finie sont négligeables. On constate que si $-dq_d/d\ln t$ et $-dq_d(t)/dT$ sont clairement similaires,

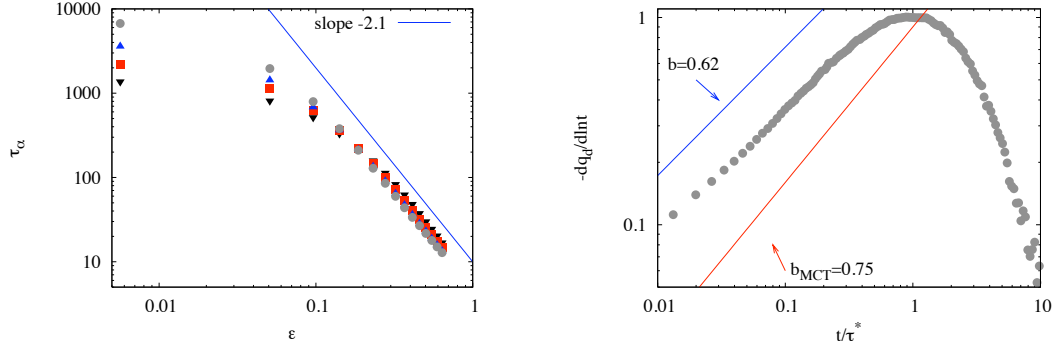


FIGURE 3.6 – *A gauche* : Le temps de relaxation τ_α comme fonction de $\epsilon = (T - T_d)/T_d$, pour toutes les tailles (le code couleur est identique à celui des figures précédentes). Pour $\epsilon > 0.2$, *i.e.* $T > 1.2T_d$, un régime indépendant de la taille N est observé. Il se caractérise par une loi de puissance $\epsilon^{-\gamma}$ avec $\gamma \simeq 2.1$ sur deux décades de temps. *A droite* : Détermination de l'exposant b de la loi de von Schweidler grâce à la dérivée logarithmique de $q_d(t)$ (ici $N = 256$ et $T = 0.226$).

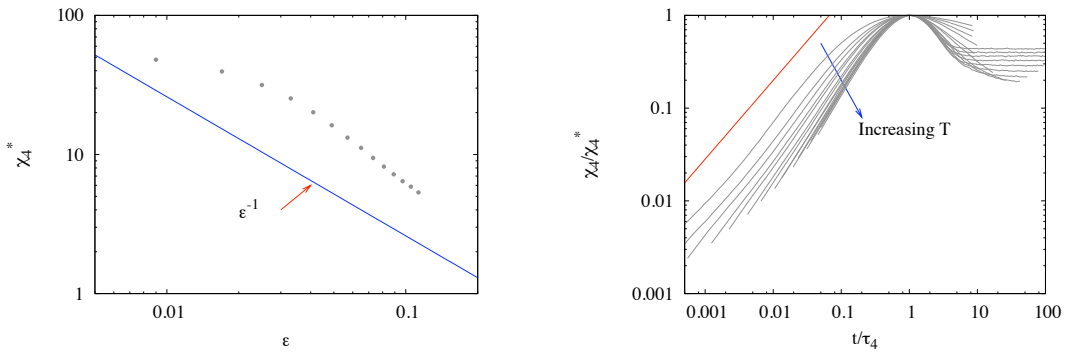


FIGURE 3.7 – *A gauche* : $\chi_4(t)$ en fonction de $\epsilon = (T - T_d)$. La ligne droite correspond à la prédiction MCT $1/\epsilon$. *A droite* : Remise à l'échelle de $\chi_4(t)$ (pour $N = 256$). La ligne droite correspond à une loi de puissance d'exposant 0.8.

$\chi_4(t)$ a un comportement qualitativement différent.

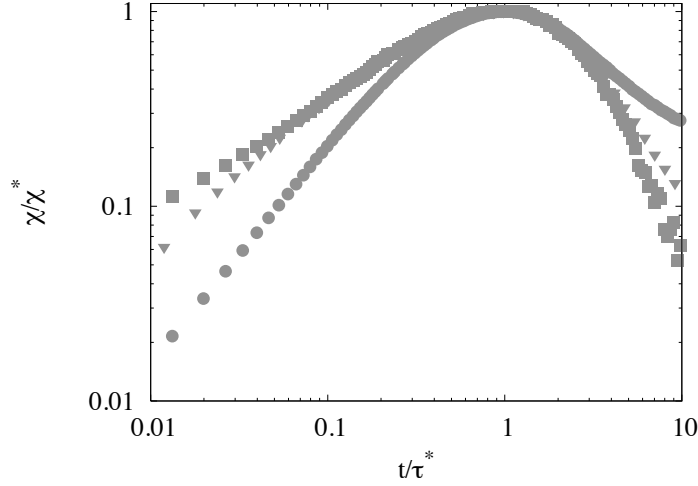


FIGURE 3.8 – Comparaison entre trois susceptibilités : $\chi_4(t)$ (cercles), $-dq_d/dlnt$ (carrés) et $-dq_d(t)/dT$ (triangles) pour $N = 256$ et $T = 0.226$. Chaque susceptibilité est remise à l'échelle en utilisant son propre maximum χ^* , et son temps associé τ^* . La MCT prévoit que ces trois susceptibilités croissent avec la même loi de puissance, ce qui n'est clairement pas le cas pour $\chi_4(t)$.

Cette comparaison entre la dynamique du ROM et les prédictions MCT montrent que certaines prédictions universelles sont quantitativement respectées quand d'autres sont violées. L'explication la plus simple de ce paradoxe est que les valeurs de ϵ utilisées ne sont pas suffisamment faibles pour être dans le régime asymptotique. Les prédictions de la MCT ne sont valables que dans une zone extrêmement étroite.

On peut alors se demander pourquoi ces prédictions ne sont pas mieux vérifiées pour les températures les plus proches de la transition. Les effets de taille finie devenant plus marqués près de T_d , il faut mener une étude de *finite-size scaling* fine pour espérer obtenir un accord quantitatif avec la MCT, alors même que ce modèle est censé être parfaitement décrit par cette théorie.

On peut donc légitimement douter de la précision et du caractère quantitatif de la comparaison entre des données expérimentales et la MCT. C'est là la conclusion principale de cette analyse.

Propriétés critiques et effets pré-asymptotiques en M.C.T. .

Afin d'étudier les effets pré-asymptotiques de la MCT, il faut prendre un modèle de référence dans lequel on puisse mener une étude semblable à celle du ROM. Le plus simple d'entre eux est le modèle de Leutheusser [120], qui provient de l'approximation schématique :

$$\ddot{\Phi}(t) + \Omega^2 \Phi(t) + 4\lambda \int_0^t \Phi^2(\tau) \dot{\Phi}(t - \tau) d\tau = 0, \quad \Phi(0) = 1 \quad (3.65)$$

Dans le régime suramorti ($\ddot{\Phi}(t) = 0$) et pour $\Omega = 1$, l'équation (3.65) est formellement identique à celle du modèle à p spins pour $p = 3$, $\Phi(t)$ joue le même rôle que $q_d(t)$.

Nous avons indiqué dans le chapitre 1 que ce modèle répondait à toutes les prédictions universelles de la MCT. En particulier, ce modèle est ergodique pour $\lambda < 1$, c'est-à-dire $\lim_{t \rightarrow \infty} \Phi(t) = 0$. Dans cette région, $\Phi(t)$ développe une relaxation en deux temps caractérisée par deux exposants a et b reliés par (1.29) :

$$\frac{\Gamma^2(1+b)}{\Gamma(1+2b)} = \frac{\Gamma^2(1-a)}{\Gamma(1-2a)} = \frac{1}{2} \quad (3.66)$$

ce qui conduit à $a \simeq 0.315$ et $b = 1$. L'exposant de la relaxation α est ainsi donné par $\gamma = 1/2a + 1/2b = 1.765$. Cette équation peut être résolue numériquement pour des valeurs arbitrairement grandes de t (voir annexe B, [81]). Dans ce qui suit, l'équation (3.65) est résolue pour $\Omega = 1$.

Afin de pouvoir comparer la solution de (3.65) directement avec les données du ROM, nous avons résolu cette équation pour des valeurs de $\epsilon = (1 - \lambda)/1$ identiques à celles du ROM. La figure 3.9 montre une superposition temps-température utilisant la valeur exacte de $\gamma \simeq 1.765$. On constate une bonne remise à l'échelle dans le régime β tardif (loi de von Schweidler), avec de très faibles violations. Cependant, seules les courbes de relaxation les plus proches de $\lambda_d = 1$ ($\epsilon < 0.05$) montrent une relaxation en deux temps avec un plateau non trivial. Le tracé en échelle log-log de $-\mathrm{d}\Phi/\mathrm{d}\ln t$ avec la prévision asymptotique $t^b = t$

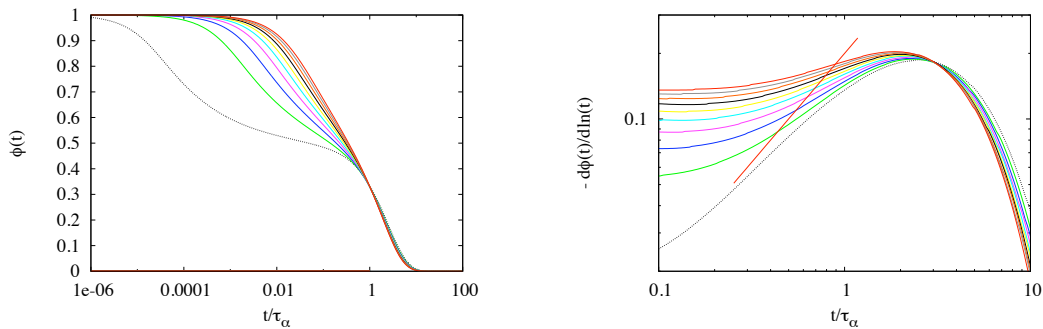


FIGURE 3.9 – Résolution du modèle de Leutheusser. *A gauche* : Superposition temps-température de $\Phi(t)$ pour des valeurs de λ à la même distance relative du point critique que dans les données du ROM. Depuis le haut vers le bas, les courbes correspondent à : $T = 0.25, \dots, 0.186, 0.178$. Le temps de relaxation α suit une loi de puissance $\tau_\alpha \sim (-\lambda)^{-1.765}$. *A droite* : Superposition temps-température de $-\mathrm{d}\Phi/\mathrm{d}\ln t$, le code couleur est identique. La prévision asymptotique pour le régime β tardif $-\mathrm{d}\Phi/\mathrm{d}\ln t \sim t^1$ est représenté par la ligne droite.

est encore plus frappant. On voit que la remise à l'échelle avant le pic est assez médiocre, et que la valeur apparente de l'exposant b diffère significativement de sa valeur asymptotique, et ce même pour les courbes les plus proches de λ_d . Cet exemple illustre que, bien que la valeur de γ extraite de la superposition temps-température soit correcte, la valeur que l'on estime de b à partir de $\Phi(t)$ à une distance de moins de 5% du point de transition est fortement sous-estimée. Ce comportement est identique à celui observé pour le ROM.

La même étude doit être conduite pour les susceptibilités non-linéaires $\chi_4(t)$ et $\chi_T(t) = \mathrm{d}\Phi/\mathrm{d}\lambda$. Au sein de la MCT, ces deux observables ont le même comportement asymptotique. En particulier, dans le régime β tardif, on s'attend à : $\chi_4(t) = \epsilon^{-1}F(t/\tau_\alpha)$ où $F(x) \sim x^b$. Numériquement, $\chi_T(t)$ s'obtient facilement à partir de $\Phi(t)$. Le cas de χ_4 est plus délicat.

Un calcul approché de χ_4 peut être effectué pour le modèle à p spins sphériques. A cette fin, on introduit un hamiltonien perturbé dépendant du temps [78] :

$$\mathcal{H}_\eta = \mathcal{H} - \eta q_d(t) \quad (3.67)$$

où H est le hamiltonien habituel du modèle à p spins. Avec cette définition,

$$\chi_4(t) \equiv \left. \frac{d}{d\eta} \langle q_d(t) \rangle \right|_{\eta=0} \quad (3.68)$$

Pour une valeur donnée de η , on peut résoudre (numériquement) le système des deux équations intégral-différentielles (voir l'annexe C). L'estimation de χ_4 s'obtient par une extrapolation minutieuse dans la limite $\eta \rightarrow 0$ [106]. La figure 3.10 donne le résultat d'une remise à l'échelle de ces deux observables. Bien que l'on observe une superposition approximative des courbes de χ_T près de son pic, seule la courbe la plus proche de la transition donne une estimation correcte de l'exposant b . Les violations à cette superposition sont en outre non-monotones. L'estimation de b provenant de $\chi_4(t)$ est quant à elle systématiquement supérieure et plus proche de la valeur asymptotique de b . Cet effet est similaire à celui observé dans le ROM.

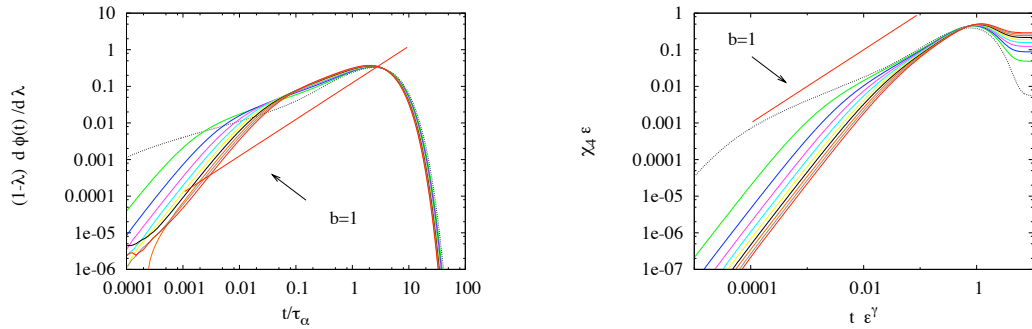


FIGURE 3.10 – *A gauche* : Remise à l'échelle de $\chi_T(t) = d\Phi/d\lambda$. Les valeurs de λ sont les mêmes que celles de la figure 3.9, avec un code couleur identique. Pour comparaison la prévision asymptotique : $d\Phi/d\epsilon \sim (t/8\tau_\alpha)^1$ est représentée par une la ligne droite. *A droite* : Remise à l'échelle de $\chi_4(t)$ dans le cas du modèle à 3 spins sphériques, pour les mêmes écarts ϵ . La ligne droite correspond à la prévision $\epsilon^{-1}(t\epsilon^\gamma)^b$ avec $b = 1$.

Pour observer le régime MCT asymptotique, il faut donc se placer bien plus près du point de transition. Par exemple, la figure 3.11 montre que pour observer le régime linéaire de $\chi_T(t)$, il faut se placer à $\epsilon \sim 10^{-3}$. De même l'approche de ce régime pour $\chi_4(t)$ est extrêmement lente.

De cet exercice émergent les conclusions suivantes sur le régime pré-asymptotique du ROM : 1. une superposition approximative de $q_d(t)$ est valable dans le régime β tardif, avec une estimation correcte de γ , 2. l'exposant b extrait de la dépendance temporelle de $q_d(t)$ sous-estime la valeur asymptotique et 3. la susceptibilité dynamique χ_4 suit approximativement la divergence en ϵ^{-1} de son pic, avec une approche du pic donnant une estimation raisonnable de b . On en déduit que les valeurs des différents exposants MCT de ce modèle sont donnés par $a \simeq 0.35$, $b \simeq 0.75$ et $\gamma \simeq 2.2$. Il est à noter que l'étude direct de la décorrélation de l'énergie au chapitre précédent donnait une estimation $a \simeq 1/3$.

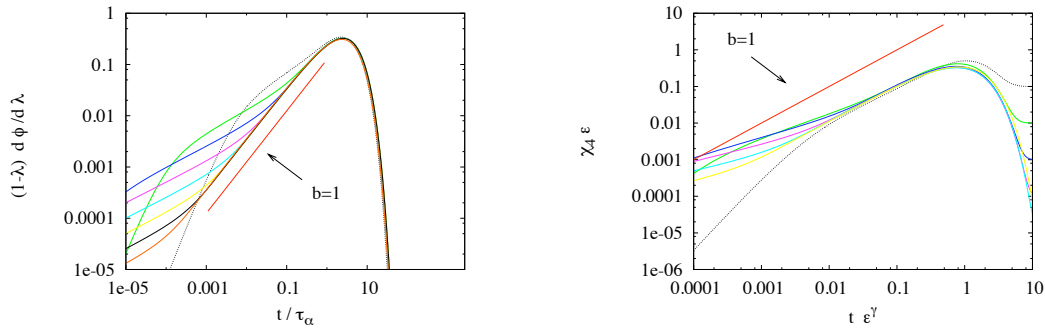


FIGURE 3.11 – Identique à la figure 3.10 mais pour des valeurs plus faibles de ϵ : $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-8}$ pour la figure de gauche et $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-6}$ pour celle de droite. Dans les deux cas, un régime linéaire se développe quand ϵ est abaissé

Naïvement, on serait tenté de confirmer ces valeurs par une étude de la dynamique plus proche du point de transition. Seulement, proche du point de transition, les corrections de taille finie deviennent prédominantes, ce qui nécessite une étude approfondie de ces effets.

2.3 *Finite-size scaling* : quand le désordre compte.

Afin de lever les fortes corrections de taille finie du ROM, il faut soit simuler de plus grandes tailles de système, ce qui n'est malheureusement pas possible, soit faire des extrapolations ou du *finite-size scaling*.

Comme le montre l'étude des points critiques désordonnés, la théorie de *finite-size scaling* est pour le moins délicate, et ne se simplifie pas au-dessus de la dimension critique supérieure. La façon dont le désordre est pris en compte au sein de la MCT n'est pas claire, a-t-il encore un effet ou est-il incorporé dans la théorie ? En effet, dans les modèles 1-RSB, il ne fait aucun doute que le désordre compte. Les systèmes passent par deux transitions, l'une statique l'autre dynamique. De manière, peut-être un peu naïve, on peut penser que les subtilités du *finite-size scaling* sont cachées dans la théorie MCT. Toutefois, les prédictions de la MCT peuvent être qualitativement changée en taille finie : les processus activés interdits dans la limite thermodynamique deviennent possibles, voir même dominants proche de T_d .

Par ailleurs, le fait de disposer d'une étude claire du *finite-size scaling* dans un modèle où la MCT est exacte est un point de référence pour mener la même étude sur les liquides surfondus dans leur régime MCT [100]. Quoiqu'il en soit, le *finite-size scaling* du ROM mérite d'être étudié.

Corrections de taille finie effectives.

Bien que l'étude directe des corrections de taille finie relève d'une véritable gageure, certains exposants de MCT sont reliés à ceux obtenus par la théorie des répliques. Il a été récemment démontré que la MCT pouvait être analysée comme une théorie de Landau valable pour $T > T_d$ et caractérisée par une échelle de longueur divergente $\xi \sim \epsilon^{-1/4}$ [11,19] et une dimension critique supérieure $d_u = 6$. Dans ce cas, la variable de remise à l'échelle est donc $N^{-1/d_u \nu_u} = N^{-2/3}$ [17]. Par exemple, le temps de relaxation α est donné par :

$$\tau_\alpha(T, N) = N^{\frac{\gamma}{d_u \nu_u}} \mathcal{T}(N^{\frac{1}{d_u \nu_u}} \epsilon) \quad \text{avec} \quad d_u \nu_u = 3/2 \quad (3.69)$$

Quand $N \rightarrow \infty$, toutes les dépendances en N doivent disparaître, et la divergence prédite par la MCT doit être retrouvée : $\mathcal{T}(x \rightarrow \infty) \sim x^{-\gamma}$.

L'analyse des données en utilisant la forme (3.69) est reportée sur la figure 3.12. En utilisant $\gamma = 2.1$, la meilleure superposition est obtenue avec l'exposant $d_u \nu_u = 2$ au lieu de la valeur $3/2$ issue des exposants MCT. La même analyse peut être conduite à partir de la susceptibilité non-linéaire χ_4 . Si le temps d'atteinte du pic τ_4 suit la même loi que τ_α , la hauteur du pic χ_4^* doit satisfaire :

$$\chi_4^*(T, N) = N^s \mathcal{X}\left((N^{\frac{1}{d_u \nu_u}} \epsilon)\right) \quad (3.70)$$

En utilisant la valeur effective $d_u \nu_u = 2$, l'exposant s doit être tel que, pour $N \gg 1$, χ_4^* diverge comme ϵ^{-1} indépendamment de N . Cela impose : $s = 1/2$, valeur qui diffère des données qui suggèrent $s \simeq 1 > 1/2$.

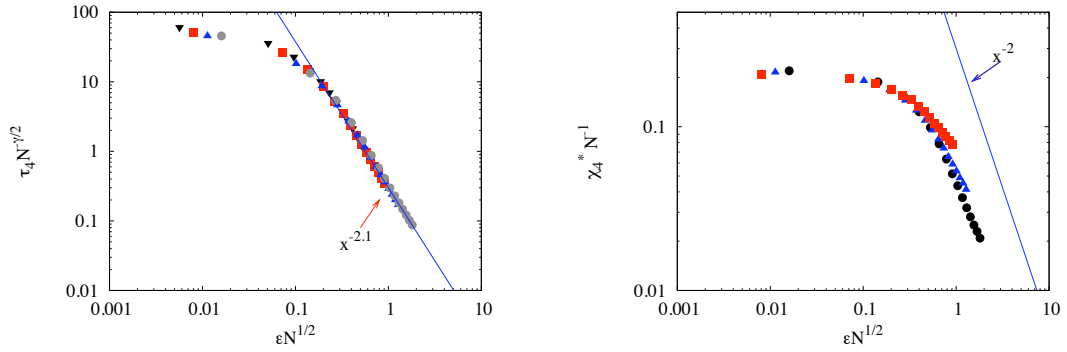


FIGURE 3.12 – *A gauche* : Remise à l'échelle de τ_4 en utilisant la forme (3.69) avec $\gamma = 2.1$ et $d_u \nu_u = 2$. *A droite* : Remise à l'échelle du maximum de χ_4 avec $d_u \nu_u = 2$ et $s = 1$.

L'analyse de ces données montrent clairement que les corrections de taille finie font intervenir d'autres effets que ceux inclus dans la MCT. Les exposants en jeu sont les mêmes que ceux du modèle de Blume-Capel faiblement désordonné introduit dans la section précédente. Les fluctuations de température critique de la MCT d'ordre $N^{-2/3}$ sont masquées par des fluctuations dues au désordre d'ordre $N^{-1/2}$. Une façon de comprendre l'origine de ces dernières est de considérer les équations TAP du ROM. Le développement haute-température conduisant aux équations TAP du ROM montre que les premières corrections viennent du désordre et sont d'ordre $N^{-1/2}$. Il faut donc discuter plus en détail les fluctuations de températures de transition dans ce modèle.

Fluctuations de la température critique.

D'un point de vue strictement phénoménologique, l'analyse des point critiques désordonnés peut se résumer dans l'existence de pseudo-températures critiques $T_c(\omega, N)$ dépendant à la fois de la réalisation du désordre $\{\omega\}$ et de la taille N . On peut reprendre, ici une analyse similaire à celle du modèle de Blume-Capel faiblement désordonné.

A cette fin, considérons une observable générique O , dont on veut calculer la moyenne sur le désordre $\overline{O}$. Supposons :

1. qu'effectuer la moyenne sur le désordre est équivalent à effectuer la moyenne sur la distribution de pseudo-températures dynamiques $\mathbb{P}(T_d(\omega, N))$. Pour simplifier la
2. R.O.M. ET PRÉDICTIONS M.C.T.

discussion, $\mathbb{P}(T_d(\omega, N))$ est une distribution régulière centrée autour de T_d , la température dynamique asymptotique, avec des fluctuations d'ordre $N^{-1/2}$ (par exemple une distribution gaussienne).

2. que pour chaque réalisation du désordre, un *finite-size scaling* thermique existe :

$$O(T, N) = N^{2\zeta/3} \mathcal{O}(N^{2/3}[T - T_d(\omega, N)]) \quad (3.71)$$

où ζ est un exposant dépendant de l'observable (par exemple, l'exposant γ pour τ_α), et la fonction d'échelle $\mathcal{O}$ est à l'ordre dominant indépendante du désordre. $\mathcal{O}(x)$ est supposée être régulière pour $|x| \ll 1$, et $\mathcal{O}(\pm|x|) \sim A_\pm |x|^{-\zeta}$ pour $x \rightarrow \infty$, de telle sorte que $O(T, N \rightarrow +\infty) \sim |\epsilon|^\zeta$.

En écrivant $T_d(\omega, N) = T_d - yN^{-1/2}$, la moyenne sur le désordre s'exprime comme :

$$\overline{O}(T) = N^{2\zeta/3} \int dy \mathbb{P}(y) \mathcal{O}(N^{2/3}\epsilon + N^{1/6}y) \quad (3.72)$$

où ici $\epsilon = T - T_d$. Comme précédemment, l'analyse de cette intégrale à N grand demande de distinguer deux cas : $\zeta > 1$ et $\zeta < 1$, le cas $\zeta = 1$ faisant intervenir des corrections logarithmiques.

- Quand $\zeta < 1$, en posant $\epsilon = u/\sqrt{N}$, à l'ordre dominant :

$$\overline{O}(T) = N^{\zeta/2} \hat{\mathcal{O}}(\sqrt{N}[T - T_d]) \quad (3.73)$$

$$\hat{\mathcal{O}}(u) = \int_{-u}^{\infty} A_+ \frac{\mathbb{P}(y)dy}{|u+y|^\zeta} + \int_{-\infty}^u A_- \frac{\mathbb{P}(y)dy}{|u+y|^\zeta} \quad (3.74)$$

Comme $\zeta < 1$, les intégrales définissant $\hat{\mathcal{O}}$ sont convergentes dans la limite $u \rightarrow 0$, conduisant à une fonction d'échelle bien définie. Dans ce cas, on retrouve une forme de *finite-size scaling* habituelle, seule la variable de remise à l'échelle est affectée.

- Quand $\zeta > 1$, le changement de variable adéquat est $y = z/N^{1/6} - u$. L'ordre dominant est donné par :

$$\overline{O}(T) = N^{\frac{4\zeta-1}{6}} \mathbb{P}(\sqrt{N}[T - T_d]) \int dz \mathcal{O}(z) \quad (3.75)$$

La décroissance rapide ($\zeta > 1$) de $\mathcal{O}$ assure la convergence de l'intégrale $\int dz \mathcal{O}(z)$. Dans ce cas, le *finite-size scaling* est radicalement changé par l'effet des fluctuations de désordre : la fonction d'échelle est donnée par la forme de la distribution des fluctuations de la température dynamique, la dépendance en N par un exposant $(4\zeta - 1)/6$ pour le moins inhabituel.

Cette analyse se généralise sans peine dans le cas d'une observable asymétrique, c'est-à-dire lorsque $\mathcal{O}$ décroît de manière asymétrique pour $x \rightarrow \pm\infty$.

Le ROM échantillon par échantillon.

Une vérification numérique de ces hypothèses est délicate pour le ROM. S'il existait une observable piquée autour de T_d , son maximum en taille finie permettrait de définir une pseudo-température dynamique. Comme nous l'avons vu, la susceptibilité dynamique par exemple, est monotonement croissante quand la température est abaissée.

Pour déterminer la pseudo-température, nous nous sommes concentrés sur les fluctuations échantillon par échantillon du temps de relaxation τ_α . Si l'on fait l'hypothèse, qu'à taille N fixée, le temps de relaxation est univoquement déterminé par la distance $T - T_d(\omega, N)$, i.e. $\tau_N(\omega, T) = \mathcal{T}(T - T_d(\omega, N))$, où $\mathcal{T}(x)$ est une fonction certaine, en choisissant un temps de relaxation de référence τ^* , on fixe alors pour un échantillon donné

la différence $T^*(\omega, N) - T_d(\omega, N)$ à une certaine valeur δ^* indépendante de l'échantillon considéré. En moyennant, et en supposant que $\overline{T_d(\omega, N)} = T_d$,

$$\delta^* = T^*(\omega, N) - T_d(\omega, N) = \overline{T^*(\omega, N) - T_d(\omega, N)} = \overline{T^*(\omega, N)} - T_d + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \quad (3.76)$$

où l'on a de plus supposé que les fluctuations de la température critique moyenne sont d'ordre $N^{-2/3}$. Cette procédure présente l'avantage de ne pas supposer une forme explicite de la fonction $\mathcal{T}$. Dès lors que le décalage en température est connu, on peut remettre à l'échelle l'axe des températures en éliminant l'effet du désordre. Il est à noter que l'ensemble de ces hypothèses sont exactes dans le cas du modèle de Blume-Capel faiblement désordonné de la partie précédente.

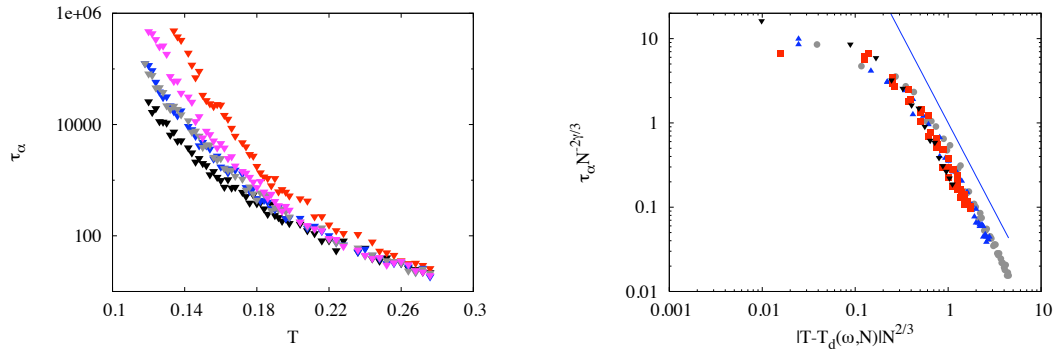


FIGURE 3.13 – *A gauche* : τ_α en fonction de la température pour 5 échantillons de désordre (ici $N = 32$). On voit nettement les fluctuations d'échantillon à échantillon. *A droite* : Remise à l'échelle de τ_α utilisant les pseudo-températures dynamiques. Ici est tracé pour chaque taille l'échantillon le plus rapide, l'échantillon le plus lent et un échantillon typique. La ligne droite a une pente $-\gamma = -2.1$. Cette courbe confirme que l'exposant γ précédemment obtenu est le vrai exposant MCT.

Les résultats de cette analyse sont rassemblés dans les figures 3.13 et 3.14. La statistique thermique étant limitée, il n'est pas possible d'extraire la distribution de $T_d(\omega, N)$. Malgré ces limitations, les résultats sont en parfait accord avec cette ligne d'argumentation. En particulier, après la remise à l'échelle des températures dynamiques, la meilleure superposition des données que ce soit pour le temps de relaxation ou le maximum de χ_4 est obtenue avec la variable de *finite-size scaling* usuelle : $N^{2/3}(T - T_d(\omega, N))$. Par ailleurs la divergence en ϵ^{-1} de χ_4^* est clairement visible.

Et au-delà.

La mise en évidence de pseudo-températures rendant compte des fluctuations d'échantillon à échantillon permet de réinterpréter la divergence anormale de la susceptibilité dynamique, et l'étirement du recouvrement dynamique dans le régime α

A $T > T_d(\omega, N)$, le pic $\chi_4^*(T)$ doit diverger comme $\epsilon^{-1} \equiv \epsilon^{\zeta_+}$ avec $\zeta_+ = 1$. Par ailleurs, en-dessous de $T_d(\omega, N)$, on s'attend à ce que la variance du recouvrement dynamique soit d'ordre N , à cause de l'activation qui fait que le système explore des états de recouvrement non-nul. Pour recoller ces deux régimes de part et d'autre de la pseudo-température de

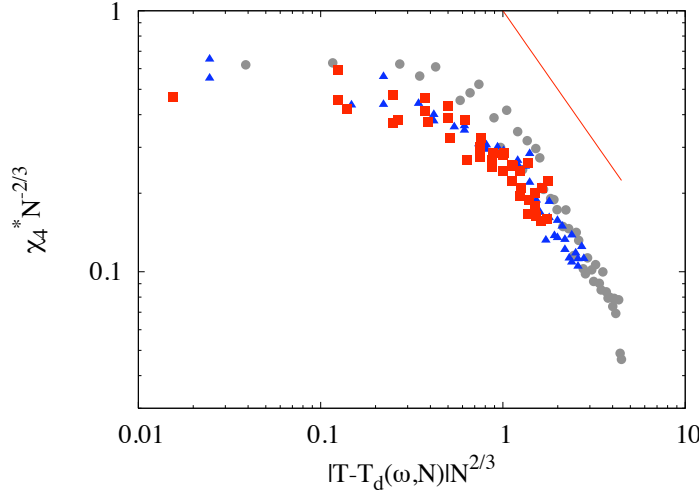


FIGURE 3.14 – Remise à l'échelle de χ_4^* utilisant les pseudo-températures dynamiques. La ligne droite a une pente -1 correspondant à la prédiction MCT.

transition, on est conduit à prendre pour un échantillon :

$$\chi_4^*(T) = N^{2/3} \mathcal{X}(N^{2/3}[T - T_d(\omega, N)]) \quad (3.77)$$

$$\mathcal{X}(x \gg 1) \sim x^{-1} \quad \zeta_+ = 1 \quad (3.78)$$

$$\mathcal{X}(x \ll -1) \sim |x|^{1/2} \quad \zeta_- = -1/2 \quad (3.79)$$

Le cas de χ_4 est identique à celui de la susceptibilité non-connexe dans le cas du modèle de Blume-Capel faiblement désordonné. En étendant au cas asymétrique la discussion de la section précédente, on note que les échantillons "froids" dominent le comportement moyen de χ_4^* , on est ainsi conduit à :

$$\chi_4^*(T) \sim N^s \hat{\mathcal{X}}(N^{2/3}[T - T_d]) \quad (3.80)$$

où l'exposant anormal est donné par $s = 3/4$. Cela donne une explication qualitative de l'exposant trouvé à la figure 3.12.

Le temps de relaxation τ_α est lui également fortement dépendant de fluctuations échantillon par échantillon. Deux régimes sont ici aussi à distinguer : le régime $T > T_d(\omega, N)$ où le temps de relaxation diverge comme $\epsilon^{-\gamma}$, et le régime activé $T < T_d(\omega, N)$. En supposant que les barrières d'énergie varient comme N^ψ , on est conduit à écrire à désordre fixé :

$$\tau(\omega, N) = N^{2\gamma/3} \mathcal{T}(N^{2/3}[T - T_d(\omega, N)]) \quad (3.81)$$

$$\mathcal{T}(x \gg 1) \sim x^{-\gamma} \quad (3.82)$$

$$\mathcal{T}(x \ll -1) \sim \exp(-c(\omega)|x|^{3\psi/2}) \quad (3.83)$$

où la constante $c(\omega)$ dépend de la réalisation du désordre afin de tenir compte d'une possible dépendance au désordre des barrières d'activation. Dans le cas du ROM, il est raisonnable de penser que $\psi = 1$ [14, 94, 122, 123]. Comme nous avons estimé τ_α comme étant $q_d(t = \tau_\alpha, T) = 1/2$, cette quantité est dominée par les échantillons typiques, et l'on s'attend donc à une variable de remise à l'échelle d'ordre $\sqrt{N}\epsilon$.

Cependant, l'effet sur le recouvrement dynamique $q_d(t)$ est différent. Les temps longs de $\bar{q}_d(t, T)$ sont ainsi dominés par les événements froids. Si l'on néglige la dépendance au désordre de $c(\omega)$, une distribution gaussienne de pseudo-températures conduit à :

$$\bar{q}_d(t \rightarrow \infty, T) \sim \int_u^\infty \frac{dy}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-tN^{-2\gamma/3} e^{-cN^{\psi-1/2}(y-u)^{3\psi/2}} \right] e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} \quad (3.84)$$

avec $u = \sqrt{N}\epsilon$. L'évaluation de cette intégrale par la méthode du col permet d'écrire :

$$\ln \bar{q}_d(t \rightarrow \infty, T) \sim \left[\frac{\ln t}{N^{\psi-1/2}} \right]^{\frac{4}{3\psi}} \quad (\psi > 1/2) \quad (3.85)$$

Cette décroissance est bien plus lente qu'une exponentielle étirée. Cet argument donne une origine possible au ralentissement de la relaxation α tardive de q_d , en accord (qualitatif) avec le comportement observé sur la figure 3.5. En particulier, cet argument prédit que ce ralentissement est de plus en plus marqué lorsque l'on approche de T_d .

3 Conclusion

L'étude détaillée des points critiques désordonnés illustre la subtilité des effets de taille finie des systèmes désordonnés. Le fait que les propriétés critiques et le *finite-size scaling* soient gouvernés par deux critères distincts montre que le comportement en taille finie peut qualitativement différer des prévisions d'une théorie asymptotique. La dynamique MCT du ROM est à ce titre exemplaire.

Le comportement non-trivial de certaines observables (susceptibilité dynamique, recouvrement dynamique) ne peut se comprendre sans un traitement rigoureux des effets préasymptotiques et de du désordre gelé (fluctuations de température critique). Il s'agit là d'un point de référence utile. Certaines prédictions s'avèrent plus robustes que d'autres. Par exemple, la relation entre χ_4 et κ_T est en fait un test particulièrement exigeant de la MCT, et n'est valable que très proche de la température de couplage de modes. Il n'est pas surprenant que cette relation ne soit qu'imparfaitement vérifiée dans les vrais liquides surfondus.

Cette analyse permet surtout de distinguer ce qui est de l'effet de la taille finie et de la dimension finie dans les chapitres suivants. Si une étude similaire pouvait être menée sur un mélange binaire de Lennard-Jones, il serait plus facile de discriminer, ce qui est dû à des corrections de taille finie ou à la dimension finie [100].

Annexe B : Résolution numérique du modèle de Leutheusser.

La résolution de l'équation (3.65) est rendue délicate par la lenteur de la relaxation. Il serait par exemple absurde de donner le même poids à chaque pas de temps. Pour cela, on a recours à un pas de temps logarithmique. La méthode décrite dans ce qui suit est valable pour des modèles plus généraux. Nous reprenons donc la démarche générale due à [81]

L'équation (3.65) peut être mise sous la forme [86] :

$$F(t) = m(t) - \frac{d}{dt} \int_0^t dt' m(t-t') F(t') \quad (3.86)$$

$$m(t) = \mathcal{F}[V, F(t)] \quad (3.87)$$

où $F(t) = \phi(t)$ et $m(t)$ n'est autre que la fonction mémoire. De manière générale, celle-ci est une fonctionnelle du potentiel d'interaction V et du corrélateur $\phi(t)$ (voir la section 1 du chapitre 1). Les dépendances en fonction du vecteur d'onde sont négligées dans le modèle de Leutheusser, la fonctionnelle F est ici simplement : $\mathcal{F}[f] = v f^2$.

Pour séparer les parties rapide et lente de la relaxation, on récrit le noyau intégral :

$$I = \frac{d}{dt} \int_0^t dt' m(t-t') F(t') \quad (3.88)$$

$$= F(t/2)m(t/2) + \int_0^{t/2} \dot{m}(t-t') F(t') dt' + \int_0^{t/2} \dot{F}(t-t') m(t') dt' \quad (3.89)$$

Avec l'approximation suivante :

$$\int_{t_1}^{t_2} dt' \dot{A}(t-t') B(t') = \frac{A(t-t_1) - A(t-t_2)}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} B(t') dt' + \mathcal{O}(t_2 - t_1)^3, \quad (3.90)$$

on peut facilement récrire (3.89). Introduisons le pas de temps $h = t/n$, et divisons l'intervalle $[0 : t]$ en n intervalles $[t_i, t_{i+1}]$, $i = 0, \dots, n-1$. I est donc évaluée comme :

$$I = m_{n/2} F_{n/2} + \sum_{i=1}^{n/2} dF_i (m_{n-i+1} - m_{n-i}) + dm_i (F_{n-i+1} - F_{n-i}) \quad (3.91)$$

où

$$dF_i = \frac{1}{h} \int_{t_{i-1}}^{t_i} F(t') dt' \quad \text{et} \quad dm_i = \frac{1}{h} \int_{t_{i-1}}^{t_i} m(t') dt' \quad (3.92)$$

Et donc,

$$F_n(1 + dm_1) = m_n(1 - dF_1) + -m_{n/2} F_{n/2} + dF_1 m_{n-1} + dm_1 F_{n-1} \quad (3.93)$$

$$+ \sum_{i=2}^{n/2} dF_i (m_{n-i+1} - m_{n-i}) + dm_i (F_{n-i+1} - F_{n-i}) \quad (3.94)$$

$$m_i = \mathcal{F}[V, F_i] \quad (3.95)$$

où l'on a besoin de connaître F_i , m_i pour $i = 0, \dots, n-1$ mais dF_i et dm_i pour $i = 1, \dots, n/2$. Connaissant ces derniers pour $i = 1, \dots, n/2$, on peut résoudre récursivement les équations pour obtenir F_i et m_i pour $i = n/2 + 1, \dots, n$.

Une fois une solution stable obtenue pour $[0, t]$, on conserve $n/2$ de ses points et l'on divise maintenant l'intervalle $[0, 2t]$ en n intervalles de même longueur. On transforme ainsi : $h \rightarrow 2h$, $F_{2i} \rightarrow F_i$, et les intégrateurs $dF_i \rightarrow dF_i^+$ et $dm_i \rightarrow dm_i^+$, où :

$$dF_i^+ = \frac{dF_{2i} + dF_{2i+1}}{2} \quad i \leq \frac{n}{4} \quad (3.96)$$

$$dF_i^+ = \frac{F_{2i} + 4F_{2i-1} + F_{2i-2}}{6} \quad i > \frac{n}{4} \quad (3.97)$$

Cette transformation permet de calculer n'importe quel intervalle de temps $[0, \tau]$, aussi grand soit-il. La précision de l'intégration n'est pas liée au nombre n de pas d'intégration.

Annexe C : Calcul numérique de $\chi_4(t)$ dans le modèle à p spins sphériques.

Le calcul direct de $\chi_4(t)$ par l'utilisation directe des équations dynamiques est une tâche difficile. Une manière de le simplifier est d'introduire un champ de couplage à une configuration $\mathcal{C}_0$ de référence, en introduisant le hamiltonien dépendant du temps [78] :

$$\mathcal{H}_\eta = \mathcal{H} - \eta q_d(\mathcal{C}_t, \mathcal{C}_0) \quad (3.98)$$

Il est clair qu'à l'équilibre,

$$\chi_4(t) = \beta (\langle q_d(\mathcal{C}_t, \mathcal{C}_0)^2 \rangle - \langle q_d(\mathcal{C}_t, \mathcal{C}_0) \rangle^2) \quad (3.99)$$

$$= \left. \frac{\partial}{\partial \eta} \langle q_d(\mathcal{C}_t, \mathcal{C}_0) \rangle \right|_{\eta \rightarrow 0} \quad (3.100)$$

Ce résultat se prolonge à η non-nul mais pas trop élevé en vertu de la théorie de la réponse linéaire.

Dans le cas du modèle à p spins sphériques, le formalisme de Janssen-De Dominicis permet de résoudre le problème [78] (voir le chapitre 1). Pour cela, on repart de l'équation de Langevin :

$$\frac{d}{dt} S_i(t) = -\frac{\delta}{\delta S_i(t)} \mathcal{H}_{p\text{-spin}} - \mu(t) S_i(t) + \eta S_i(0) + \nu_i(t) \quad (3.101)$$

$$\langle \nu_i(t) \nu_j(t') \rangle = 2T \delta_{ij} \delta(t - t') \quad (3.102)$$

où $\mu(t)$ est un paramètre de Lagrange imposant la contrainte sphérique pour tout temps. L'application du formalisme de Janssen-De Dominicis conduit à une équation de Langevin effective auto-cohérente pour un spin :

$$\frac{d}{dt} S(t) = -\mu(t) S(t) + \frac{p(p-1)}{2} \int_0^t du C^{p-2}(t, u) R(t, u) S(u) \quad (3.103)$$

$$+ \frac{p}{2} C^{p-2}(t, 0) S(0) + \eta S(0) + \xi(t) \quad (3.104)$$

où le bruit effectif $\xi(t)$ est un bruit gaussien coloré donné par :

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \frac{p}{2} C^{p-1}(t, t') + 2T \delta(t - t') \quad (3.105)$$

C et R sont les fonctions de corrélation $C(t, t') = \langle S(t) S(t') \rangle$ et de réponse $R(t, t') = \langle \delta S(t) / \delta \xi(t') \rangle$. En utilisant les corrélations entre $S(t)$ et $\xi(t')$, on est conduit à un jeu complet d'équations, pour $t > t'$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t'} C(t, t') &= -\mu(t) C(t, t') + \frac{p(p-1)}{2} \int_0^t du C^{p-2}(t, u) R(t, u) C(t, t') \\ &+ \frac{p}{2} \int_0^{t'} du C^{p-1}(t, u) R(t', u) + \frac{\beta p}{2} C^{p-1}(t, 0) C(t', 0) + \eta C(t', 0) \end{aligned} \quad (3.106)$$

$$\frac{\partial}{\partial t'} R(t, t') = -\mu(t) R(t, t') - \frac{p(p-1)}{2} \int_t^t du C^{p-2}(t, u) R(t, u) R(u, t') \quad (3.107)$$

$$\begin{aligned} \mu(t) &= \frac{p(p-1)}{2} \int_0^t du C^{p-2}(t, u) R(t, u) C(t, t) + \frac{p}{2} \int_0^t du C^{p-1}(t, u) R(t, u) \\ &+ \frac{\beta p}{2} C^{p-1}(t, 0) C(t, 0) + \eta C(t, 0) + T \end{aligned} \quad (3.108)$$

Finalement, $\chi_4(t)$ s'obtient comme :

$$\chi_4(t) = \frac{d}{d\eta} C(t, 0) \quad (3.109)$$

La résolution de ces équations peut être faite en utilisant la méthode de l'annexe B [106].

Chapitre 4

L.O.R.M. :

Un modèle de Kač pour le R.O.M.

La définition d'un modèle de dimension finie utilisant le lien entre modèles 1-RSB et transition vitreuse est un travail délicat. Beaucoup de modèles ont été proposés et analysés. Quatre grandes approches ont été utilisées.

L'approche naturelle qui consiste à prendre la version proches voisins des modèles complètement connectés (p-spin, q-Potts). Par exemple, l'étude du modèle de Potts à 10 états a montré que sa dynamique pouvait être décrite par des clusters interagissant par des interactions de type ferromagnétiques [28, 30]. L'étude du modèle à 3 spins en champ aléatoire est également décevante : en $d = 3$, la transition 1-RSB à température finie disparaît [71, 102].

Une approche plus élaborée est celle des modèles de verre sur réseau. L'exemple type de ces modèles [22] est le suivant : sur chaque nœud d'un réseau (cubique par exemple), on place une particule caractérisée par une variable d'occupation prenant la valeur 0 ou 1. Cette variable d'occupation est soumise à une règle (thermodynamique) d'occupation : chaque particule ne peut avoir plus de l voisins parmi ses z sites proches voisins possibles du réseau. Une analyse de champ moyen de ces modèles (réseau de Bethe) peut être conduite [150], exhibant une thermodynamique identique à celle des modèles 1-RSB. En dimension finie, ces modèles ont tendance à cristalliser, ce qui empêche l'étude de leur comportement vitreux [143, 144].

Plus récemment, les modèles unidimensionnels de verre de spin ont attiré beaucoup d'attention [117, 121]. Ceux-ci sont définis par le hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j \quad (4.1)$$

$$\mathbb{P}[J_{ij} \neq 0] \propto |i - j|^{-\rho} \quad (4.2)$$

Suivant la valeur de ρ , ces modèles interpolent continûment depuis la dimension infinie ($\rho < 4/3$) vers la dimension finie ($4/3 < \rho < 2$) [101–103]. Le comportement de ces modèles dans la partie de dimension finie montre une physique d'un type différent et proche de celle du modèle *SK* [71, 117].

La dernière approche est celle des modèles de Kač introduite par [80] (voir le chapitre 1). Comme dans les modèles unidimensionnels, il s'agit d'obtenir une interpolation continue depuis le champ moyen vers la dimension finie mais cette fois en mimant des interactions de type proches voisins. Cette approche permet de donner un modèle proche des idées développées au sein de la RFOT [74], et de valider certaines de ses prédictions [76]. Néanmoins, ces calculs analytiques reposent sur différentes hypothèses (Ansatz à un pas, symétrie radiale des instantons,...) qu'il serait bon de vérifier numériquement. En outre la

dynamique de ce modèle reste à étudier. Malheureusement, il n'est pas possible de directement simuler ce modèle en raison de la mauvaise séparation entre T_d et T_s . En taille finie, il ne serait pas possible de séparer les différents régimes.

Au final, il n'existe aucun modèle désordonné de spin qui soit 1-RSB en dimension infinie, et qui conserve une physique similaire en dimension $d=3$. L'objet de ce chapitre est de montrer comment définir un tel modèle en utilisant des interactions de Kač. Comme nous l'avons vu, le ROM en raison de sa transition 1-RSB très discontinue est un modèle de référence utile. L'étude exhaustive de sa dynamique d'équilibre permet en outre de disposer d'éléments de comparaison fiables [153].

Ce chapitre est organisé comme suit : la première section est une introduction aux modèles de Kač et à leur physique, la deuxième section montre comment définir un modèle de Kač à partir du ROM, et la troisième et dernière section est dédiée à l'étude numérique de sa thermodynamique.

1 Introduction aux modèles de Kač.

Les interactions de Kač sont un outil analytique permettant d'interpoler continûment du champ moyen à la dimension finie. Elles ont été utilisées avec un degré de rigueur variable pour démontrer la théorie de Maxwell (construction de l'enveloppe convexe) des transitions de phase [118]. D'un point de vue technique, on peut utiliser ces interactions de deux manières : i) soit on les utilise explicitement pour dériver une enveloppe convexe de l'énergie libre, et borner l'énergie d'équilibre avec [97–99, 118] ii) soit on les utilise pour dériver une fonctionnelle d'un paramètre d'ordre spatialement inhomogène et obtenir ainsi une fonctionnelle de Van der Waals (ou plus généralement une théorie de Landau). Nous adopterons ce second point de vue particulièrement bien adapté aux systèmes désordonnés. En effet, le calcul générique des observables nécessitant l'introduction de la méthode des répliques, et le calcul d'une action effective, une formulation fonctionnelle est toute indiquée.

Après avoir illustré comment cet outil est utilisé sur le modèle d'Ising, nous présenterons comment ont pu, par une formulation fonctionnelle de la thermodynamique du modèle à p spins de dimension finie, être posées les bases d'une théorie de la "nucléation" dans les milieux désordonnés.

1.1 Un exemple simple : le modèle d'Ising.

Considérons un modèle ferromagnétique défini par :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (4.3)$$

où les interactions J_{ij} sont positives, et les spins $S_i = \pm 1$. En utilisant une transformation inverse de Hubbard, la fonction de partition de ce modèle est donnée par :

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{m_i}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{ij} m_i J_{ij}^{-1} m_j + \sum_i (m_i + h) S_i \right) \quad (4.4)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{m_i}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{ij} m_i J_{ij}^{-1} m_j + \sum_i \ln \cosh (m_i + h) \right) \quad (4.5)$$

Pour pouvoir interpoler continûment d'un modèle complètement connecté à un modèle de dimension finie, un choix commode est de prendre :

$$J_{ij} = \gamma^d \phi(\gamma |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (4.6)$$

où la fonction $\phi(x)$ est bornée et intégrale pour tout $x > 0$. Dans la limite $\gamma \rightarrow 0$, on peut écrire

$$J_{ij}^{-1} \sim \int d^d q e^{-iq|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} (1 + \frac{\alpha}{\gamma^2} q^2 + \dots) \quad (4.7)$$

où α est une constante. Et, dans la limite continue,

$$Z = \int \mathcal{D}m \exp \left(- \frac{\beta}{\gamma^d} \int d^d x \frac{1}{2} (1 - T) m^2(x) + b m^4(x) + \alpha |\nabla m|^2(x) + h m(x) \right) \quad (4.8)$$

On retrouve ainsi la théorie en ϕ^4 bien connue, b étant un coefficient positif dépendant faiblement de la température. Cette dernière expression montre que la théorie de champ moyen se retrouve en prenant une solution spatialement homogène. C'est cette particularité de la limite de Kač que l'on veut utiliser dans le cas des modèles 1-RSB pour pouvoir passer d'une description de champ moyen à une théorie de dimension finie.

1.2 Le modèle à p spins de dimension finie.

On peut généraliser une telle construction au cas du modèle à p spins, comme nous l'avons vu au chapitre 1. Rappelons que le modèle est alors défini par [75] :

$$\mathcal{H} = - \sum_{i_1, \dots, i_p} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} \quad (4.9)$$

Les spins S_i sont des variables continues vérifiant une contrainte sphérique locale :

$$\sum_{i \in B} S_i^2 = N_B \quad (4.10)$$

La boule B a un rayon très petit devant γ^{-1} . Les couplages sont des variables aléatoires gaussiennes identiquement distribuées de valeur moyenne nulle et de variance donnée par :

$$\sigma_{i_1 \dots i_p}^2 = \frac{1}{2} \gamma^{pd} \sum_k \phi(\gamma|i_1 - k|) \dots \phi(\gamma|i_p - k|) \quad (4.11)$$

Il est possible d'utiliser ce type de modèles pour effectuer un calcul complet d'une expérience de cavité [76]. Pour ce faire, considérons une configuration de référence S_α , et une configuration S . A l'extérieur d'une boule $B_0(l)$ de rayon l , centrée en $x = 0$, le recouvrement entre S et S_α est fixé à une valeur q . Dans l'expérience de cavité, on prendrait $q = 1$. Définissons, alors, la mesure contrainte :

$$\langle O \rangle_{\alpha, l} \equiv \frac{1}{Z_\alpha} \int dS O(S) e^{-\beta \mathcal{H}(S)} \prod_{i \notin B(l)} \delta(Q_{S, S_\alpha}(0) - q) \quad (4.12)$$

où le recouvrement local est défini par $Q_{a,b}(i) \equiv \gamma^d \sum_j \phi(\gamma|i - j|) S_j^a S_j^b$. L'objet que l'on souhaite calculer est la fonction de corrélation du centre de la boule à la configuration de référence S_α :

$$G(l) = \overline{\text{Tr}_\alpha \langle Q_{S, S_\alpha}(0) \rangle_{\alpha, l}} \quad (4.13)$$

Le calcul des valeurs moyennes s'effectue en utilisant la méthode des répliques. La matrice des répliques $q_{ab}(i)$ est une matrice de taille $nr \times nr$. (4.13) devient, en introduisant $x = \gamma i$:

$$G(l) = \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{r \rightarrow 1} \int \mathcal{D}q_{ab}(x) q_{1, n+1}(0) e^{-n \gamma^d S[q_{ab}]} \quad (4.14)$$

Le choix du paramétrage est une généralisation du cas de champ moyen (voir l'annexe A du chapitre 1), dans la partie où $T > T_s$:

$$q_{ab} = \begin{pmatrix} Q & P & P & P \\ P & Q & P & P \\ P & P & Q & P \\ P & P & P & Q \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & q_1 & q_0 & q_0 \\ q_1 & 1 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & 1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Les matrices P et Q sont des matrices à un pas de brisure dont les points de brisure m sont identiques. La partie diagonale de Q est fixée par la contrainte sphérique locale sur les spins. Les paramètres p , q_0 et q_1 donnent respectivement le recouvrement entre la configuration contrainte et la configuration de référence, $p(x) = q$ hors de la boule $B(l)$, deux configurations contraintes n'appartenant pas au même état métastable, et deux configurations contraintes dans le même état métastable. Le point de brisure m est quant à lui pris indépendant de l'espace. L'action effective $S[p(x), q_0(x), q_1(x)] = \int d^d x \mathcal{L}(x)$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x) &= -\frac{\beta^2}{2} [f(1) + 2f(\phi * p) - (1-m)f(\phi * q_1) - mf(\phi * q_0)] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{p^2 - q_0}{1 - (1-m)q_1 - mq_0} - \frac{m-1}{2m} \ln(1-q_1) - \frac{1}{2} \ln(1 - (1-m)q_1 - mq_0) \end{aligned}$$

où $f(x) = x^p$ et $\phi * p(x) = \int d^d y \phi(|x-y|)p(y)$. Cette expression montre (par construction) que si l'on prend la limite homogène $p(x) = p$, $q_{0/1}(x) = q_{0/1}$, on retrouve les résultats du champ moyen. En outre, il s'en suit que

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} G(\gamma l) = p(0) \quad (4.16)$$

$p(x)$, $q_{0/1}(x)$ devant être des points stationnaires de l'action $S[p(x), q_0(x), q_1(x)]$.

Pour déterminer $p(x)$, $q_0(x)$, et $q_1(x)$, il faut résoudre les équations d'Euler-Lagrange associées à l'action $S[p(x), q_0(x), q_1(x)] = \int d^d x \mathcal{L}(x)$. Leur résolution est délicate dans le cas général. Cependant, en supposant que les solutions ont une symétrie radiale, on peut mener une étude en dimension d quelconque.

Dans le modèle complètement connecté, la brisure d'ergodicité était due à l'apparition d'états métastables de durée de vie infinie. Ces états correspondent à un minimum secondaire du pseudo-potentiel apparaissant à grand recouvrement. Par construction, ces états sont caractérisés par $q_1(x)$. Tant que la solution à grand recouvrement existe, il y a des états métastables. On peut ainsi définir la longueur dynamique l_d comme étant la plus grande longueur telle que la solution $q_1(x)$ existe.

La transition statique apparaît lorsque l'énergie libre de la solution de haut recouvrement $q_1(x)$ devient supérieure à celle de la solution de bas recouvrement $q_0(x)$. Cela donne un critère pour définir une longueur statique : il s'agit de la plus petite longueur pour laquelle la condition précédente soit vérifiée.

Le résultat de l'étude des solutions de l'équations d'Euler-Lagrange est résumée à la figure 4.1. On constate : 1. $G(l)$ est sensible à la longueur dynamique : $G(\infty) \neq 0$ à T_d , 2. que $l_d \sim |T - T_d|^{-1/4}$ comme prédit par la MCT, 3. $l_s \sim |T - T_s|^{-1}$ ce qui conduit à $\theta = d - 1$, contrairement à l'argument KTW (voir chapitre 1).

1.3 Approche TAP.

Fonctionnelle TAP

L'utilisation de la méthode des répliques repose sur le paramétrage (4.15) qui est loin d'être évident. Une façon alternative d'arriver à ces résultats serait d'étudier la fonctionnelle

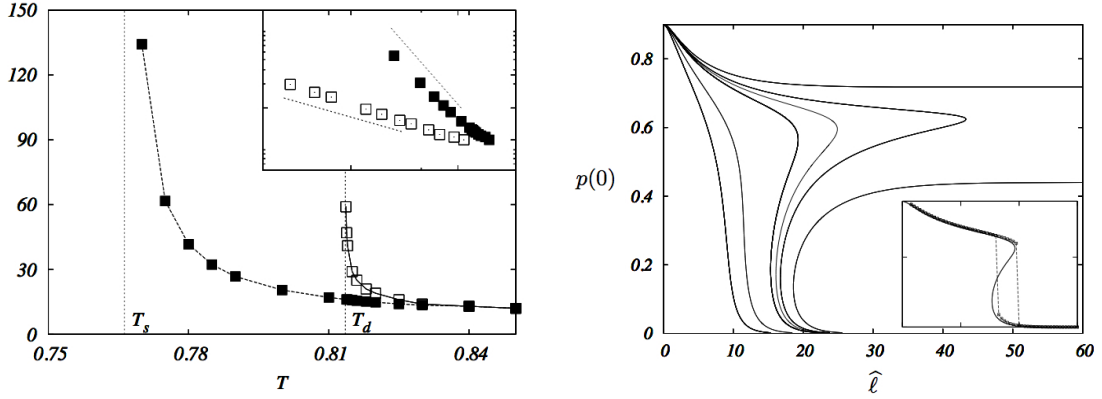


FIGURE 4.1 – Modèle à p spins de dimension finie. *A gauche* : Evolution des longueurs dynamique l_d (carrés blancs) et statique l_s (carrés pleins) représentées en unités de γ . L'encart représente un tracé en échelles logarithmiques de l_d comme fonction $|T - T_d|$ et de l_s en fonction de $|T - T_s|$, les lignes droites ont respectivement les pentes -1 et $-1/4$. *A droite* : $G(\gamma l) = p(0)$ en fonction de la température. On note qu'un plateau se développe quand $T \rightarrow T_d^+$. Extrait de [76]

TAP. Par ailleurs, la discussion des solutions des équations d'Euler-Lagrange présuppose l'existence d'une certaine structure des états métastables. Il serait utile de pouvoir avoir directement accès à ceux-ci, ce que seule l'approche TAP permet d'obtenir de manière fiable.

Rappelons que la fonctionnelle TAP est définie par :

$$-\beta\Gamma(\beta, m_i, h_i, \lambda_B) = \ln \text{Tr} \exp \left(-\beta\mathcal{H}(S) - \sum_{i=1}^N h_i(S_i - m_i) - \sum_B \lambda_B \sum_{i \in B} S_i^2 - N_B \right) \quad (4.17)$$

Les champs h_i sont choisis de telle sorte que : $m_i = \langle S_i \rangle$, les paramètres λ_B imposent les contraintes sphériques locales : $\sum_{i \in B} S_i^2 = N_B$.

Dans la limite de Kač, c'est-à-dire quand $N \rightarrow \infty$ puis $\gamma \rightarrow 0$, Γ peut se calculer par un développement haute-température [83]. En effet, le développement fait apparaître des termes du type :

$$\sum_{ijkl\dots} J_{ij} J_{jk} J_{kl} \dots \quad (4.18)$$

Dans ces sommes, une fois fixé le site i , il n'y a que de l'ordre γ^d sites où les couplages ont une valeur non-nulle (par définition du modèle). Les termes du développement survivants à la limite de Kač sont ceux représentés à la figure 4.2. Les termes contribuant sont d'ailleurs les mêmes que ceux du modèle complètement connecté.

En introduisant la notation $\Phi_{ik} = \gamma^d \phi(\gamma|i - k|)$, la fonctionnelle TAP est alors donnée

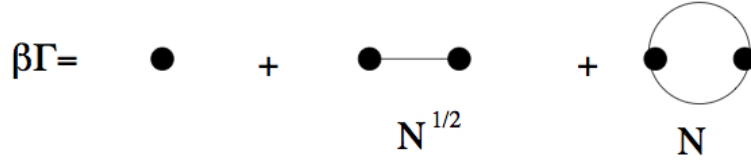


FIGURE 4.2 – Diagrammes contribuant à la fonctionnelle TAP dans la limite de Kač (ici $p=2$). Chaque ligne représente le propagateur βJ_{ij} , les vertex portant comme sources les aimantations m_i .

par :

$$\begin{aligned}
 -\beta\Gamma &= \frac{N_B}{2} \sum_B \ln \left(1 - \frac{1}{l^d} \sum_{i \in B} m_i^2 \right) + \beta \sum_{i_1 \dots i_p} J_{i_1 \dots i_p} m_{i_1} \dots m_{i_p} \\
 &+ \beta^2 \gamma^{-d} \sum_{k=1}^N \left[\left(\sum_{i=1}^N \Phi_{ik} < S_i^2 >_0 \right)^p + (p-1) \left(\sum_{i=1}^N \Phi_{ik} m_i^2 \right)^p \right. \\
 &\left. - p \left(\sum_{i=1}^N \Phi_{ik} m_i^2 \right)^{p-1} \sum_{i=1}^N \Phi_{ik} < S_i^2 >_0 \right] \quad (4.19)
 \end{aligned}$$

où $< . >_0$ désigne la valeur moyenne canonique prise à température nulle. En introduisant le recouvrement local :

$$q_B = \frac{1}{N_B} \sum_{i \in B} m_i^2 \rightarrow q(x) \quad \text{dans la limite continue} \quad (4.20)$$

et, en effectuant le changement de variable : $m_i = \sqrt{q_B} \sigma_i$, la fonctionnelle TAP se récrit dans la limite continue :

$$\begin{aligned}
 -\beta\Gamma(q(x), E(x), \beta) &= \frac{1}{2} \int d^d x \ln(1 - q(x)) - \beta \int d^d x q(x)^{1/2} E(x) \\
 &+ \frac{\beta^2}{4} \int d^d x 1 + (p-1)(q * \phi)^p(x) - p(q * \phi)^{p-1} \quad (4.21)
 \end{aligned}$$

où $E(x)$ est la limite continue de :

$$E_B = q_B^{1/2} \sum_i \sigma_i \sum_{i_2 \dots i_p} (q_{B_2} \dots q_{B_p})^{1/2} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p} \quad (4.22)$$

Lien avec les répliques

Le lien avec les calculs de répliques (pseudo-potentiel,...) [74] permet de mettre en lumière quelques difficultés dans l'analyse des états métastables de ce modèle.

L'action effective de ce modèle est donnée par :

$$S(m) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \overline{Z^{nm}} \quad (4.23)$$

Le paramétrage le plus simple est donné par une matrice à un pas de brisure où, en reprenant les notations de (4.15) $q_0(x) = p(x) = 0$, $r = 1$ et $q_1(x) = q(x)$. Dans la limite $m \rightarrow 1$,

$$S(q) = \frac{\beta^2}{4} (m-1) \int d^d x (q * \phi)^p(x) + \frac{(m-1)}{2} q(y) + \ln(1 - q(y)) + \mathcal{O}((1-m)^2) \quad (4.24)$$

La solution d'équilibre pour $q(x)$ est déterminée par la condition de stationnarité de l'action $S(q)$ par rapport à $q(x)$:

$$\frac{q(y)}{1 - q(y)} = \frac{\beta^2 p}{2} \int d^d x (q * \phi)^{p-1}(x) \phi(\gamma|x - y|) \quad (4.25)$$

Dans le cas où $q(x)$ est spatialement uniforme, on retrouve la solution du modèle à p spins complètement connecté :

$$\frac{q}{1 - q} = \frac{\beta^2 p}{2} q^{p-1} \quad (4.26)$$

Dans le cas complètement connecté, on peut retrouver cette dernière équation à partir des équations TAP en fixant la valeur de l'énergie des états TAP à sa valeur d'équilibre, c'est-à-dire en imposant la condition [57] :

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \beta \Gamma(E, \beta) = \langle E \rangle = -\frac{\beta}{2} \quad (4.27)$$

En effectuant le même calcul avec l'expression (4.21) de la fonctionnelle TAP, on est conduit à :

$$\int d^d y \frac{q(y)}{1 - q(y)} = \frac{\beta^2 p}{2} \int d^d y (q * \phi)^{p-1}(y) \quad (4.28)$$

qui est exactement la forme intégrée de (4.25). Plus surprenant encore, il semble également que l'introduction d'une température dépendante de l'espace ne permette pas de résoudre cette difficulté. Le lien exact entre approche TAP et théorie des répliques reste encore à préciser dans ce modèle, et par voie de conséquence la structure exacte des états métastables.

2 Modèles de patches.

L'étude analytique du modèle à p spins de dimension finie ouvre plusieurs questions. La première est que sa dynamique reste encore à étudier en détail. Retrouve-t-on toujours une relaxation en deux temps ? Quel est le comportement des susceptibilités dynamiques $(\chi_4(t), \dots)$? Par ailleurs, les résultats obtenus reposent sur des excitations compactes à géométries radiales, cette hypothèse est-elle vérifiée ?

Cela amène à rechercher un modèle appartenant à la même classe, mais que l'on puisse simuler numériquement. Par modèle de la même classe, on entend ici :

1. un modèle dont la limite de champ moyen a une transition de type 1 – *RSB*, et dont la solution coïncide dans la limite de Kač homogène avec les résultats de champ moyen.
2. un modèle qui en dimension finie et au moins en dimension 3 ait une phénoménologie semblable à celle des systèmes 1 – *RSB*.

La bonne séparation entre température dynamique et statique du ROM en fait un candidat de choix.

Il est bien connu que les modèles 1-RSB ont tendance une fois adaptés en dimension finie à perdre leur transition discontinue, et de changer de classe en suivant une physique comparable à celle du modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK) [71]. Nous allons montrer comment procéder dans le cas du ROM. L'idée maîtresse repose sur la mise en œuvre d'une contrainte orthogonale locale. Dans une première section, nous montrons comment

l'utilisation naïve des interactions de Kač (ou d'interactions proches voisins) conduit à un modèle à transition continue comme SK. Dans une deuxième section, nous définissons le modèle de dimension finie. La limite homogène (champ-moyen) permet de fixer les paramètres du modèle. Enfin, dans la dernière section nous faisons le lien entre ce modèle et sa version sphérique afin de clarifier la limite de champ-moyen.

2.1 Approche naïve.

Le choix le plus simple pour introduire des interactions de Kač est de prendre une matrice de couplage K définie par :

$$K_{ij} = J_{ij} \gamma^d \phi(\gamma|i-j|) \quad (4.29)$$

où J est une matrice de couplage ROM, et $\phi(x)$ une fonction à décroissance rapide. Dans la limite de Kač, il faut prendre d'abord la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$). La fonction de partition répliquée s'écrit :

$$\overline{Z^n} = \sum_{S_i^a} \exp \left[\frac{N}{2} \text{Tr} G \left(\frac{\beta}{N} \Phi_{ij} S_i^a S_j^a \right) \right] \quad (4.30)$$

avec $G(x)$ donnée par (2.8), et $\Phi_{ij} = \gamma^d \phi(\gamma|i-j|)$. Contrairement au cas de champ moyen, les répliques sont spatialement couplées entre elles.

Solution uniforme.

Considérons une solution où les répliques sont spatialement uniformes. Dans ce cas :

$$\text{Tr} G \left(\frac{\beta}{N} \Phi_{ij} S_i^a S_j^a \right) = \sum_k c_k \text{Tr} \Phi^k \text{Tr} Q^k \quad (4.31)$$

avec :

$$Q_{ab} \equiv \frac{1}{N} \sum_i S_i^a S_i^b \quad (4.32)$$

En introduisant $\tilde{\Phi}(u) = \int dx \Phi(x) e^{iux}$,

$$\text{Tr} G \left(\frac{\beta}{N} \Phi_{ij} S_i^a S_j^a \right) = \int \frac{du}{2\pi} \text{Tr} G \left(\beta \gamma^d \tilde{\Phi} \left[\frac{u}{\gamma} \right] Q \right) \quad (4.33)$$

ce qui dans la limite $\gamma \rightarrow 0$ ne redonne pas le résultat de champ moyen, *i.e.* le ROM. Le modèle est mal défini.

Approche TAP

L'analyse de la dérivation des équations TAP du ROM [142] indique que l'utilisation d'interaction de Kač prise sous la forme (4.29) conduirait à un modèle à brisure complète de la symétrie des répliques ($\infty - RSB$). En effet, l'énergie libre peut s'écrire grâce à une transformation inverse de Hubbard :

$$e^{-\beta F} = 2^N \sqrt{\det \beta K} \prod_i \frac{\psi_i}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2\beta} \sum_{ij} \psi_i K_{ij}^{-1} \psi_j + \sum_i \ln \cosh(\psi_i + h_i) \right) \quad (4.34)$$

Le développement de haute température peut se calculer dans plusieurs cas. Deux cas sont à distinguer : i) soit les couplages K_{ij} sont des variables aléatoires indépendantes, auquel

cas on peut utiliser des propriétés comme l'auto-moyennage de la variance pour limiter le nombre de termes du développement (voir dans la section précédente l'exemple du modèle à p spins), ii) soit les couplages ne sont pas des variables indépendantes comme c'est le cas du ROM, auquel cas, il faut véritablement resommer le développement haute-température de l'énergie libre.

En prenant les couplages donnés par (4.29), suivant la valeur de γ , on bascule du cas i) au cas ii). Quand γ est strictement nul, la matrice de couplage est celle du ROM. En revanche, quand γ est petit mais fini, le modèle de référence devient le modèle à 2 spins, *i.e.* le modèle de Sherrington-Kirkpatrick, dont la physique est différente (la transition est continue, $T_d = T_s$). Pour voir cela simplement, prenons une fonction $\phi(x)$ en marche d'escalier : $\phi(\gamma x) = 0$ si $x > \gamma^{-1}$ et γ^{-d} sinon. Quand $\gamma^{-d} = N/2$ par exemple, les K_{ij} ne "sentent" plus la contrainte orthogonale du ROM ($^tKK \neq 1$) et sont essentiellement indépendants. On peut alors tronquer le développement haute-température de F , ce qui revient peu ou prou à prendre les premiers termes du développement à β nul de la fonction G du ROM : on retrouve SK . En prenant la limite $\gamma \rightarrow 0$, on bascule ainsi d'un modèle dont la physique est proche de celle de SK à un modèle $1 - RSB$. Qualitativement, le modèle de dimension finie ne ressemblera pas à celui de champ moyen.

2.2 Définition.

Ce que montre l'utilisation naïve des interactions de Kač, c'est qu'il faut garder une trace de la contrainte orthogonale. Une façon de procéder est de transformer cette contrainte globale en une contrainte locale.

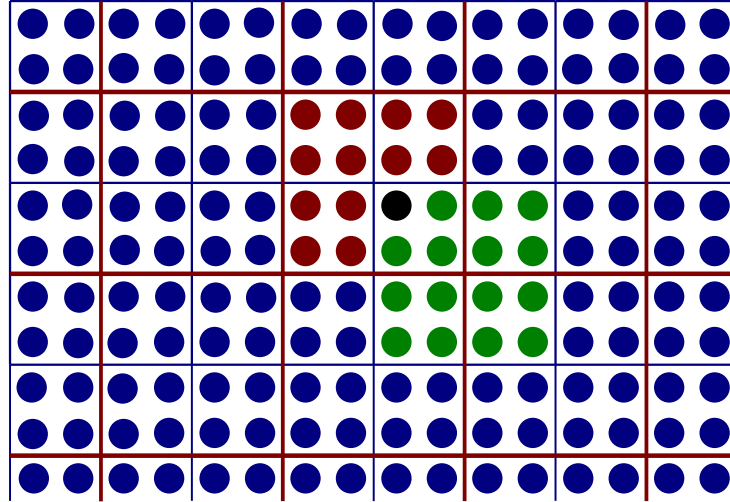


FIGURE 4.3 – Définition du modèle LORM, $d = 2$ et $\gamma^{-1} = 4$. Le spin central (en noir) est couplé à deux patches (spins verts et rouge). On note l'existence de deux réseaux de cubes (cubes ayant des côtés rouge et cubes ayant des côtés bleus.)

Plus précisément, le système est divisé en cubes élémentaires de taille γ^{-1} . Au sein de chacun de ces cubes, les γ^{-d} spins sont couplés entre eux par une matrice de couplage ROM de taille $\gamma^{-d} \times \gamma^{-d}$. Le système est à nouveau divisé en cubes élémentaires décalés de $\gamma^{-d}/2$ pas de réseau suivant chacune des directions. Un spin est couplé à tous les spins qui partagent un cube avec lui (voir figure 4.8). Dans le cas du modèle à p spins, cette construction serait identique à prendre les couplages sous la forme (4.29).

Le modèle LORM (*locally orthogonal random matrices*) est défini par :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2K} \sum_{\kappa=1}^K \sum_{C^\kappa} \sum_{(ij) \in C^\kappa} J_{ij}^{(\kappa)} S_i S_j \quad (4.35)$$

où les spins S_i sont des spins d'Ising égaux à ± 1 , les C^κ désignent les cubes de taille γ^{-d} pavant le réseau d'indice κ (dans le cas qui nous intéresse, il y a deux réseaux différents : $K = 2$). Chaque matrice $J^{(\kappa)}$ est une matrice ROM de taille $\gamma^{-d} \times \gamma^{-d}$, indépendamment tirée. La constante K est absorbée en mesurant la température en unité de K . La fonction de partition répliquée s'écrit :

$$\overline{Z^n} = \sum_{\{S_i^a\}} \exp \left(\frac{1}{2\gamma^d} \sum_{\kappa} \text{Tr} G(\beta Q_{ab}(C^\kappa)) \right) \quad (4.36)$$

$$Q_{ab}(C^\kappa) = \frac{1}{\gamma^d} \sum_{i \in C^\kappa} S_i^a S_i^b \quad (4.37)$$

En introduisant, les boules $B \equiv C^\kappa \cap C^{\kappa'}$, la fonction de partition devient :

$$\overline{Z^n} = \sum_{\{S_i^a\}} \exp \left[\frac{1}{2\gamma^d} \sum_B \sum_{\kappa, C^\kappa \supset B} \text{Tr} G \left(\frac{\beta}{2^{d-1}} \sum_{B \subset C^\kappa} q_{ab}(B) \right) \right] \quad (4.38)$$

$$q_{ab}(B) = \frac{1}{2\gamma^d} \sum_{i \in B} S_i^a S_i^b \quad (4.39)$$

Version continue.

En introduisant :

$$\begin{aligned} 1 &= \int \prod \mathcal{D}q_{ab}(B) \delta \left(\frac{1}{2\gamma^d} q_{ab}(B) - \sum_{i \in B} S_i^a S_i^b \right) \\ &= \int \prod \mathcal{D}q_{ab}(B) \mathcal{D}\Lambda_{ab}(B) \exp \left(\frac{1}{2\gamma^d} \sum_{ab} \Lambda_{ab} q_{ab} - \sum_{ab} \sum_{i \in B} S_i^a \Lambda_{ab} S_i^b \right) \end{aligned} \quad (4.40)$$

La fonction de partition répliquée (4.38) s'exprime :

$$\begin{aligned} \overline{Z^n} &= \int \prod \mathcal{D}q_{ab}(B) \mathcal{D}\Lambda_{ab}(B) \exp \left[\frac{1}{2\gamma^d} \sum_B \sum_{\kappa, C^\kappa \supset B} \text{Tr} G \left(\frac{\beta}{2^{d-1}} \sum_{B \subset C^\kappa} q_{ab}(B) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\gamma^d} \sum_B \sum_{ab} \Lambda_{ab} q_{ab} + \sum_B \ln \left(\sum_{\{S_i^a\}} e^{-\sum_{ab} \sum_{i \in B} S_i^a \Lambda_{ab} S_i^b} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.41)$$

Dans sa version continue, en faisant tendre le pas du réseau à zéro :

$$\begin{aligned} \overline{Z^n} &= \int \prod \mathcal{D}q_{ab}(x) \mathcal{D}\Lambda_{ab}(x) \exp \left[\frac{K}{2\gamma^d} \int d^d x \text{Tr} G \left(\beta \int d^d y q_{ab}(y) \phi(\gamma|x-y) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\gamma^d} \int d^d x \sum_{ab} \Lambda_{ab}(x) q_{ab}(x) + \frac{1}{2\gamma^d} \int d^d x \ln \Omega(q_{ab}(x), \Lambda_{ab}(x)) \right] \end{aligned} \quad (4.42)$$

où $\Omega(q_{ab}(x), \Lambda_{ab}(x))$ est le terme d'entropie que l'on calculerait dans le modèle de champ moyen, dans le cas du modèle sphérique, en prenant le point col sur les Λ_{ab} , il donnerait un terme en $\text{Tr} \ln q(x)$. $\phi(x)$ est une fonction à décroissance rapide, il s'agit de la limite

continue de $\sum_{B \subset C^\kappa} 1$. Ce résultat est similaire à celui du modèle à p spins de dimension finie (voir l'équation (8) de [74]).

Cette expression montre que si l'on prend la limite de Kač, le modèle de champ moyen de référence (*i.e.* la solution indépendante de l'espace) est la somme de K ROM : $L_{ij} = J_{ij}^1 + \dots + J_{ij}^K$. A la différence du modèle à p spins où la somme de K modèles à p spins est encore un modèle à p spins, un tel résultat n'est pas évident pour le ROM.

Solution spatialement homogène : pseudo-potentiel.

La solution homogène, qui correspond au champ moyen, doit présenter une transition 1-RSB, caractérisée par l'existence de deux températures distinctes T_d et T_s . Nous avons vu dans le chapitre 1 (voir l'annexe A) que la forme du pseudo-potentiel $V(q)$ permettait de caractériser complètement cette transition : 1. lorsqu'on abaisse la température, T_d est la température pour laquelle un point d'inflexion apparaît à $q \neq 0$, 2. T_s est la température pour laquelle l'énergie libre du minimum secondaire $q_d > 0$ devient supérieure à celle du minimum $q = 0$, 3. pour $T > T_s$, la complexité est donnée par la différence d'énergie-libre entre les deux minima.

Pour ce faire, donnons-nous un paramétrage à un pas de brisure de la matrice des répliques $q_{ab}(x)$ caractérisé par $q_0(x) = 0$, $q_1(x) = q$ et $m(x) = m$, q et m étant indépendants de l'espace. Dans la limite $n \rightarrow 0$, l'énergie libre par spin s'écrit :

$$-\beta f(m, q) = K \frac{m-1}{m} G(\beta(1-q)) + \frac{K}{m} G(\beta(1+(m-1)q)) - \frac{1}{2}(1+(m-1)q)\Lambda + \frac{1}{m} \ln \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \cosh^m(\sqrt{2\Lambda}z) \right) \quad (4.43)$$

$$\Lambda = -\frac{K\beta}{m} \left(G'(\beta(1-q)) - G'(\beta(1+(m-1)q)) \right) \quad (4.44)$$

Le pseudo-potentiel s'obtient en développant l'énergie libre autour de $m = 1$:

$$-\beta f(m, q) = -\beta f(m=1, q) + (m-1)V(q) + O(1-m)^2 \quad (4.45)$$

D'où l'on tire :

$$V(q) = -K[G(\beta(1-q)) - G(\beta) + \beta q G'(\beta)] - \frac{1+q}{2} \lambda - e^{-\frac{\lambda}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \cosh(\sqrt{2\lambda}z) \ln \cosh(\sqrt{2\lambda}z) \quad (4.46)$$

$$\lambda = K\beta[G'(\beta) - G'(\beta(1-q))] \quad (4.47)$$

Le pseudo-potentiel $V(q)$ est tracé en fonction de la température sur les figures (4.4) et (4.5), dans le cas où la fonction G est celle du ROM standard ($t = \text{Tr} J = 0$, voir l'équation (2.8)). Si la somme de deux matrices de couplage ROM donne encore un modèle présentant une transition discontinue de type 1-RSB (existence de deux températures distinctes T_d et T_s , complexité non-nulle), la somme de trois, quatre ou plus ROM donne un modèle connaissant une transition continue, où la complexité reste nulle.

On peut étudier l'influence d'un paramètre t non-nul sur le diagramme de phase dans le cas $K = 2$ (voir la fig 4.4). Comme dans le ROM, les deux températures sont fonction de t , et leur séparation tend à augmenter avec la valeur de t . Néanmoins, la séparation est moins nette que dans le ROM. Ce modèle est moins discontinu. On constate également que la complexité est (légèrement) plus faible que dans le ROM.

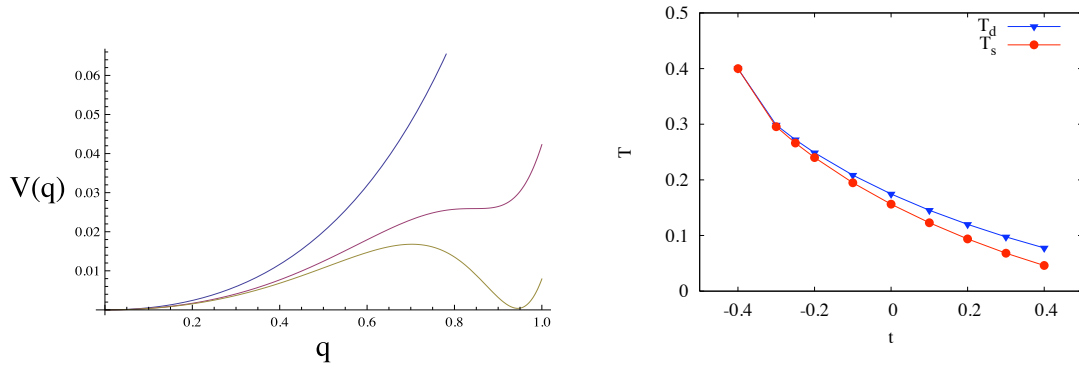


FIGURE 4.4 – *A gauche* : Le pseudo-potentiel $V(q)$ en fonction de la température pour la somme de $K = 2$ matrices de couplage ROM standard ($t = \text{Tr}J = 0$). $V(q)$ a la forme d'un potentiel du premier ordre signalant une transition 1-RSB. Un point d'inflexion apparaît à $T_d = 0.17451\dots$. L'énergie libre de ce minimum secondaire devient supérieure à celle du minimum $q = 0$ à $T_s = 0.15625\dots$. *A droite* : Evolution des températures dynamiques (T_d) et statiques (T_s) en fonction de la valeur du paramètre $t = \text{Tr}J$, $K = 2$.

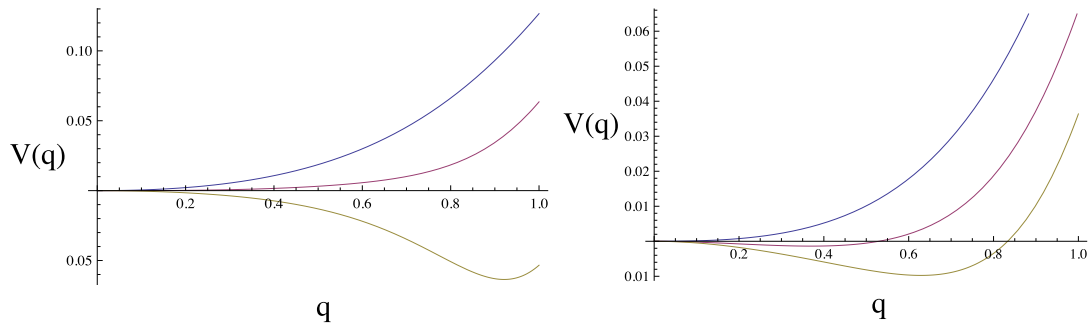


FIGURE 4.5 – Le pseudo-potentiel $V(q)$ en fonction de la température pour la somme de $K = 3$ (à gauche) et $K = 4$ (à droite) matrices de couplage ROM standard ($t = 0$). $V(q)$ a la forme d'un potentiel du second ordre. Il s'agit là d'une transition continue.

2.3 Lien avec les modèles sphériques.

Comme on l'a vu au chapitre 2, il est possible de caractériser le type de brisure de symétrie des répliques en étudiant la distribution des valeurs propres de la matrice de couplage [49]. En adaptant les équations (2.32) et (2.33) à la somme de K matrices ROM, et en posant $\beta = 1$, on peut écrire :

$$KG'(z) = \mu(z) - \frac{1}{z} \quad (4.48)$$

$$z = \int \frac{1}{\mu - \lambda} \rho(\lambda) d\lambda \quad (4.49)$$

G' étant explicitement donnée par (2.8) :

$$G'(z) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4z(t+z)}}{2z} \quad (4.50)$$

De (4.49), par le prolongement dans le plan complexe $\mu = \lambda - i\epsilon$, il vient que :

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Im z(\lambda - i\epsilon) \quad (4.51)$$

où $z(\mu)$ est solution de (4.48).

K quelconque et $t = 0$

Par souci de simplicité, commençons par les cas $t = 0$, l'inversion de (4.48) conduit à :

$$z_{\pm}(\tilde{\mu}) = \frac{1}{2} \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\mu}^2 - 1} \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\tilde{\mu}^2 - \Lambda^2}}{\tilde{\mu}^2 - 1} - \frac{1}{K} \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\mu}^2 - 1} \quad \text{si } |\tilde{\mu}| \geq \frac{2\sqrt{K-1}}{K} \quad (4.52)$$

$$(4.53)$$

$$z_{\pm}(\tilde{\mu}) = \frac{1}{2} \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\mu}^2 - 1} \pm i \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\Lambda^2 - \tilde{\mu}^2}}{\tilde{\mu}^2 - 1} - \frac{1}{K} \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\mu}^2 - 1} \quad \text{si } |\tilde{\mu}| \leq \frac{2\sqrt{K-1}}{K} \quad (4.54)$$

où $\tilde{\mu} = \mu/K$ et $\Lambda^2 = 4(K-1)/K$. L'étude des solutions varie suivant les valeurs de K . En écrivant $\tilde{\mu} = \lambda - i\epsilon$, une étude soignée de la limite $\epsilon \rightarrow 0$ montre que :

$$1. \text{ Pour } K = 1 : \quad \rho(\lambda) = \frac{1}{2} \left(\delta(\lambda - 1) + \delta(\lambda + 1) \right) \quad (4.55)$$

$$2. \text{ Pour } K = \infty : \quad \rho(\lambda) = \frac{1}{2} \left(\delta(\lambda - 1) + \delta(\lambda + 1) \right) \quad (4.56)$$

$$3. \text{ Pour } K = 2 : \quad \rho(\lambda) = \frac{1}{\pi \sqrt{\lambda^2 - 1}} \quad \text{pour } \lambda \in [-1 : 1] \quad (4.57)$$

$$4. \text{ Pour } 3 \leq K < \infty : \quad \rho(\lambda) \propto \frac{\sqrt{\Lambda^2 - \lambda^2}}{2K(\lambda^2 - 1)} \quad \text{pour } \lambda \in [-\Lambda : \Lambda] \quad (4.58)$$

Une vérification numérique de ces résultats est présentée à la figure 4.6. On notera l'excellent accord entre la prédiction analytique et la diagonalisation directe des matrices.

Dans le cas des modèles sphériques, s'il existe une transition continue, la température critique vérifie :

$$\int \frac{\rho(\lambda) d\lambda}{\lambda_M - \lambda} = \frac{1}{T_c} \quad (4.59)$$

où λ_M est le maximum des valeurs propres. Cette condition impose que pour $K = 1$, $K = 2$ et $K = \infty$, la température critique est nulle. On s'attend à une transition discontinue. En revanche, pour $3 \leq K < \infty$, T_c est non-nul, on s'attend à une transition continue.

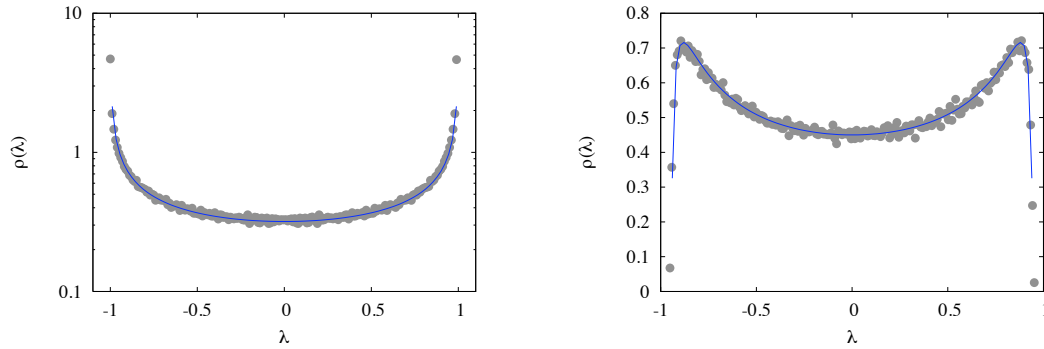


FIGURE 4.6 – Densité de valeurs propres de la somme de K matrices ROM standard ($t = 0$). *A gauche* : $K = 2$, comparaison entre la prédiction analytique et la diagonalisation de 500 matrices de taille 200×200 . *A droite* : De même que précédemment pour $K = 3$.

$K = 2$ et t arbitraire

L'existence d'une trace non-nulle des matrices ROM a une influence sur la distribution des valeurs propres. On peut facilement montrer que dans le cas $K = 2$, celle-ci est désormais donnée par :

$$\rho(\lambda) = \begin{cases} \frac{|t|}{2} \delta(\lambda - \text{sign}(t)) & \text{si } |\lambda| > \sqrt{1 - t^2} \\ \frac{\sqrt{\lambda^2 - 1 + t^2}}{\pi(1 - \lambda^2)} & \text{si } |\lambda| < \sqrt{1 - t^2} \end{cases} \quad (4.60)$$

L'introduction d'une trace non-nulle fait apparaître un pic en ± 1 . La distribution de valeurs propres devient asymétrique, ce qui est pour le moins surprenant.

3 Simulations numériques en dimension $d = 3$: thermodynamique

3.1 Paramètres de simulation

Pour simuler le modèle LORM, nous avons utilisé des matrices ROM de trace nulle. Plusieurs raisons mènent à ce choix : 1. La physique du champ moyen est bien contrôlée : quelle serait la physique dépeinte par une distribution asymétrique ? 2. On conserve une séparation entre températures dynamique et statique acceptable, ainsi que des échelles de températures proches de celle du ROM que nous avons précédemment étudié. Nous avons donc étudié :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{4} \sum_{\kappa, C^\kappa} \sum_{(i,j) \in C^\kappa} J_{ij}^\kappa S_i S_j \quad (4.61)$$

$$\forall \kappa \quad \text{Tr} J^\kappa = 0 \quad (4.62)$$

Dans ces normalisations, dans la limite homogène, $T_s = 0.15625...$ et $T_d = 0.17451...$

Nous avons utilisé une variante de dimension finie du programme de simulation du ROM mettant en œuvre l'algorithme *parallel tempering*. Dans chaque cas nous avons pris des conditions aux bords périodiques. Nous avons effectué plusieurs jeux de simulation :

1. $\gamma^{-1} = 2$. Il s'agit là du modèle minimal : les matrices ROM formant les cubes de base sont de taille $2^3 \times 2^3$, les intersections non-nulles entre deux cubes de base sont de taille 1. Nous avons étudié des systèmes de taille $N = 4^3 = (2\gamma^{-1})^3$ pour 96 réalisations du désordre et $N = 8^3 = (4\gamma^{-1})^3$ pour 250 réalisations du désordre. Le plus petit système a été thermalisé en utilisant un jeu de 25 températures régulièrement espacées entre $T = 0.05$ et $T = 0.29$ et $5 \cdot 10^5$ itérations de *parallel tempering*, le plus grand système en utilisant un jeu de 35 températures comprises entre $T = 0.01$ et $T = 0.282$ et $2 \cdot 10^6$ itérations de *parallel tempering*.
2. $\gamma^{-1} = 4$. Nous avons simulé des systèmes de taille $N = 8^3 = (2\gamma^{-1})^3$, $12^3 = (3\gamma^{-1})^3$ et $16^3 = (4\gamma^{-1})^3$ pour 96 réalisations du désordre. Nous avons d'abord simulé le plus petit système en utilisant 35 températures régulièrement espacées entre $T = 0.01$ et $T = 0.282$ et $25 \cdot 10^6$ itérations de *parallel tempering*. Nous avons ensuite simulé toutes les tailles en utilisant un jeu de 15 températures comprises entre $T = 0.175 > T_d$ et $T = 0.315$, et $15 \cdot 10^6$ itérations de *parallel tempering*.

Dans chaque cas, comme pour le ROM (voir chapitre 2), la thermalisation des systèmes est vérifiée par la mesure des violations du théorème de fluctuation-dissipation liant les fluctuations de l'énergie interne à la chaleur spécifique en utilisant le rapport défini à l'équation (2.43)

3.2 LORM, $d = 3$ et $\gamma = 1/2$

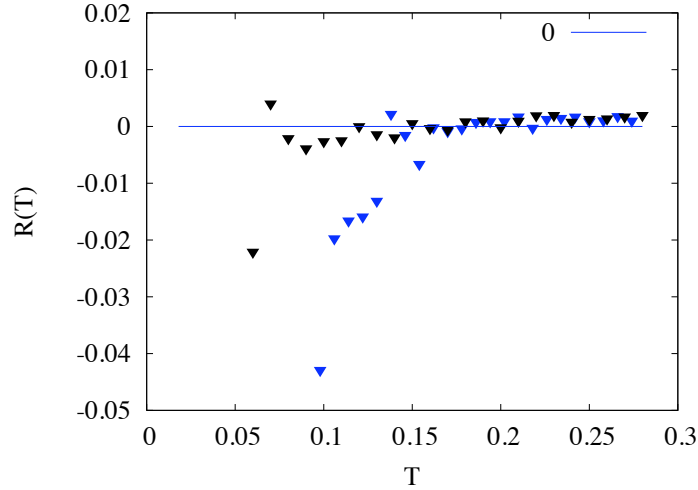


FIGURE 4.7 – Rapport de fluctuation-dissipation $R(T)$ en fonction de la température pour $\gamma^{-1} = 2$, $N = 4^3$ (en bleu) et $N = 8^3$ (en noir). Les deux tailles sont raisonnablement échantillonnées. Le plus petit système disposant d'une moindre statistique thermique et de désordre présente une plus grande variabilité.

La figure 4.8 montre les données obtenues pour le rapport de fluctuation-dissipation $R(T)$. On constate que les différentes tailles sont bien thermalisées même pour des températures inférieures à T_s . Le *parallel tempering* s'avère ici plus efficace que dans le cas du ROM puisqu'il s'était révélé impossible d'équilibrer des systèmes dépassant $N = 128$. Il n'est pas très surprenant qu'un modèle de dimension finie soit plus aisé à simuler que sa

contre-partie complètement connectée. Par exemple, dans le régime de dynamique activée, les barrières à franchir n'ont plus pour échelle N mais une longueur de cohérence ξ (par exemple le rayon de nucléation dans une transition du premier ordre).

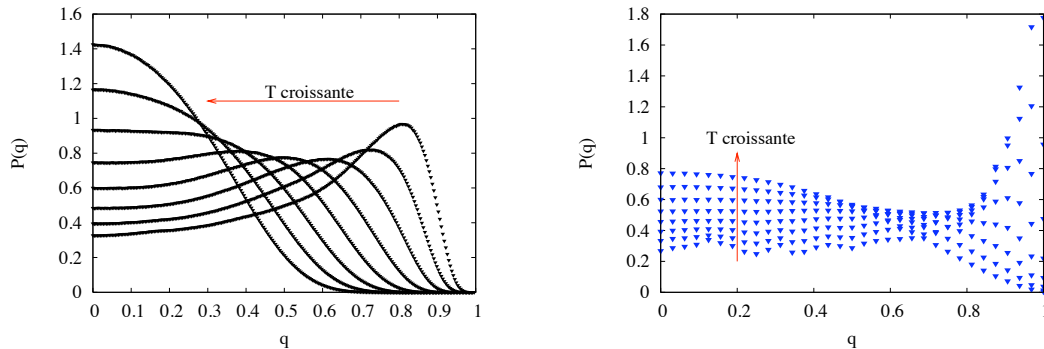


FIGURE 4.8 – *A gauche* : $P(q)$ pour $N = 8^3$ et T comprise entre 0.13 et 0.242. La forme de $P(q)$ est clairement celle d'un système à brisure continue de la symétrie de permutation des répliques (∞ -RSB). *A droite* : De même que précédemment pour $N = 4^3$.

Pour déterminer l'ordre de la transition, il faut étudier la distribution $P(q)$. Sa forme permet de discriminer une transition continue d'une transition discontinue, un paramétrage à un pas de brisure (1-RSB), d'un paramétrage complètement brisé (∞ -RSB). Les données sont rassemblées à la figure 4.8. Pour chacune des tailles, la forme de $P(q)$ est incompatible avec celle d'un paramétrage 1-RSB. Elle montre une transition continue : en abaissant la température, le pic centré autour de $q = 0$ s'aplatit progressivement, puis un seul pic à $q_{EA} \neq 0$ se développe. En outre, la forme de l'enveloppe centrale et l'asymétrie du pic à q_{EA} sont tout-à-fait comparables à celles observées dans le modèle de Sherrington-Kirpatrick, connu pour exhiber une transition ∞ -RSB.

Dans le cas d'une transition ∞ -RSB, la température de transition peut se déterminer grâce au cumulant de Binder $B(T)$ (voir l'équation (2.58) pour une définition) [16, 18]. La forme de celui-ci dans ce cas est telle qu'en traçant $B(T)$ pour chaque taille N , les courbes se croisent toutes à $T = T_c$. La figure 4.9 montre que $T_c \simeq 0.21 > T_d$. Cela montre que la solution à un pas de brisure n'existe pas dans ce cas.

Cependant, il ne faut pas oublier que les cubes de base ont une taille très restreinte. Les effets de taille finie pour un système ROM de taille $N = 8$ sont prépondérants. Or, l'ensemble de la description repose sur le fait que les cubes de base sont très proches de la description du ROM valable pour $N \rightarrow \infty$.

3.3 LORM, $d = 3$ et $\gamma = 1/4$

Dans un premier temps, nous avons mené une étude strictement identique pour $\gamma^{-1} = 4$ et $N = 8^3$ dans un domaine de températures compris entre $T = 0.01$ et $T = 0.282$. Les résultats de cette simulation sont rassemblés à la figure 4.10.

On constate tout d'abord que l'équilibration est bien plus difficile. Au bout de 25×10^6 itérations, les systèmes considérés sont toujours mal équilibrés pour $T < T_d$ ($R(T) \sim 1\%$) et franchement hors d'équilibre pour $T < T_s$. Comme dans le ROM, le *parallel tempering* est d'une modeste efficacité. La figure 4.10 montre une distribution $P(q)$ révélatrice d'une transition 1-RSB, fortement discontinue. En abaissant la température, il apparaît un pic

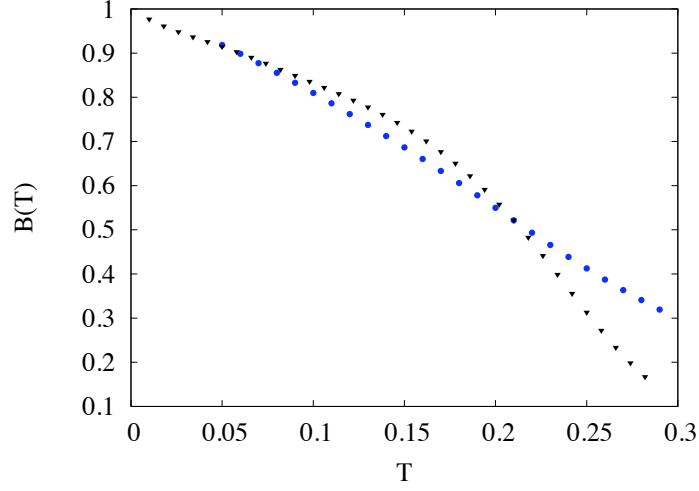


FIGURE 4.9 – Cumulant de Binder $B(T)$ pour $N = 4^3$ (en bleu) et $N = 8^3$ (en noir). Les courbes se croisent en $T_c \simeq 0.21$.

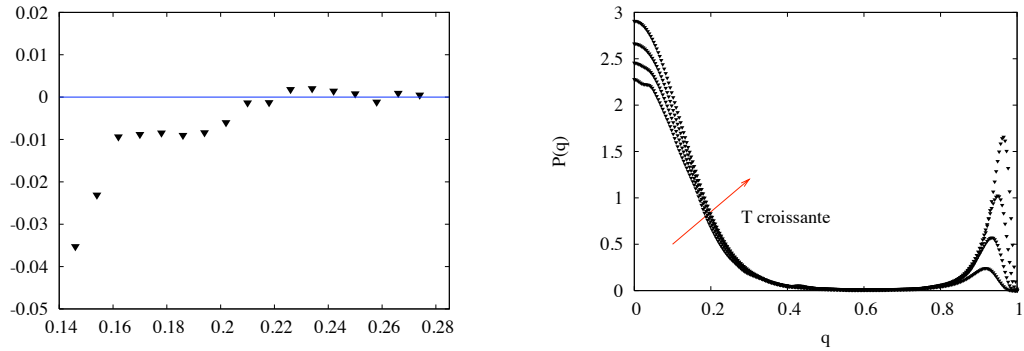


FIGURE 4.10 – Le modèle LORM : $\gamma^{-1} = 4$ et $N = 8^3$. *A gauche* : Rapport de fluctuation-dissipation $R(T)$. On observe trois régimes : i) $T > T_d$, les systèmes étudiés sont correctement thermalisés, $R(T)$ oscille autour de 0, ii) $T_s < T < T_d$, $R(T) \simeq 1\%$, les échantillons sont près d'être équilibrés, iii) $T < T_s$, les différents échantillons tombent fortement hors d'équilibre. *A droite* : $P(q)$ pour $T = 0.154, 0.162, 0.17$ et 0.178 . La forme de $P(q)$ est celle d'un système connaissant une transition 1-RSB.

secondaire à $q_{EA} \simeq 0.9$ pour $T > T_s$. Il s'agit là d'un effet de taille finie, ce pic correspond à une phase thermodynamiquement instable, comme dans le ROM.

L'impossibilité de thermaliser convenablement $N = 8^3$ en dessous de T_d , nous a conduit à limiter notre étude à $T > T_d$ pour les tailles suivantes, en raison de la modeste efficacité du *parallel tempering*. Comme dans le cas du ROM, une observation directe de la relaxation des observables thermodynamiques depuis une configuration atypique (par exemple $(1, \dots, 1)$) permet d'en juger (voir la figure 4.11). L'étude de $R(T)$ (voir figure 4.12) montre que les

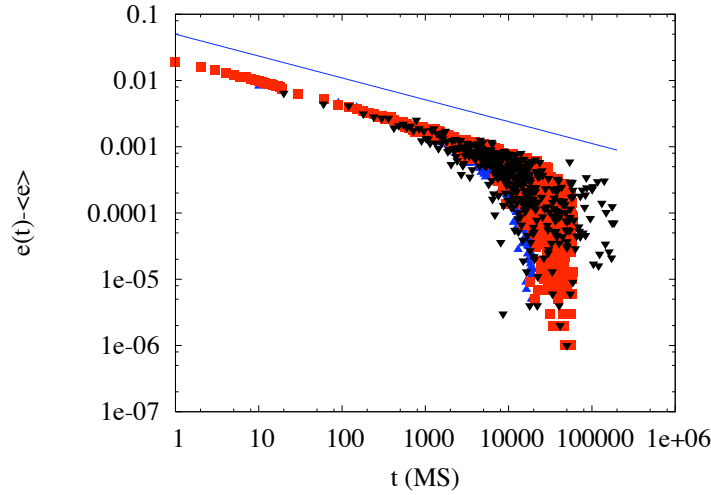


FIGURE 4.11 – Relaxation de l'énergie interne instantanée moyennée sur le désordre depuis une configuration initiale aléatoire pour $N = 8^3$ (en noir), 12^3 (en rouge), et 16^3 en bleu. Les simulations ont été effectuées en utilisant 15 températures également distribuées entre $T = 0.175$ et 0.29 et 96 réalisations du désordre. Seule la température $T = 0.175$ est représentée en fonction du temps Monte-Carlo. La ligne droite a une pente -0.33 .

systèmes sont convenablement thermalisés pour toutes les tailles et toutes les températures considérées. Les résultats obtenus pour $P(q)$ (voir figure 4.12) sont en accord avec une transition 1-RSB pour toute taille de systèmes. Bien évidemment au-dessus de T_s pour un système 1-RSB et de T_c pour un système ∞ -RSB, $P(q)$ est la même. Néanmoins, si l'on étudie le coefficient de Binder, même au-dessus de T_s et de T_c , la forme de ce dernier diffère suivant le type de brisure. On peut constater à la figure 4.13 que $B(T)$ est toujours négatif. Dans le cas ∞ -RSB, il est toujours positif au-dessus de T_c (voir fig. 4.9). En revanche, il est toujours négatif dans le cas d'une transition 1-RSB. On remarque que pour $N = 12^3$ et $N = 16^3$ ce coefficient est moins négatif que pour $N = 8^3$. Il s'agit là d'un fort effet de taille finie : l'existence d'un pic anomal dans $P(q)$ à $N = 8^3$ se traduit nécessairement dans la valeur de $B(T)$. On peut observer un effet similaire dans le cas du ROM.

Ces différents résultats indiquent que le modèle LORM pour $\gamma^{-1} = 4$ a une thermodynamique bien décrite par une transition de type 1-RSB. Une étude numérique dans le domaine $T_s < T < T_d$ permettrait de l'établir définitivement. Cependant, une telle étude demande des ressources numériques démesurées en raison de la médiocre efficacité du *parallel tempering*, et constitue en elle-même un défi.

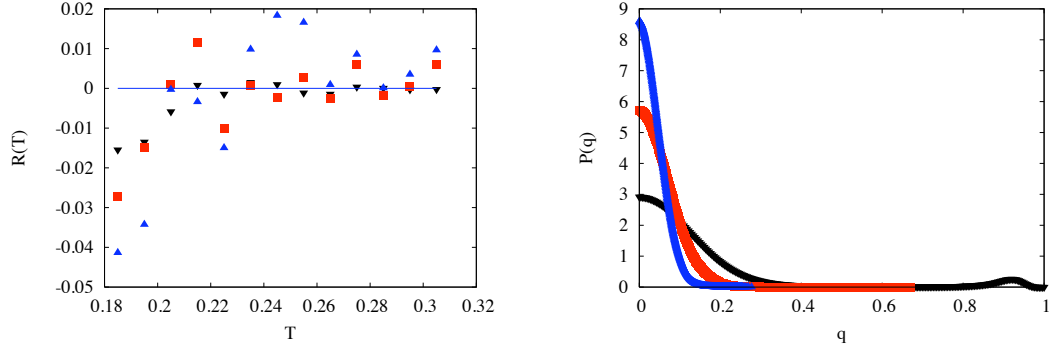


FIGURE 4.12 – *A gauche* : Rapport de fluctuation-dissipation $R(T)$. Pour toutes les tailles et températures considérées, les systèmes étudiés sont bien thermalisés. *A droite* : $P(q)$ pour $T = 0.175 > T_d$. $N = 8^3$ (en noir) montre un pic associé à une phase thermodynamique instable en $q \simeq 0.9$, à la différence de $N = 12^3$ (en rouge) et de $N = 16^3$ en bleu.

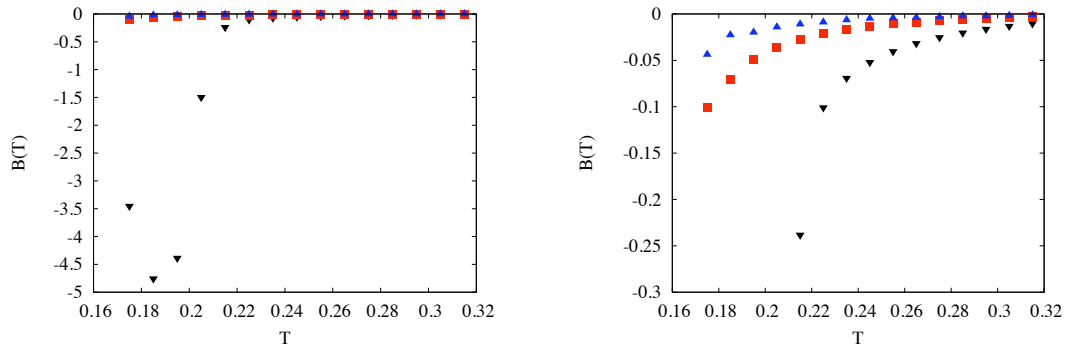


FIGURE 4.13 – Cumulant de Binder $B(T)$. *A gauche* : $B(T)$ pour $N = 8^3$ (en noir) a la forme habituelle d'un système 1-RSB. La valeur très négative de $B(T)$ dans ce cas est liée à l'apparition d'un pic thermodynamiquement instable à $T > T_s$. *A droite* : L'agrandissement de la figure précédente montre que $B(T)$ pour $N = 12^3$ (en rouge) et $N = 16^3$ (en bleu), a également une forme compatible avec une transition 1-RSB. L'effet de taille finie est ici important, mais à comparer à celui observé dans le ROM.

3.4 Un argument sommaire.

La différence qualitative de comportement du modèle LORM pour $\gamma^{-1} = 2$ et $\gamma^{-1} = 4$ est pour le moins intrigante. Il est probable que ce résultat soit dû à un effet de taille finie des cubes de base.

Néanmoins, pour exclure une erreur dans l'analyse de la solution homogène du modèle, on peut utiliser le lien avec les modèles sphériques. En diagonalisant directement les matrices de couplages du modèle LORM, on s'aperçoit dans un cas comme dans l'autre que leurs distributions de valeurs propres sont extrêmement similaires (voir la figure 4.14), et très bien décrites comme étant la somme de deux matrices ROM de taille $N \times N$.

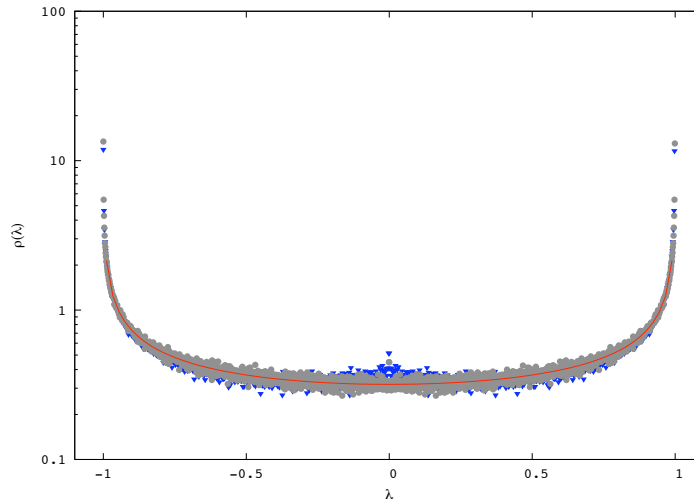


FIGURE 4.14 – Densité de valeur propre de la matrice de couplage LORM pour $N = 512$: en bleu $\gamma^{-1} = 2$, en gris $\gamma^{-1} = 4$, en rouge la prédiction analytique pour la somme de deux matrices ROM.

L'argument d'un effet de taille finie des cubes peut se comprendre peut-être plus facilement en calculant ce que vaut pour une matrice de couplage LORM tLL . Pour une matrice ROM J , par définition ${}^tJJ = 1$. Ecrivons simplement :

$${}^tLL = \sum_j L_{ij} L_{jk} \quad (4.63)$$

$$= \sum_{j \in \mathcal{S}_\alpha^1(i) \cap \mathcal{S}_\alpha^1(k)} L_{ij} L_{jk} + \sum_{j \in \mathcal{S}_\alpha^2(i) \cap \mathcal{S}_\alpha^2(k)} L_{ij} L_{jk} \quad (4.64)$$

$$+ \sum_{j \in \mathcal{S}_\alpha^2(i) \cap \mathcal{S}_\alpha^2(k)} L_{ij} L_{jk} + \sum_{j \in \mathcal{S}_\alpha^2(i) \cap \mathcal{S}_\alpha^1(k)} L_{ij} L_{jk} \quad (4.65)$$

où $\mathcal{S}_\alpha^j(i)$ désigne l'ensemble des (indices) des spins partageant un cube de base commun avec le spin d'indice i , j désignant s'il s'agit du premier ou du second réseau de cubes de base, ces deux réseaux étant décalés d'une translation γ^{-1} suivant chacune des directions de $\mathbb{R}^d$. Il faut pour obtenir un résultat non nul que les indices des différentes sommations ne soient pas des ensembles vides. En utilisant le fait i) que les matrices ROM de taille $\gamma^{-d} \times \gamma^{-d}$ sont des matrices orthogonales, ii) que ces matrices sont indépendantes, iii) que

la contrainte orthogonale est une contrainte globale, qui localement peut être négligée, on montre que

$$({}^tLL)_{ij} = \delta_{ij} + \left(\frac{1}{\gamma}\right)^{-d/2} \mathcal{G}_{ij} \quad (4.66)$$

$\mathcal{G}$ est une matrice dont les entrées sont des variables aléatoires gaussiennes indépendantes d'ordre 1 quand les indices des quatre précédentes sommations ne sont pas des ensembles vides, et 0 sinon. Si γ^{-1} est "trop" faible, ces fluctuations sont dominantes, toute trace de la contrainte orthogonale est perdue. Les couplages se comportent comme des variables aléatoires indépendantes ; on retrouve le cas du modèle de Kač naïf. On peut utiliser cette remarque pour dériver les équations TAP du modèle LORM. Dans la limite de Kač, on s'aperçoit que les diagrammes contribuant à la fonctionnelle TAP seraient les mêmes que ceux du champ moyen (diagrammes en pétales).

Cet argument assez sommaire indique qu'il ne faut pas "trop" s'éloigner du champ moyen si l'on espère conserver une physique de type 1-RSB. Une observation similaire a été formulée dans l'étude d'un modèle de Kač unidimensionnel [79]. Dans cette adaptation de dimension 1 du modèle d'énergies aléatoires (REM), il a été montré que la convergence vers la limite de Kač : $\gamma \rightarrow 0$ était particulièrement lente. On peut penser qu'il s'agit là d'un effet similaire.

4 Conclusion

La définition d'un modèle de dimension finie à partir du ROM est délicate. L'origine de la transition 1-RSB du ROM est liée à la contrainte orthogonale imposée aux matrices de couplage. L'utilisation d'interactions proches voisins détruit cette contrainte et conduit à des modèles de type SK. Cela permet ainsi d'avoir défini ce qui est le premier modèle présentant une transition de type 1-RSB en dimension $d = 3$.

Une manière de conserver cette physique est d'utiliser une contrainte orthogonale locale, contrôlée par la limite de champ moyen. Cependant, cette description n'est valable que si localement, le patch élémentaire est convenablement décrit par la théorie asymptotique du ROM. L'origine de l'instabilité des modèles 1-RSB est ici particulièrement claire car reliée à une symétrie des couplages.

Cependant, une étude analytique complète serait utile. Il est toujours possible d'argumenter que la longueur de corrélation dépasse la taille des systèmes explorés numériquement et que la transition discontinue ne résisterait pas à la limite thermodynamique. Une étude approfondie des équations TAP de ce modèle s'avèrerait dans ce cadre d'une grande utilité.

Chapitre 5

Phénoménologie vitreuse du modèle L.O.R.M.

Le modèle LORM est un modèle construit pour tester les prédictions de la théorie RFOT. Celle-ci prédit trois régimes :

1. Le régime des hautes températures $T > T_d$ pour lequel les prédictions de la théorie MCT (comprise comme une théorie de Landau) s'appliquent. On s'attend donc à retrouver une superposition temps-température des courbes de relaxation, la divergence en loi de puissance des temps de relaxation, les relations entre les exposants a , b et γ , la divergence en ϵ^{-1} du pic de la susceptibilité dynamique...
2. Le régime des températures intermédiaires $T_s < T < T_d$, où la dynamique devient décrite par l'apparition des états mosaïques. Dans ce régime, la dynamique devient une dynamique activée entre états. Le système peut rester piégé dans un état pour une température $T_K < T_g < T_d$ dépendant de la rapidité de la trempe. C'est le gel vitreux.
3. Le régime des basses températures $T < T_s$. Le système passe par une véritable transition de phase thermodynamique 1-RSB.

L'exploration (numérique) de chacun de ces régimes demande un modèle où en taille finie chacun de ces régimes est bien séparé en température. Le modèle introduit au chapitre précédent répond à ces critères. Cependant, comme pour le ROM, les algorithmes Monte-Carlo optimisés standards (*parallel tempering*) demeurent d'une modeste efficacité. Cela contraint l'étude du modèle LORM au régime de haute-température ($T > T_d$).

Néanmoins, dans le modèle à p spins de dimension finie, la figure 4.1 montre que si le système avait une taille finie, la température dynamique effective vue par le système augmenterait. L'apparition d'un ordre amorphe à longue portée se caractérise par la persistance des conditions aux bords à longue portée. Dans une expérience de cavité inspirée par l'expérience de pensée de [10], suffisamment près de T_d , pour des cavités de petite taille, on doit donc pouvoir observer l'apparition d'états mosaïques, ce que confirme les résultats analytiques de [76].

Ce chapitre est ainsi organisé en deux parties. La première partie est consacrée à l'étude de la dynamique du modèle LORM dans le régime de hautes températures, la seconde partie aux expériences de cavités.

1 Phénoménologie MCT

La stabilité structurale de la théorie de couplage de modes permet de reformuler cette dernière comme une théorie de Landau (dynamique) de la transition vitreuse dans le régime

de haute-température [4]. Cela signifie que certaines prédictions de la MCT sont universelles, c'est-à-dire insensible aux détails de la définition des modèles qu'elle décrit. Nous avons vu déjà vu un exemple de cet effet avec l'étude du ROM.

De manière schématique, l'existence de prédictions universelles au sein de la MCT tient à l'existence d'une échelle de longueur dynamique divergente à T_d . En dimension finie, les barrières entre états n'étant plus infinies, il ne peut plus exister de longueur divergente à T_d . Néanmoins, à l'approche de cette température cette longueur va toujours croître. Une certaine universalité peut en émerger. A suffisamment haute température, on s'attend donc à observer une phénoménologie proche de la MCT (augmentation du temps en loi de puissance,...). Pour ce faire, nous suivons la même démarche que pour le modèle de champ moyen.

1.1 Simulations numériques

Nous avons simulé la dynamique du modèle LORM pour $\gamma^{-1} = 4$ et $N = 4^3, 8^3, 12^3$ et 16^3 avec des conditions aux bords périodiques. Comme pour le ROM, la simulation de la dynamique s'effectue en trois étapes :

1. Thermalisation de l'ensemble des systèmes au moyen de $15 \cdot 10^6$ itérations de *parallel tempering*. Ici nous avons utilisé 15 températures également réparties entre $T = 0.175$ et 0.315 par pas de $\Delta T = 0.01$.
2. Simulation de la dynamique proprement dite au moyen de l'algorithme de Metropolis pour un nombre d'itérations correspondant à $40\tau_\alpha$.
3. Génération de nouvelles configurations initiales décorréliées des précédentes au moyen de $5 \cdot 10^5$ nouvelles itérations de *parallel tempering*.

Les deux dernières étapes sont répétées autant de fois que de configurations initiales nécessaires. Le nombre de réalisations du désordre pour chaque taille est de $N_{dis} = 96$. Pour chaque réalisation du désordre, nous avons généré $N_{ther} = 200$ configurations initiales, à l'exception de la plus grande taille de système où $N_{ther}(16^3) = 100$.

1.2 Phénoménologie MCT.

Recouvrement dynamique :

Comme pour le ROM, nous débutons l'étude la dynamique en nous intéressant au recouvrement dynamique $q_d(t)$. La figure 5.1 montre l'apparition progressive d'un plateau lorsque la température est abaissée. Comme dans la description de champ moyen, la valeur du plateau est proche de la valeur du paramètre d'Edwards-Anderson ($q_{EA}(T_d) \simeq 0.85$) calculée dans la limite homogène au moyen du pseudo-potentiel (voir la figure 4.4). Pour les plus basses températures, on peut distinguer nettement l'existence d'un régime β . Cela contraste avec les résultats obtenus pour le ROM. Néanmoins, il faut noter que les tailles de systèmes accessibles pour le modèle LORM sont beaucoup plus grandes que celles du ROM, ce qui explique que le régime β puisse se développer. Par ailleurs, le plateau apparaît à une valeur plus basse, ce qui là également favorise l'apparition d'un régime β . On observe ainsi bien la relaxation en deux temps prédites par la MCT et observée expérimentalement (voir la figure 5).

Le principe de superposition temps-température est également vérifié. Définissons le temps de relaxation structurale τ_α comme étant le temps pour lequel le recouvrement dynamique a atteint la moitié de la valeur du plateau : $q_d(\tau_\alpha) = 0.4$. On vérifie à la figure 5.1 que la remise à l'échelle de $q_d(t, T)$ en fonction du rapport t/τ_α suit une courbe maîtresse pour des températures suffisamment éloignées de T_d . Comme pour le ROM, près de T_d , la relaxation devient de plus en plus étirée quand la taille du système augmente.

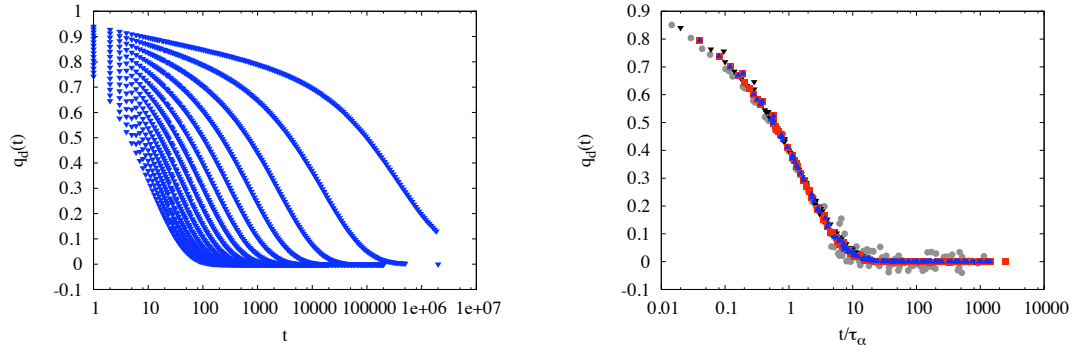


FIGURE 5.1 – *A gauche* : Evolution du recouvrement dynamique $q_d(t)$ en fonction de la température pour le plus grand système ($N = 4096$), et pour différentes températures comprises entre $T \simeq T_d$ (courbe du haut) et $T = 1.8T_d$ (courbe du bas) par pas de $\Delta T/T_d \simeq 6\%$. *A droite* : Test de la superposition temps-température de $q_d(t)$ pour toutes les tailles ($N = 4096$ en bleu, $N = 1728$ en rouge, $N = 512$ en noir et $N = 64$ en gris) pour différentes températures comprises entre $T = 1.25T_d$ et $T = 1.8T_d$.

Dans ce dernier cas, cet effet est attribué aux fluctuations de désordre qui mélangent le régime de dynamique MCT et le régime activé. Il s'agit d'un effet de taille finie, et non de la dimension finie.

L'évolution en température de τ_α est reportée à la figure 5.2. Si l'on trace en s'inspirant du diagramme d'Angell, $\ln \tau$ en fonction de T_d/T , on constate clairement que celui-ci suit une évolution non-Arrhénienne. Plus précisément, si l'on suit l'évolution du plus petit système qui correspond à la taille d'un patch élémentaire, on note que celui est quasiment exponentiel et suit une évolution identique au ROM de taille comparable. Lorsque la taille est augmentée, on voit clairement que le système se comporte comme un liquide fragile. Les effets de taille finie semblent indiquer que ce temps garde une valeur finie dans la limite thermodynamique. On peut grossièrement estimer la fragilité de ce modèle en utilisant la loi VFT, cela conduit à la borne :

$$m_A(LORM) \geq 17 \frac{T_s}{T_d - T_s} = 109 \quad (5.1)$$

Ce qui est la signature d'un liquide de fragilité moyenne comparable à celle du toluène.

L'origine du caractère non-arrhéniën du temps de relaxation est ici à relier à l'existence de la transition MCT. En effet, si l'on trace maintenant τ_α en fonction de l'écart à la température dynamique T_d , on constate (voir la figure 5.2) que celui-ci suit sur les deux premières décades une loi de puissance caractérisée par un exposant $\gamma = 2.3$. Cette observation est conforme aux prédictions de la MCT. Par ailleurs, on constate que les effets de taille finie sont compatibles avec une valeur finie de temps de relaxation pour $T = T_d$. Cela signe le caractère de dimension finie de ce modèle, et contraste avec les effets de taille finie du ROM dans ce régime (voir la figure 3.6).

Un test particulièrement exigeant de la phénoménologie MCT est de vérifier la loi reliant les exposants a , b et γ . L'expérience du ROM montre que la mesure de b directement à partir de $q_d(t)$ conduisait à des résultats peu fiables, et qu'il était préférable d'extraire cet exposant soit à partir de l'observation de la relaxation de l'énergie soit de la susceptibilité dynamique $\chi_4(t, T = T_d)$. La relaxation de l'énergie (voir la figure 5.3) permet d'extraire un exposant $a = 0.33$ ce qui correspond, en utilisant les relations (1.29) et (1.32) à $b = 0.67$ et

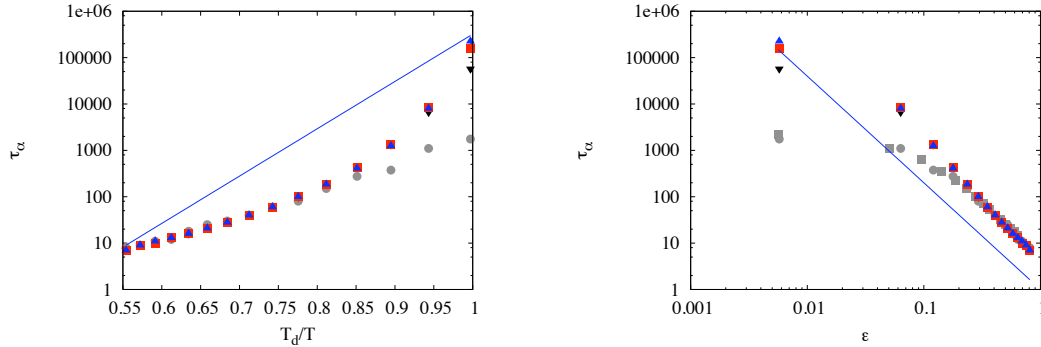


FIGURE 5.2 – *A gauche* : Comportement non-arrhénien du temps de relaxation τ_α pour différentes tailles de systèmes ($N = 4096$ en bleu, $N = 1728$ en rouge, $N = 512$ en noir et $N = 64$ en gris). L'effet de taille finie diminue fortement avec la taille, ce qui laisse à penser que le temps de relaxation converge vers une valeur finie à T_d quand $N \rightarrow \infty$. *A droite* : Le temps de relaxation en fonction de $\epsilon = (T - T_d)/T_d$ pour toutes les tailles, les carrés gris représentent le temps de relaxation du ROM pour $N = 64$ étudié dans [153]. Le régime asymptotique se caractérise par une loi de puissance en $\epsilon^{-\gamma}$ avec $\gamma = 2.3$ sur deux décades de temps.

$\gamma = 2.25$. En parfait accord avec le comportement du temps de relaxation. Ces exposants sont proches de ceux du ROM, et peut-être identiques en raison de l'incertitude sur la détermination des exposants du ROM. Cependant, on peut très bien concevoir que ceux-ci diffèrent légèrement [4].

Suceptibilité dynamique :

L'étude de la susceptibilité dynamique vient appuyer ces résultats. Tout d'abord, le comportement du maximum $\chi_4^*(T)$ de la susceptibilité dynamique en fonction de la température, tracé à la figure 5.4, montre une croissance en ϵ^{-1} sur les deux premières décades. Ce comportement est conforme aux prévisions de la MCT [19]. De même, le temps $\tau_4(T)$ auquel le pic de $\chi_4(t)$ apparaît suit une loi de puissance en $\epsilon^{-\gamma}$, où l'exposant $\gamma = 2.3$ est identique à celui obtenu à partir du temps de relaxation structurale $\tau_\alpha(T)$. On vérifie d'ailleurs que $\tau_4(T)$ et $\tau_\alpha(T)$ sont à peu près proportionnels. Pour finir, le tracé de $\chi_4(t, T)/\chi_4^*(T)$ en fonction de t/τ_α à la figure 5.3 montre une superposition temps-température approximative près du pic, à l'exception de la température la plus basse $T = 0.175 \simeq T_d$, comme pour le recouvrement dynamique. L'approche du pic est bien décrite par une loi de puissance. On constate que $\chi_4(T_d, t) \sim t^b$ avec $b = 0.65$. Cet exposant est compatible avec les autres déterminations.

L'ensemble de ces données montrent que les prédictions de la MCT sont très bien vérifiées dans le régime $T > T_d$. Cependant, comme pour le ROM, l'évolution des susceptibilités violent clairement les résultats asymptotiques. Si l'on compare l'évolution de χ_4 , de $\kappa_T = dq_d/dT$ et de $-dq_d/d \ln t$, on voit clairement que l'approche du pic est différente. On peut constater à la figure 5.5 que quelque soit la température considérée (près de T_d , ou non), χ_4 croît plus rapidement que $\kappa_T = dq_d/dT$ et $-dq_d/d \ln t$ à l'approche du pic. Manifestement, les effets pré-asymptotiques affectent particulièrement cette relation.

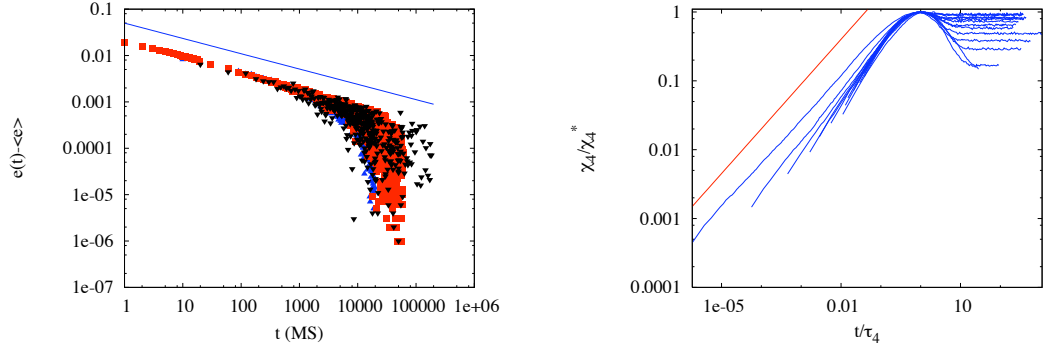


FIGURE 5.3 – Détermination des exposants MCT. *A gauche* : Relaxation de l'énergie interne instantanée moyennée sur le désordre depuis une configuration initiale aléatoire pour $N = 8^3$ (en noir), 12^3 (en rouge), et 16^3 en bleu. Seule la température $T = 0.175$ est représentée en fonction du temps Monte-Carlo. La ligne droite correspond à une loi de puissance t^{-a} , avec $a = 0.33$. *A droite* : Remise à l'échelle de la susceptibilité dynamique $\chi_4(t)$. A l'exception de la température la plus basse la superposition temps-température est bien vérifiée. Le comportement à temps long diffère ; celui-ci est fixé par les fluctuations statiques du recouvrement. La ligne droite correspond à la loi de puissance t^b où $b = 0.65$.

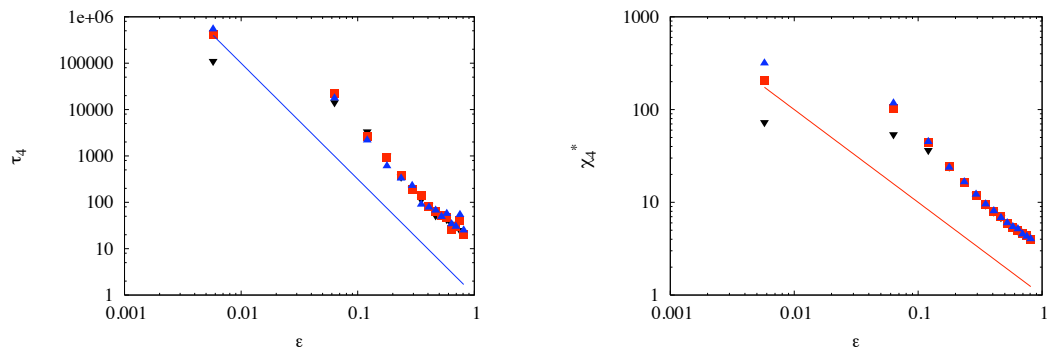


FIGURE 5.4 – Test de la phénoménologie MCT. *A gauche* : Evolution de la position τ_4 du maximum de $\chi_4(t)$ en fonction de l'écart à la température dynamique ϵ . La ligne droite figure une loi de puissance $\epsilon^{-\gamma}$ avec $\gamma = 2.3$. *A droite* : Evolution du maximum $\chi_4^*(T)$ de la susceptibilité dynamique. L'évolution de celle-ci est compatible avec une croissance initiale en ϵ^{-1} , représentée par la ligne rouge et prédite par la MCT.

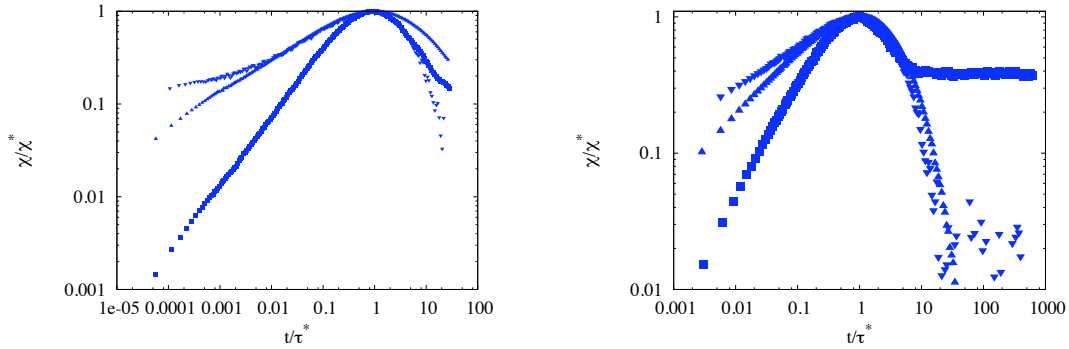


FIGURE 5.5 – Comparaison de la susceptibilité dynamique χ_4 (carrés), de la compressibilité $\kappa_T = dq_d/dT$ (triangles pointant vers le bas) et de la dérivée logarithmique $-dq_d/d \ln t$ (triangles pointants vers le haut) pour $N = 16^3$ et $T = 0.185$ (à gauche) et $T = 0.225$ (à droite).

Corrélateur à quatre points.

Le lien existant entre la susceptibilité dynamique χ_4 et le corrélateur à quatre points $G_4(r, t)$ permet d'observer dans l'espace réel la croissance d'un ordre dynamique. L'évolution spatiale de $G_4(r, t)$ pour le plus grand système ($N = 16^3$) est reportée à la figure 5.6. Pour toutes les températures, elle montre une relaxation en deux temps suivant que r est inférieur ou supérieur à $\gamma^{-1} = 4$. Cela traduit le fait que pour $r < 4$, G_4 ne sonde en moyenne que les corrélations dynamiques entre spins appartenant à un même patch. Sur cette échelle, le système est relativement rigide. Au-delà, G_4 donne accès aux corrélations dynamiques entre spins appartenant à des patches différents. Lorsque la température est abaissée, les corrélations "extra-patch" croissent de manière spectaculaire : par exemple, $G_4(r = 8, \tau_d)$ augmente de trois ordres de grandeur quand la température passe de $1.8T_d$ à T_d .

En séparant les corrélations "intra-patch" des corrélations "extra-patch", on peut extraire deux longueurs de corrélation dynamique $\xi_4(T)$. La figure 5.6 montre leur évolution avec la température. Ces deux longueurs augmentent de manière simultanée et comparable. La taille restreinte des systèmes étudiés ne permet de mener une analyse quantitative de l'évolution de ces quantités. On constate par exemple qu'à la température la plus basse les longueurs obtenues dépassent la taille du système ce qui ne semble pas très raisonnable. Néanmoins, elles illustrent parfaitement l'apparition d'un ordre dynamique au travers du système.

2 Cavité

L'étude directe du modèle LORM montre l'existence de corrélations dynamiques. Elles s'accompagnent de la croissance d'une échelle de temps (τ_α) associée à la croissance d'une échelle de longueur (ξ_4) (voir les figures 5.6, 5.4 et 5.2). Elles illustrent l'existence d'hétérogénéités dynamiques. La RFOT relie ce phénomène à l'apparition progressive d'un ordre amorphe à longue portée (les états mosaïques). En conséquence, si un tel ordre apparaît, les effets des conditions de bord deviennent à longue portée. Dans un modèle désordonné, le choix des conditions au bord est délicat. Une manière de résoudre ce problème est de considérer une expérience de cavité (voir la section 4 du chapitre 1).

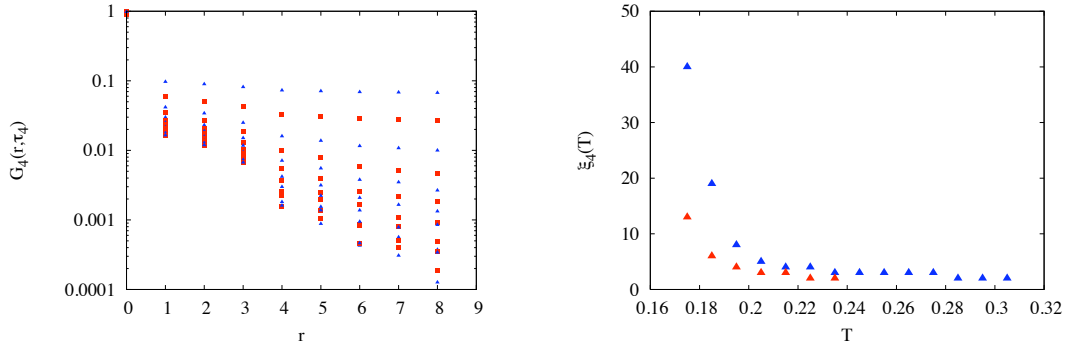


FIGURE 5.6 – Emergence d'un ordre dynamique. *A gauche* : Evolution spatiale de $G_4(r, t)$ en $t = \tau_4$ pour le plus grand système ($N = 16^3$). On constate une croissance importante des corrélations dynamiques lorsque la température est abaissée (la courbe la plus basse correspond à la plus haute température). Le jeu de couleur n'a qu'une visée illustrative. *A droite* : Croissance des longueurs dynamiques extraites de $G_4(r, \tau_4)$ obtenue en ajustant une loi exponentielle dans chacun des deux régimes ("intra-patch" en rouge et "extra-patch" en bleu).

Des travaux précédents [20, 35, 36, 46] (voir la section 4 du chapitre 1) réalisés sur un mélange binaire de particules interagissant par un potentiel de Lennard-Jones, ont montré un comportement compatible avec l'existence d'états mosaïques. Néanmoins, l'interprétation de ces données passe par l'introduction d'une distribution de tension de surface $p(\Upsilon)$ [20]. Les tentatives pour extraire des informations quantitatives sur les exposants prédits par la RFOT sont en revanche moins convaincantes. Elles reposent sur des expériences numériques différant des expériences de cavité [35, 36].

Notre but est ici plus modeste. Etant donnée la taille modeste du plus grand système ($N = 16^3$ et $\gamma^{-1} = 4$), une étude quantitative est impossible dans de telles expériences. En outre, seul le régime $T > T_d$ est accessible. Toutefois, les résultats obtenus sur le modèle à p spins de dimension finie [76] montre que la température dynamique effective vue par une cavité est augmentée quand sa taille diminue (voir la figure 4.1). Suffisamment près de T_d , on doit pouvoir observer l'apparition d'états mosaïques.

Si la compréhension du volet thermodynamique des expériences de cavités a attiré beaucoup d'attention, la dynamique reste encore à explorer. Il n'existe aucune étude précise du comportement dynamique des fonctions de corrélation point-ensemble. De même la caractérisation des hétérogénéités dynamiques est inexistante : quelle est l'évolution de la susceptibilité χ_4 , ou de la fonction de corrélation à quatre points G_4 ?

Après avoir présenté le détail des simulations numériques et introduit une version dynamique de la fonction de corrélation centre-conditions aux bords dans une première section, nous examinons, dans la deuxième section, en détail la dynamique au sein de nos plus grandes cavités. Cette étude montre un comportement inattendu des observables dynamiques, que nous interprétons à l'aide des états mosaïques. Enfin, dans la dernière section, nous examinons l'effet de la taille de la cavité, dans le but d'obtenir quelques informations sur les exposants θ et ψ de la RFOT.

2.1 Simulations numériques

Les simulations numériques des expériences de cavité ont été réalisées sur la plus grande taille de système $N = 16^3$. Les cavités sont des cavités cubiques de largeur $R = 8, 10$ et 12 suivant l'axe x , et de longueur et hauteur 16 suivant les axes y et z (voir fig 5.7). Le choix des tailles de cavité est limité par la définition du modèle : comme les spins appartenant à la même intersection de deux cubes ont un environnement identique, les tailles de cavité sont nécessairement paires et de taille supérieure à 8 et inférieure à 12 . Les conditions aux

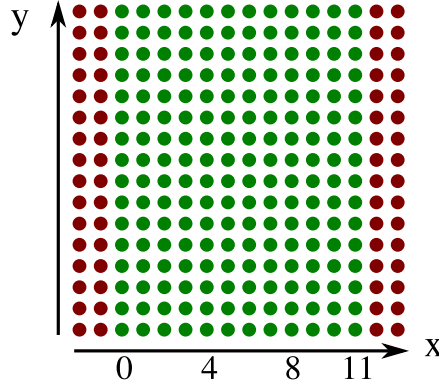


FIGURE 5.7 – Coupe transversale d'une cavité (ici $R = 12$) dans la direction z .

bords sont des conditions périodiques suivant les axes y et z , et suivant l'axe x , celles données par les configurations d'équilibre gelées à l'extérieur de la cavité.

La géométrie cubique des cavités invite à définir un recouvrement dynamique local moyenné sur chacun des plans $\mathcal{P}_x$ définis par $x = cste$:

$$q_d(x, t) = \frac{1}{L^2} \sum_{i \in \mathcal{P}_x} \overline{\langle S_i(0) S_i(t) \rangle} \quad (5.2)$$

où L est la taille linéaire du système. Ici, la notation $\langle . \rangle$ signifie que l'on a moyenné sur les différentes conditions aux bords. La fonction de corrélation du centre de la cavité respectivement aux conditions au bord est ici remplacée par une fonction de corrélation du plan central aux conditions au bord :

$$q_{pts}(R) = \lim_{t \rightarrow \infty} q_d(x = R/2, t) \quad (5.3)$$

Cette définition du recouvrement dynamique local amène à s'intéresser à la fonction à quatre point suivante :

$$G_4(r, t) = \overline{\langle q_d(R/2, t) q_d(R/2 + r, t) \rangle_c} \quad (5.4)$$

qui diffère légèrement de la définition habituelle de G_4 .

En pratique, le programme simule l'évolution de deux copies indépendantes du même système, c'est-à-dire de même taille de cavité et même configuration de spins initiale. Cela permet d'avoir accès à la distribution $P(q_{pts}(R))$. Au sein de la cavité, les spins évoluent suivant l'algorithme simple de Metropolis.

Les expériences de cavités sont réalisées pour un jeu de 15 températures également réparties entre $T = 0.175 > T_d$ et $T = 1.8T_d$. Pour toutes les cavités, les configurations de spins initiales sont celles ayant servi à l'étude de la dynamique d'équilibre du modèle. Pour chaque échantillon de désordre, nous disposons de $N_{ther} = 100$ configurations d'équilibre. Le nombre de réalisation du désordre est de $N_{dis} = 96$.

2.2 Dynamique vitreuse au sein d'une cavité

Dans toute cette section, nous considérons la plus grande taille de cavités : $R = 12$.

Recouvrement dynamique :

L'évolution du recouvrement dynamique, moyenné sur la tranche centrale, en fonction de la température est rapportée à la figure 5.8. Après une décroissance initiale, celui-ci atteint un plateau de valeur $q_{pts}(R, T)$. On constate cependant que même à la plus haute température $T = 1.8T_d$, la tranche centrale n'est pas totalement décorrélée des conditions aux bords ($q_{pts} \simeq .075 \neq 0$). Les corrélations résiduelles étant devenues faibles, on s'attend à ce que le comportement de $q_d(x = 6, t)$ pour les plus hautes températures soit comparable à celui du recouvrement dynamique habituel, et notamment à l'existence d'une superposition temps-température.

La remise à l'échelle doit ici tenir compte de l'existence d'un plateau infini non-nul, on s'intéresse donc à :

$$\mathcal{Q}(x, t) = \frac{q_d(x, t) - q(x, \infty)}{1 - q(x, \infty)} \quad (5.5)$$

Le temps de relaxation $\tau_p(x)$ est alors défini comme le temps nécessaire pour que $\mathcal{Q}(x, t = \tau_p(x)) = 1/2$. On note sur la figure 5.8 qu'une superposition temps-température est bien observée. Cette superposition est valable jusqu'à $T = 1.25T_d$. En-deçà, elle est fortement

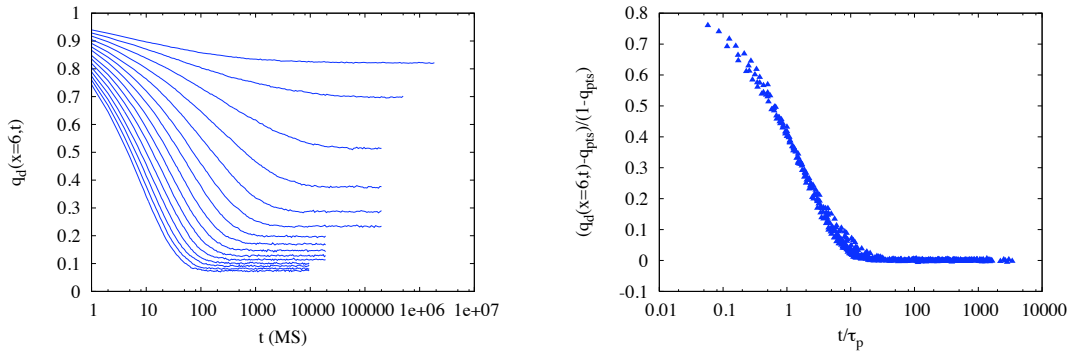


FIGURE 5.8 – Recouvrement dynamique de la tranche centrale pour la plus grande cavité ($R = 12$). *A gauche* : Evolution de $q_d(R/2, t)$ en fonction de la température entre $T \simeq T_d$ (courbe du haut) et $T = 1.8T_d$ (courbe du bas). On constate l'existence d'un plateau $q_{pts}(R)$ non-nul pour toutes les températures. *A droite* : Remise à l'échelle de $q_d(x = 6, t)$. La superposition temps-température est bien vérifiée (ici T varie entre $1.25T_d$ et $1.8T_d$).

violée. L'origine de ces violations n'est pas imputable à un effet de taille finie issu du modèle de champ moyen. Elles sont dues à une pénétration progressive des conditions aux bords au sein de la cavité, qui devient en quelque sorte plus rigide.

Le comportement du temps de relaxation traduit cet effet. En effet, la figure 5.9 montre un comportement non-monotone de $\tau_p(x)$ en fonction de la température, et ce quelle que soit la position dans la cavité. Il est intéressant de noter que la violation de la superposition temps-température intervient à une température proche de celle où le temps de relaxation passe par un maximum. Une fois que les conditions aux bords fixent l'intérieur de la cavité, le type de dynamique semble donc évoluer. Cependant, cet effet n'est pas trivialement

corrélé à la valeur du plateau. En se rapprochant du bord, la valeur du plateau augmente notablement alors que la température à laquelle τ_p devient maximal n'évolue pas (voir la figure 5.8).

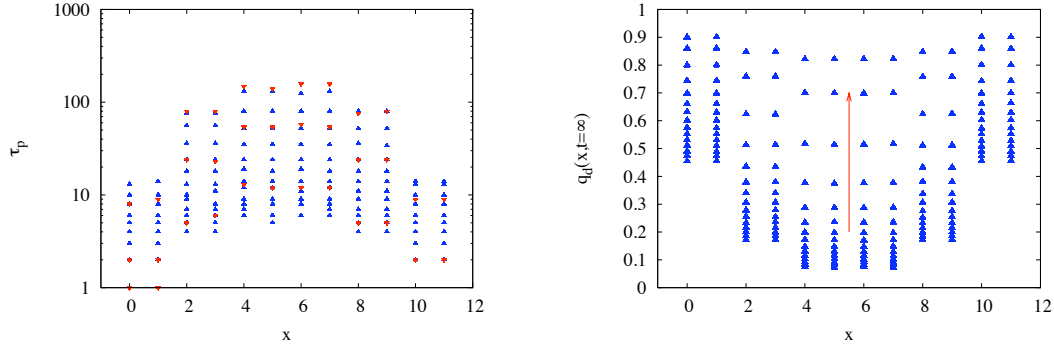


FIGURE 5.9 – *A gauche* : Evolution du temps de relaxation τ_p en fonction de la température et de la position dans la cavité entre $T \simeq T_d$ et $T = 1.8T_d$. Pour $T = 1.12T_d$, indépendamment de la position dans la cavité, le temps de relaxation passe par un maximum puis décroît (points en rouge). *A droite* : Evolution correspondante de la valeur du plateau de $q_d(x, \infty)$, la flèche indique les températures décroissantes. Plus on se rapproche du bord, ou plus on abaisse la température, plus le plateau se rapproche de 1. Cela traduit la persistance croissante des conditions aux bords au sein de la cavité. Le fait que ces courbes présentent des marches d'escaliers de longueur 2 est liée à la définition du modèle : deux spins appartenant au recouvrement de deux cubes de base ont un environnement identique.

De l'utilité des hétérogénéités dynamiques :

L'étude des hétérogénéités dynamiques au sein de la cavité permet d'analyser plus finement les changements intervenant dans la dynamique. Tout d'abord, la susceptibilité dynamique au sein de la cavité présente elle aussi un comportement inhabituel. On peut voir à la figure 5.10 que $\chi_4(t)$ n'a pas de maximum, et croît de manière monotone au cours du temps. Elle atteint un plateau qui caractérise les fluctuations statiques du recouvrement moyen dans la cavité.

La comparaison avec le comportement du système "libre" est utile : si aux hautes températures, la susceptibilité dynamique a une croissance initiale identique, elle ne montre jamais dans le cas de la cavité de pic. Tout se passe comme si les fluctuations statiques masquaient les fluctuations dynamiques. Dans la cavité, il ne se développe pas de vrai régime MCT, caractérisé par l'apparition d'un pic (divergeant comme $|T - T_d|^{-1}$). La dynamique au sein de la cavité est donc qualitativement différente.

Si l'on suit l'évolution du plateau de $\chi_4(t)$ avec la température, on constate que, lorsque la température est abaissée, ce plateau passe par un maximum à T^* , température à laquelle τ_p passe par un maximum, puis décroît. Cela confirme donc qu'il y a un changement de nature dans la dynamique.

L'évolution de la dynamique se lit également dans le comportement de G_4 . Le résultat est représenté à la figure 5.10. Outre les deux régimes de relaxation intra et extra-patch, on constate là également que l'évolution en température n'est pas monotone. Le passage de plusieurs à un état n'affecte que peu les corrélations dynamiques à courte distance,

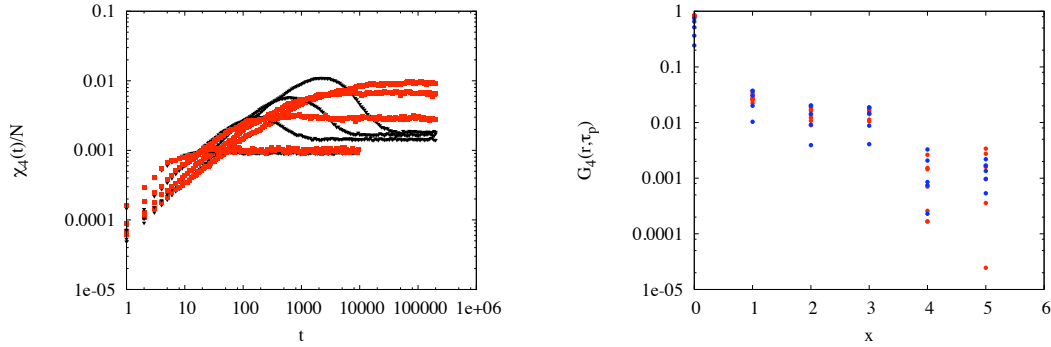


FIGURE 5.10 – Une trace des états mosaïques. *A gauche* : Evolution de la susceptibilité dynamique de la cavité (en rouge, $N = 3072$) et du système libre (en noir, $N = 4096$) pour $T = 1.06T_d$, $T = 1.12T_d$, $T = 1.18T_d$ et $T = 1.8T_d$. *A droite* : Corrélations dynamiques du centre de la cavité vers les bords pour toutes les températures. Les points bleus montrent la croissance des corrélations dynamiques quand la température est abaissée jusqu'à $1.18T_d$. Les points rouge montrent la décroissance de ces dernières quand $T \leq 1.18T_d$.

mais influence beaucoup les corrélations extra-patch. Celles-ci perdent deux ordres de grandeurs. Le système bien plus rigide semble moins corrélé dynamiquement. Cela montre sans ambiguïté qu'à T^* , la dynamique a changé de nature.

Ces observables dynamiques décrivent trois effets : 1. La dynamique ne ressemble pas à une dynamique MCT, 2. Les fluctuations statiques sont importantes, 3. celles-ci changent de nature à une température $T^* > T_d$.

Une trace des états mosaïques

Puisque les fluctuations statiques priment, il est nécessaire d'étudier $P(q_{pts})$. La figure 5.11 montre qu'en abaissant la température, la valeur moyenne de q_{pts} augmente. Cela traduit la pénétration des conditions aux bords, comme nous l'avons déjà noté. Plus intéressant, les fluctuations de q_{pts} (le pic s'élargit de plus en plus) augmentent jusqu'à $T = 1.12T_d$. En deçà, les fluctuations diminuent à nouveau. Cela confirme l'origine thermodynamique du résultat obtenu à partir de χ_4 . Remarquons enfin que les fluctuations sont maximales lorsque $q_{pts} = 1/2$, cette remarque permet de corréler la dynamique et thermodynamique.

Comment rendre compte de l'évolution de l'ensemble de ces objets ? Puisque la dynamique n'est pas une dynamique MCT, il faut convenir que la température dynamique effective vue par la cavité est supérieure à toutes les températures observées. Cela est cohérent avec les résultats obtenus dans [76]. On est donc fondé à discuter les résultats obtenus en termes d'états mosaïques.

L'interprétation est donc la suivante. Aux hautes températures, la cavité est composée de nombreux états de petite taille et de recouvrement mutuel nul. En abaissant la température, les états près du bord ont un recouvrement de plus en plus important avec la configuration gelée. Par ailleurs la taille des états augmentent. Les fluctuations statiques au centre de la cavité en sont donc augmentées : suivant les échantillons, les conditions aux bords ont plus ou moins pénétrées jusqu'au centre.

Lorsque la taille moyenne d'un état est de l'ordre de grandeur de la taille de la cavité, les conditions aux bords déterminent l'état au centre. Lorsque l'on atteint cette longueur,

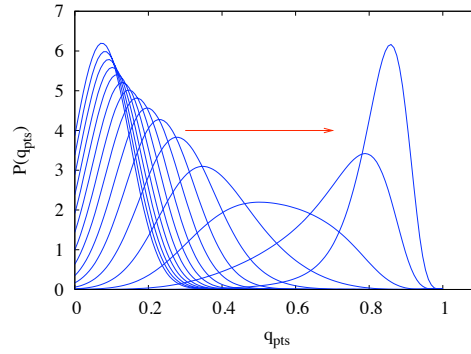


FIGURE 5.11 – Evolution de la distribution $P(q_{pts})$ entre $T \simeq T_d$ et $T = 1.8T_d$. La flèche rouge indique les températures décroissantes.

en moyenne la moitié des échantillons sont dans un état unique et l'autre moitié non. Les fluctuations sont donc maximales lorsque $\overline{q_{pts}} \simeq 0.5$ (*i.e.* à $T^* = 1.12T_d$). Passée cette température, les fluctuations regressent, car le système est typiquement dans un état unique. L'évolution en température de $P(q_{pts})$, comme de l'ensemble des observables dynamiques, est en parfait accord avec ce scénario. On notera que lorsque $\overline{q_{pts}} = 0.5$, la longueur dynamique du système libre est de l'ordre de la taille de la cavité (voir fig 5.6). Le changement de dynamique vient donc dans cette image du passage d'une dynamique inter-état à une dynamique intra-état. Cette explication rend compte de l'ensemble des observations.

2.3 Taille des cavités et états mosaïques

Le scénario esquissé à la section précédente fait une prédiction sur le lien entre la valeur de q_{pts} et le changement de dynamique. On peut vérifier cette idée en faisant varier la taille de la cavité.

Si l'on étudie l'évolution du recouvrement du plan central de la cavité q_{pts} avec la taille de cette dernière, on constate à température donnée que plus la cavité est petite, plus $q_{pts}(R)$ est grand (voir la figure 5.12). L'interprétation est évidente : la taille typique d'un état croît lorsque la température décroît, plus la cavité est petite, plus rapidement l'on atteint les bords. On constate le même effet en comparant le temps de relaxation au centre de la cavité $\tau_p(x = R/2)$ avec le temps τ_α du système libre. On observe également que si l'on augmente R , le régime où $\tau_p(x = R/2) \sim \tau_\alpha$ est de plus en plus développé. Il est donc raisonnable de penser que si l'on avait accès à de plus grandes cavités, on pourrait observer un vrai régime MCT.

La comparaison des figures 5.12 gauche et 5.12 droite montre également que le maximum du temps de relaxation est atteint à $q_{pts} = 0.5$ et ce quelque soit R . Cela conforte l'interprétation en termes d'états mosaïques.

Bien que les tailles des cavités soient restreintes, on peut tenter une analyse quantitative par des arguments de *finite-size scaling*, afin de caractériser les états mosaïques que l'on observe. Les résultats sont rassemblés à la figure 5.13. De manière très naïve, en suivant la ligne d'argumentation de [20], le recouvrement du plan central s'écrit :

$$\ln q_{pts}(R) = -\ln A - \left(\frac{R}{\xi(T)} \right)^{\beta(T)} \quad (5.6)$$

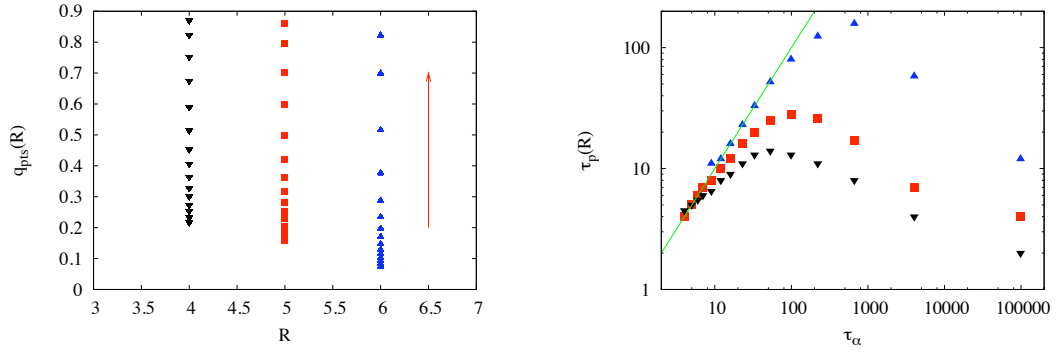


FIGURE 5.12 – Influence de la taille de la cavité. *A gauche* : Evolution du recouvrement du plan central de la cavité avec la taille de la cavité. La flèche rouge indique les températures décroissantes. *A droite* : Comparaison du temps de relaxation local au centre de la cavité avec le temps de relaxation τ_α du système libre. La ligne droite a pour pente 1 et indique donc la proportionnalité entre $\tau_p(x = R/2)$ et τ_α

où $\xi(T) \sim |T - T_c|^{1/d-\theta}$, et $\beta(T)$ est un exposant valant 1 pour $T > T_d$ et supérieur à 1 en-deçà. A température suffisamment haute dans la cavité, on peut espérer que $\beta = 1$, c'est cette valeur que nous utilisons. L'existence d'un régime initial où $\tau_p(x = R/2) \propto \tau_\alpha$ le justifie. Cela revient simplement à supposer un passage continu du régime MCT au régime activé des états mosaïques. Cela permet de fixer la constante A . La meilleure superposition des courbes est obtenue pour $\theta = 3/2$ (voir fig 5.13). De même, le temps de relaxation des

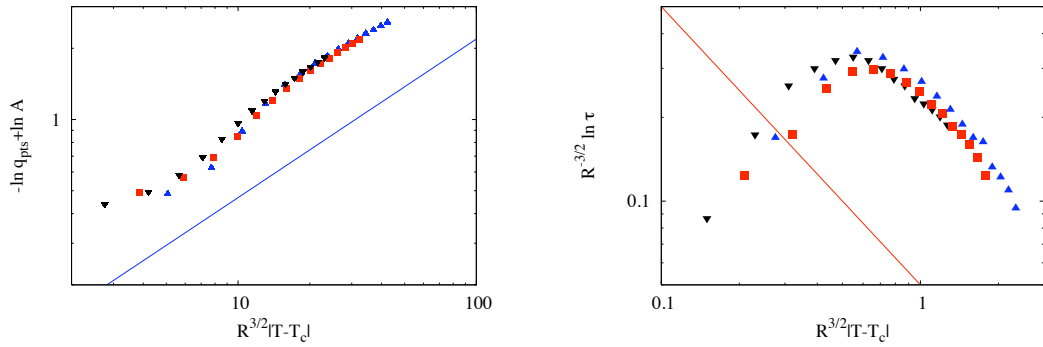


FIGURE 5.13 – Détermination des exposants θ et ψ . *A gauche* : Remise à l'échelle du recouvrement. La ligne bleue représente une loi de puissance d'exposant $x^{-.66}$. *A droite* : Remise à l'échelle du temps de relaxation du plan central, la ligne rouge est une loi de puissance x^{-1} . Ces deux courbes sont compatibles avec : $\psi = \theta = 3/2$.

états mosaïques est donné de manière générale par :

$$\ln \tau = \beta \xi(T)^\psi = \beta \left(\frac{\Upsilon}{T(T - T_c)} \right)^{\frac{\psi}{d-\theta}} \quad (5.7)$$

Cette fois-ci, en conservant le résultat précédent ($\theta = 3/2$), la meilleure superposition

est obtenue avec $\psi = 3/2$ (voir fig 5.13). Ces exposants contrastent avec ceux trouvés dans [35, 36, 76], mais sont identiques à ceux obtenus au sein de l'argument KTW.

Il faut cependant rester très prudent (et modeste) quant à la détermination de ces exposants. Les cavités sont petites. La remise à l'échelle bien que convaincante n'est pas une preuve suffisante ; elle peut n'être valable que dans une petite zone de R . Par ailleurs, la forme des courbes limites est difficilement interprétable.

3 Conclusion

L'étude de la phénoménologie vitreuse du modèle LORM est ainsi assez fructueuse. Ce modèle est le premier exemple de système désordonné 1-RSB en champ moyen, et qui semble le demeurer en $d = 3$.

La comparaison avec le ROM montre très clairement que dans le régime $T > T_d$, les prédictions universelles de la MCT sont valables. Cela illustre son statut de théorie de Landau. Par exemple, la violation de la relation entre χ_4 et κ_T apparaît définitivement comme un test trop draconien de la MCT.

Les expériences de cavité apportent également quelques clarifications. Tout d'abord, la température dynamique effective vue par une cavité est fortement dépendante de sa taille ! Plus profondément, il est intéressant de constater la sensibilité de χ_4 et de G_4 au changement de la dynamique. Ces deux observables apparaissent comme une véritable signature des hétérogénéités dynamiques. L'existence d'états mosaïques, comme le passage d'une dynamique entre états à une dynamique au sein d'un état est parfaitement visible.

Il serait particulièrement utile qu'une étude exhaustive similaire soit conduite dans d'autres systèmes (mélange binaire de sphères molles, liquides surfondus,...). Cela permettrait d'avoir accès à une mesure bien plus quantitative des exposants RFOT que celles proposées jusqu'ici.

Conclusion

Si l'exposé de ce travail est articulé autour de la recherche d'un modèle de dimension finie, il ne s'agit pas de la seule lecture possible de ces résultats. En guise de conclusion, il est utile de donner d'autres axes possibles de relecture. Actuellement, l'étude de la transition vitreuse s'articule autour de trois axes principaux.

Un premier axe est l'aboutissement des calculs de MCT. Cette théorie a, comme on l'a vu, apporté une contribution majeure dans la recherche d'une description quantitative de la transition vitreuse. Sa formulation définitive sera sans nul doute celle de la théorie de Landau de la transition vitreuse dans la phase de haute température. Notre travail illustre la portée de ses prédictions universelles, et met en lumière la robustesse variable de ces dernières. Nous pensons que cela peut servir de guide utile aux expérimentateurs travaillant sur des systèmes réels.

Un deuxième axe est celui des hétérogénéités dynamiques. Si ce concept est devenu très répandu, peu se soucient de ce qu'il cache. Les expériences de cavités montrent comment les hétérogénéités dynamiques peuvent être sensibles à la nature de la dynamique. Sa forme est une sonde particulièrement efficace. La disparition du pic de χ_4 dans les expériences de cavité donne une idée de ce à quoi la susceptibilité d'un colloïde très confiné pourrait ressembler. Mais de nombreux progrès sont encore à faire dans la compréhension de ces objets : quel est l'effet de l'apparition d'une dynamique activée sur le pic de χ_4 ? L'analyse du *finite-size scaling* du ROM est ici une base utile. Le mélange des différents régimes en taille finie dans ce modèle est un avertissement. La vérification de prédictions théoriques asymptotiques dans des systèmes réels pour des échelles intermédiaires est particulièrement délicate. De ce point de vue, l'étude des points fixes désordonnés s'avèrera vraisemblablement de plus en plus utile.

Le troisième axe est celui de la RFOT. Le modèle de dimension finie a tout d'abord le mérite d'être le premier. L'ensemble des tests que nous avons conduit montre qu'il s'agit d'un modèle de dimension finie avec une transition dont la phénoménologie est bien décrite par une transition 1-RSB.

Ce modèle a été construit pour mettre à l'épreuve la RFOT. L'étude que nous avons menée montre que cette théorie s'avère remarquablement en adéquation avec ce modèle, même les exposants θ et ϕ vérifient (pour autant qu'on puisse en juger) l'argument KTW. Néanmoins, ce modèle souffre de nombreuses imperfections : il est analytiquement difficile à étudier, seules des tailles restreintes sont accessibles. L'étude menée demande sans doute à être répétée sur d'autres modèles ou systèmes. Nous pensons que cette démarche pourrait s'avérer extrêmement fructueuse sur des modèles de liquides surfondus (modèle BKS, verre de Lennard-Jones...).

Bibliographie

- [1] C. Adams and J.H. Gibbs. *J. Chem. Phys.*, 28, 1958.
- [2] A. Aharony and A. B. Harris. *Phys. Rev. Lett.*, 77(18) :3700–3703, Oct 1996.
- [3] K. Aharony, A. in Phase transitions and critical phenomena. Academic Press, 1976.
- [4] A. Andreanov, G. Biroli, and J.-P. Bouchaud. *cond-mat*, page arXiv :0903.4619, 2009.
- [5] A. Andreanov, G. Biroli, and A. Lefèvre. *J. Stat. Mech.*, page P07008, 2006.
- [6] C.A. Angell. *Science*, 267 :1924, 1995.
- [7] A. Barrat, S. Franz, and G. Parisi. *J.Phys. A Math. Gen.*, 30, 1997.
- [8] H. Bässler. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :767, 1987.
- [9] U. Bengtzelius, W. Götze, and A. Sjölander. *J. Chem. Phys.*, 17 :5915, 1984.
- [10] L. Berthier and G. Biroli. *Glasses and Aging : A statistical mechanics perspective*. Encyclopedia of Complexity and Systems Science, Springer Science, 2008.
- [11] L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, W. Kob, K. Miyazaki, and D. Reichman. *J. Chem. Phys.*, 126 :184503, 2007.
- [12] L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, W Kob, K. Miyazaki, and D. Reichman. *J. Chem. Phys.*, 126 :184504, 2007.
- [13] L. Berthier and W. Kob. *J. Phys. : Condens Matt.*, 19, 2006.
- [14] A. Billoire, L. Giomi, and E. Marinari. *Europhys. Lett.*, 71 :824, 2005.
- [15] A. Billoire and E. Marinari. *Europhys. Lett.*, 60 :775–781, 2002.
- [16] K. Binder. *Rep. Prog. Phys.*, 60, 1997.
- [17] K. Binder, M. Nauenberg, V. Privman, and A. P. Young. *Phys. Rev. B*, 31 :1498–1502, 1985.
- [18] K. Binder and A.P. Young. *Rep. Prog. Phys.*, 58, 1986.
- [19] G. Biroli and J.-P. Bouchaud. *Europhys. Lett.*, 67 :21–27, 2004.
- [20] G. Biroli, J.-P. Bouchaud, A. Cavagna, T.S. Grigera, and P. Verrocchio. *Nature Physics*, 4 :771, 2008.
- [21] G. Biroli, J.-P. Bouchaud, K. Miyazaki, and D. Reichman. *Phys. Rev. Lett.*, 97(19) :195701, 2006.
- [22] G. Biroli and M. Mézard. *Phys. Rev. Lett.*, 88, 2002.
- [23] M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths. *Phys. Rev. A*, 4(3) :1071–1077, Sep 1971.
- [24] A.B. Bortz, M.H. Kalos, and J.L. Lebowitz. *J. Comput. Phys.*, 17, 1975.
- [25] J.-P. Bouchaud and G. Biroli. *J. Chem. Phys.*, 121 :7347, 2004.
- [26] J.-P. Bouchaud and M. Mézard. *J. Phys. I (France)*, 4 :1109, 1994.

- [27] C. Brangian. *Physica A*, 338 :471–478., 2003.
- [28] C. Brangian, W. Kob, and K. Binder. *Europhys. Lett.*, 53 :756, 2001.
- [29] C. Brangian, W. Kob, and K. Binder. *J.Phys. A : Math Gen*, 35 :191, 2002.
- [30] C. Brangian, W. Kob, and K. Binder. *Phil. Mag. B*, 82 :663, 2002.
- [31] A.J. Bray. Theory of phase ordering kinetics. *Adv. Phys.*, 51 :481–587, 2002.
- [32] É. Brézin. *J.Phys (Paris)*, 43 :15, 1982.
- [33] É. Brézin and J. Zinn-Justin. *Nuclear Phys. B*, 257 :867–893, 1985.
- [34] Y. Brumer and D.R. Reichman. *Phys. Rev. E*, 69, 2004.
- [35] C. Cammarota, A. Cavagna, Graderingo G., T.S. Grigera, and P. Verrocchio. *cond-mat*, page arXiv :0906.3868, 2009.
- [36] C. Cammarota, A. Cavagna, Graderingo G., T.S. Grigera, and P. Verrocchio. *cond-mat*, page arXiv :0906.1522, 2009.
- [37] S. Capaccioli, G. Ruocco, and F. Zamponi. *J. Chem. Phys.*, 120, 2004.
- [38] J.L. Cardy. *Finite-Size Scaling*. Elsevier Science Ltd, 1988.
- [39] J.L. Cardy. *Scaling and renormalization in satstical physics*. Cambridge University Press, 1996.
- [40] T. Castellani and A. Cavagna. *J. Stat. Mech.*, page P05012, 2005.
- [41] M. Cates and S. Ramaswamy. *Phys. Rev. Lett.*, 81, 1998.
- [42] A. Cavagna. *To appear in Phys. Rep.*, pages cond-mat arXiv :0903.4264, 2009.
- [43] A. Cavagna, J.P. Garrahan, and I. Giardina. *Phys. Rev. B*, 61, 2000.
- [44] A. Cavagna, I. Giardina, and G. Parisi. *Phys. Rev. B*, 57, 1998.
- [45] A. Cavagna, I. Giardina, and G. Parisi. *J. Phys. A Math. Gen.*, 34, 2001.
- [46] A. Cavagna, T.S. Grigera, and P. Verrocchio. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :187801, 2007.
- [47] J. T. Chayes, L. Chayes, Daniel S. Fisher, and T. Spencer. *Phys. Rev. Lett.*, 57(24) :2999–3002, Dec 1986.
- [48] R. Cherrier, D.S. Dean, and A. Lefèvre. *Phys. Rev. E*, 67 :046112, 2003.
- [49] R. Cherrier, D.S. Dean, and A. Lefèvre. *J. Phys. A*, 36 :3935, 2003.
- [50] J.H. Cornwall, R. Jackiw, and Tomboulis E. *Phys. Rev.*, 10, 1974.
- [51] A. Crisanti, H. Horner, and H.-J. Sommers. *Z. Phys B*, 23 :257, 1993.
- [52] A. Crisanti and F. Ritort. *Physica A*, 280 :155, 2000.
- [53] A. Crisanti and F. Ritort. *J.Phys : Condens. Matter*, 14 :1381, 2002.
- [54] A. Crisanti and H.-J. Sommers. *Z. Phys. B*, 87 :341, 1992.
- [55] A. Crisanti and H.-J. Sommers. *J. Phys. I (France)*, 5 :805, 1995.
- [56] L.F. Cugliandolo. *Slow Relaxations and nonequilibrium dynamics in condensed matter*, volume LXXVII of *Les Houches Summer School*, chapter 7 : Dynamics of Glassy Systems, pages 367–521. Springer Berlin / Heidelberg, 2004.
- [57] L.F. Cugliandolo and J. Kurchan. *Phys. Rev. Lett*, 71, 1993.
- [58] C. Dalle-Ferrier, C. Thibierge, C Alba-Simionesco, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, F. Ladieu, D. L'Hôte, and G. Tarjus. *Phys. Rev. Lett.*, 92, 2004.
- [59] S.P. Das and G.F. Mazenko. *Phys. Rev. A*, 34, 1986.
- [60] S.P. Das, G.F. Mazenko, S. Ramaswamy, and J.J Toner. *Phys. Rev. Lett.*, 54, 1985.
- [61] C. de Dominicis. *J. Phys. (France) Colloq*, 1, 1976.

- [62] C. de Dominicis. *Phys. Rev. B*, 18 :4913, 1978.
- [63] C. de Dominicis and I. Giardinà. *Random fields and spin glasses*. Cambridge University Press, 2006.
- [64] C. de Dominicis and P.C. Martin. *J. Math. Phys.*, 5, 1964.
- [65] C. de Dominicis and L. Peliti. *Phys. Rev. B*, 18 :353, 1978.
- [66] D.S. Dean. *J. Phys. A Math. Gen.*, 29, 1996.
- [67] P.G. Debenedetti and F.H. Stillinger. *Nature*, 410 :259, 2001.
- [68] B. Derrida. *Phys. Rev. Lett.*, 45 :79, 1980.
- [69] B. Derrida. *Phys. Rev. B*, 24 :2613, 1981.
- [70] C. Donati, S. Franz, S. Glotzer, and G. Parisi. *J. Non-Cryst. Sol.*, 307 :215–224, 2002.
- [71] B. Drossel and M.A. Moore. *Phys. Rev. Lett.*, 89, 2002.
- [72] M. Dzero, J. Schmalian, and P.G. Wolynes. *Phys. Rev. B*, 72, 2004.
- [73] D. Forster. *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry and correlation functions*. Benjamin, 2001.
- [74] S. Franz. *J. Stat. Mech.*, 2005.
- [75] S. Franz and Parisi G. *Phys. Rev Lett.*, 79, 1997.
- [76] S. Franz and A. Montanari. *J. Phys. A*, 40 :F251, 2007.
- [77] S. Franz and G. Parisi. *J. Phys. I (France)*, 5 :1401, 1995.
- [78] S. Franz and G. Parisi. *J. Phys. Condens. Matter*, 12 :6335, 2000.
- [79] S. Franz, G. Parisi, and F. Ricci-Tersenghi. *J. Phys.A : Math. Theor.*, 41 :324011, 2008.
- [80] S. Franz and F.L. Toninelli. *Phys. Rev. Lett.*, 92, 2004.
- [81] M. Fuchs, W. Götze, I. Hofacker, and A. Latz. *J. Phys. Condens. Matter*, 3 :5047, 1991.
- [82] G.S. Fulcher. *J. Am. Ceram. Soc.*, 8, 1923.
- [83] A. Georges and J.S. Yedidia. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 24 :2173, 1991.
- [84] T. Gleim, W. Kob, and K. Binder. *Phys. Rev. Lett.*, 81, 1998.
- [85] M. Goldstein. *J. Chem. Phys.*, 51 :3728, 1969.
- [86] W. Götze. *Z. Phys. B : Condensed-Matter*, 56 :139–154, 1984.
- [87] W. Götze. *Liquids, Freezing and the Glass Transition*, volume LI of *Les Houches Summer School*, page 287. North-Holland / Amsterdam, 1991.
- [88] W. Götze and L. Sjögren. *Z. Phys B : Condensed-Matter*, 65, 1985.
- [89] T.S. Grigera, A. Cavagna, I. Giardinà, and G. Parisi. *Phys. Rev. Lett.*, 88, 2002.
- [90] A.B. Harris. *J. Phys. C*, 7 :1671, 1974.
- [91] R.W. Haymaker. *Rev. Nuovo Cimento*, 14, 1991.
- [92] K. Hukusima and K. Nemoto. *J. Phys. Soc. Japan*, 65 :1604–1608, 1996.
- [93] M.M. Hurley and P. Harrowell. *Phys. Rev. E*, 52, 1995.
- [94] L. B. Ioffe and D. Sherrington. *Phys. Rev. B*, 57 :7666, 1998.
- [95] c. Itzykson and J.-B. Zuber. *J. Math. Phys.*, 21, 1980.
- [96] H.K. Janssen. *Z. Phys B*, 23 :377, 1976.
- [97] M. Kač. *Physics Fluids*, 2, 1959.

- [98] M. Kač and C.J. Thompson. *J. Math. Phys.*, 10, 1969.
- [99] M. Kač, G.E. Uhlenbeck, and P.C. Hemmer. *J. Math. Phys.*, 4, 1963.
- [100] A. Karmakar, D. Dasgupta, and S. Sastry. *PNAS*, 106 :3675, 2009.
- [101] H.G. Katzgraber, D. Larson, and A.P. Young. *Phys. Rev. Lett.*, 102, 2009.
- [102] H.G. Katzgraber and A.P. Young. *Phys. Rev. Lett.*, 93, 2004.
- [103] H.G. Katzgraber and A.P. Young. *Phys. Rev. B*, 72, 2005.
- [104] K. Kawasaki. *Mode coupling and critical dynamics*. Phase transitions and critical phenomena. Academic Press, 1976.
- [105] B. Kim and K. Kawasaki. *J. Stat. Mech.*, page P02004, 2008.
- [106] B. Kim and A. Latz. *Europhys. Lett.*, 53 :660, 2001.
- [107] T.R. Kirkpatrick and Thirumalai. *Phys. Rev. B*, 36 :5388, 1987.
- [108] T.R. Kirkpatrick and D. Thirumalai. *Phys. Rev. Lett.*, 58, 1986.
- [109] T.R. Kirkpatrick, D. Thirumalai, and P.G. Wolynes. *Phys. Rev. A*, 40 :1045, 1989.
- [110] T.R. Kirkpatrick and P.G. Wolynes. *Phys. Rev. B*, 36 :8552, 1987.
- [111] T.R. Kirkpatrick and P.G. Wolynes. *Phys. Rev. B*, 35 :3072, 1987.
- [112] T.R. Kirkpatrick and P.G. Wolynes. *Phys. Rev. A*, 35 :3072, 1987.
- [113] W. Kob. *Slow relaxation and non-equilibrium dynamics in condensed matter*, volume LXXVII of *Les Houches Summer School*. North-Holland / Amsterdam, 2002.
- [114] W. Kob and H.C. Andersen. *Phys. Rev. E*, 52 :4134, 1995.
- [115] J. Kurchan, G. Parisi, and M.A. Virasoro. *J. Phys. I (France)*, 3 :1819, 1993.
- [116] L.D. Landau. *Zh. Eksper. Teor. Fis.*, 7, 1937.
- [117] D. Larson, H.G. Katzgraber, M.A. Moore, and A.P. Young. *Cond-mat*, arxiv :0908.2224, 2009.
- [118] J.L. Lebowitz and O. Penrose. *J. Math. Phys.*, 6, 1966.
- [119] R.L. Leheny, S.R. Nagel, D.L. Price, K. Suzuya, P. Thiyagarajan, and N. Menon. *J. Chem. Phys.*, 105, 1996.
- [120] E. Leutheusser. *Phys. Rev. A*, 29, 1984.
- [121] L. Leuzzi, G. Parisi, and J.J. Ruiz-Lorenzo. *Phys. Rev. Lett.*, 101, 2008.
- [122] A. V. Lopatin and L.B. Ioffe. *Phys. Rev. B*, 60 :6412, 1999.
- [123] A. V. Lopatin and L.B. Ioffe. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4208, 2000.
- [124] V. Lubchenko and P. G. Wolynes. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 58 :235, 2007.
- [125] E. Marinari, C. Naitza, G. Parisi, M. Picco, F. Ritort, and F. Zuliani. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :5175, 1999.
- [126] E. Marinari, G. Parisi, and F. Ritort. *J. Phys.A : Math.Gen.*, 27 :7647, 1994.
- [127] P.C. Martin, E.D. de Siggia, and H.A. Rose. *Phys. Rev. A*, 1973.
- [128] L.-M. Martinez and C.A. Angell. *Nature*, 410 :663, 2001.
- [129] P. Mayer, K. Miyazaki, and D.R. Reichman. *Phys. Rev. Lett*, 97, 2006.
- [130] M. Mézard. *Physica A*, 265 :352, 1999.
- [131] M. Mezard and W. Krauth. *Z. Phys. B Condens. Matter*, 97, 1995.
- [132] M. Mézard and G. Parisi. *J.Phys. A*, 29, 1995.
- [133] M. Mézard and G. Parisi. *Phys. Rev. Lett.*, 82, 1998.

- [134] M. Mézard and G. Parisi. *J. Chem. Phys.*, 111 :1076, 1999.
- [135] M. Mézard, G. Parisi, and M.A. Virasoro. *Spin Glass Theory and Beyond*. World Scientific, Singapore, 1987.
- [136] R. Monasson. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :2847, 1995.
- [137] A. Montanari and G. Semerjian. *J. Stat. Phys.*, 125, 2003.
- [138] C. Monthus and T. Garel. *Markov Processes and Related Fields*, 13 :731–760, 2007.
- [139] H. Mori. *Prog. Theor. Phys.*, 33 :423, 1965.
- [140] J.C. Pardo, P. Lukenheimer, and A. Loidl. *Phys. Rev. E*, 76, 2007.
- [141] G. Parisi. *Slow relaxation and non-equilibrium dynamics in condensed matter*, volume LXXVII of *Les Houches Summer School*. North-Holland / Amsterdam, 2002.
- [142] G. Parisi and M. Potters. *J. Phys. A*, 28 :5267, 1995.
- [143] M. Pica Ciamarra, M. Tarzia, A. de Candia, and A. Coniglio. *Phys. Rev. E*, 67, 2003.
- [144] M. Pica Ciamarra, M. Tarzia, A. de Candia, and A. Coniglio. *Phys. Rev. E*, 68, 2003.
- [145] M. Picco, F. Ritort, and M. Sales. *The European physical journal. B*, 19(4) :565–582, 2001.
- [146] F. Rao, A. Crisanti, and F. Ritort. *To appear in Phil.Mag B*, *arXiv :cond-mat/0308221*.
- [147] D.R. Reichman and P. Charbonneau. *J. Stat. Mech.*, page P05013, 2005.
- [148] R. Richert and C.A. Angell. *J. Chem. Phys.*, 9016 :108, 1998.
- [149] H. Rieger. *Phys. Rev. B*, 46, 1992.
- [150] O. Rivoire, G. Biroli, O.C. Martin, and M. Mézard. *Eur. Phys. J. B*, 37, 2004.
- [151] G. Ruocco, F. Sciortino, F. Zamponi, C. De Michele, and T. Scopigno. *J. Chem. Phys.*, 120, 2004.
- [152] L. Santen and W. Krauth. *Nature*, 405 :550, 2000.
- [153] T. Sarlat, A. Billoire, G. Biroli, and J.-P. Bouchaud. *J. Stat. Mech.*, 2009.
- [154] T. Sarlat, A. Lelarge, E. Sondegard, and D. Vandembroucq. *Eur. Phys. J. B*, 54, 2006.
- [155] H. Sompolinsky and A. Zippelius. *Phys. Rev. B*, 25 :68601, 1982.
- [156] G. Szamel and E. Flenner. *Europhys. Lett.*, 67, 2004.
- [157] G. Tamman and W. Hesse. *Z. Anorg. Allg. Chem*, 156, 1926.
- [158] G. Tarjus, A. Kivelson, Z. Nussinov, and P. Viot. *J. Phys. : Condens. Matter*, 17, 2005.
- [159] D.J. Thouless, P.W. Anderson, and R.G. Palmer. *Phil. Mag. A*, 35 :593, 1987.
- [160] A. Tölle, H. Schober, J. Wuttke, and F. Fujara. *Eur. Phys. J. B*, 5 :231, 1998.
- [161] C. Toninelli, G. Biroli, and D.S. Fisher. *Phys. Rev. E*, 76, 2007.
- [162] C. Toninelli, M. Wyart, L. Berthier, G. Biroli, and J.-P. Bouchaud. *Phys. Rev. E*, 71 :041505, 2005.
- [163] U. Tracht, M. Wilhelm, A. Heuer, H. Feng, K. Schmidt-Rohr, and H.W. Spiess. *Phys. Rev. Lett.*, 81, 1998.
- [164] H. Vogel. *Z. Phys.*, 22, 1921.
- [165] S. Wiseman and E. Domany. *Phys. Rev. E*, 58(3) :2938–2951, Sep 1998.
- [166] F. Zamponi. Some applications of recent theories of disordered systems. *PhD Thesis*, 2006.

- [167] J. Zinn-Justin. *Quantum field theory and critical phenomena*. Oxford University Press, 2002.
- [168] R. Zwanzig. *Nonequilibrium statistical mechanics*. Oxford University Press, 2001.